Міністерство освіти і науки України
Харківський національний університет імені В. Н. Каразіна

Кваліфікаційна наукова
праця на правах рукопису

Шимановський Андрій Романович

УДК: 536.331+536.764

ДИСЕРТАЦІЯ

«СИМЕТРІЯ, КОНСОЛІДАЦІЯ, МОДУЛЬОВАНІ СТРУКТУРИ ПАРАМЕТРУ ПОРЯДКУ»

Спеціальність 105 Прикладна фізика та наноматеріали
(Галузь знань 10 Природничі науки)

Подається на здобуття ступеня доктора філософії

Дисертація містить результати власних досліджень. Використання ідей, результатів і текстів інших авторів мають посилання на відповідне джерело

_____ Шимановський А. Р.

Наукові керівники:
Богатиренко Сергій Іванович, кандидат фізико-математичних наук, доцент
Литвиненко Володимир Вікторович, доктор технічних наук, член-кореспондент НАН України

Харків – 2026

АНОТАЦІЯ

Шимановський А. Р. Симетрія, консолідація, модульовані структури параметру порядку. – Кваліфікаційна наукова праця на правах рукопису.

Дисертація на здобуття наукового ступеня доктора філософії за спеціальністю 105 Прикладна фізика та наноматеріали (Галузь знань 10 Природничі науки). – Харківський національний університет імені В. Н. Каразіна Міністерства освіти і науки України, Харків, 2026.

Дисертаційна робота присвячена комплексному теоретичному та феноменологічному аналізу властивостей просторово-модульованих структур різної фізичної природи у твердих тілах (зокрема сегнетоелектриках та металах) Основна увага зосереджена на еволюції та стабільності цих об’єктів на околиці точок фазових переходів.

У **вступі** обґрунтовано актуальність теми, визначено мету, об’єкт, предмет та методи дослідження. Сформульовано наукову новизну та практичне значення результатів, наведено відомості про апробацію та структуру роботи.

Розділ 1 містить огляд літератури щодо фізики просторово неоднорідних станів у твердих тілах. Розглянуто системи з однокомпонентним параметром порядку, природу неспівмірних фаз у сегнетоелектриках I та II типів, а також сучасні узагальнення теорії Ландау. Окрему увагу приділено впливу інтенсивного випромінювання на фазові перетворення в молібдені.

У **розділі 2** описано методику опромінення молібденових мішеней на прискорювачі ТЕМП-А та комплекс методів дослідження їхньої структури й властивостей (СЕМ, РСА, мікротвердість). Розроблено математичну модель теплових процесів у циліндричних координатах, реалізовану на мові Python. Модель базується на чисельному розв’язанні нелінійного рівняння теплопровідності з урахуванням фазових переходів та температурних залежностей властивостей матеріалу.

Розділ 3 присвячено розробці феноменологічної моделі фазових переходів із виникненням модульованих структур. Проаналізовано фізичний

зміст градієнтних доданків у термодинамічному потенціалі. Досліджено сценарії виникнення bell-солітонних та kink-солітонних структур, визначено умови їхньої термодинамічної стійкості та побудовано відповідні фазові діаграми. Розглянуто особливості релаксації параметра порядку в органічних середовищах.

У **розділі 4** отримано точні та наближені аналітичні рішення для просторових розподілів параметра порядку, виражені через еліптичні функції Якобі (синус, косинус, дельта-амплітуду). Також отримані умови існування фаз, та умовам повної еволюції фаз впорядкована-несумірна-сумірна.

Розділ 5 присвячено аналізу фазових перетворень та ефектів порушення симетрії в молібденових мішенях під дією концентрованих потоків іонізуючого випромінювання. Наведено результати моделювання структурних змін у матеріалі в екстремальних умовах.

Наукова новизна роботи полягає у наступному:

1. Удосконалено феноменологічний опис фазових переходів для систем з модульованими структурами шляхом детального аналізу градієнтних внесків.

2. Виявлено умови реалізації та стабільності нових типів солітонних рішень (bell- та kink-типу) залежно від параметрів термодинамічного потенціалу.

3. Застосовано груповий аналіз до варіаційних рівнянь, що описують неспівмірні стани, що дозволило знайти різні типи розв’язків.

4. Отримано сімейство точних аналітичних рішень для просторового розподілу параметра порядку у формі еліптичних функцій Якобі.

5. Встановлено закономірності порушення симетрії та фазової нестабільності молібдену під впливом інтенсивного опромінення.

Результати включені до програми впровадження за відомчою темою Інституту електрофізики і радіаційних технологій НАН України «Наномасштабні структури в металах і сплавах як чинник впливу на радіаційну стійкість, електрофізичні та механічні властивості»

Ключові слова: конденсовані системи, тверді тіла, параметр порядку, фазовий перехід, порушення симетрії, структурно-фазові перетворення, мікроструктура, несумірна фаза, фізика поверхні, мультикритична точка, молібден, механічні властивості, мікротвердість, опромінення, нелінійні моделі.

ABSTRACT

Shymanovskyi, A. R. Symmetry, consolidation, and modulated structures of the order parameter. – Qualifying research paper in the form of a manuscript.

Thesis for the degree of Doctor of Philosophy in the speciality 105 Applied Physics and Nanomaterials (Field of Knowledge 10 Natural Sciences). – V. N. Karazin Kharkiv National University of the Ministry of Education and Science of Ukraine, Kharkiv, 2026.

This thesis is devoted to a comprehensive theoretical and phenomenological analysis of the properties of spatially modulated structures of various physical natures in solids (in particular, ferroelectrics and metals). The main focus is on the evolution and stability of these objects in the vicinity of phase transition points.

The **introduction** justifies the relevance of the topic and defines the aim, object, subject and methods of the research. The scientific novelty and practical significance of the results are formulated, and details regarding the validation and structure of the work are provided.

Chapter 1 contains a review of the literature on the physics of spatially inhomogeneous states in solids. Systems with a single-component order parameter, the nature of incommensurate phases in type I and II ferroelectrics, and modern generalisations of Landau's theory are considered. Particular attention is paid to the effect of intense radiation on phase transitions in molybdenum.

Chapter 2 describes the procedure for irradiating molybdenum targets using the TEMP-A accelerator and details the comprehensive methods used to study their structure and properties (SEM, XRD, and microhardness). A mathematical model of thermal processes in cylindrical coordinates was developed and implemented in the software using Python. The model is based on the numerical solution of the nonlinear heat equation, accounting for phase transitions and temperature-dependent material properties.

Chapter 3 is devoted to the development of a phenomenological model of phase transitions involving the emergence of modulated structures. The physical

meaning of the gradient terms in the thermodynamic potential is analysed. Scenarios for the emergence of Bell-soliton and kink-soliton structures are investigated, conditions for their thermodynamic stability are determined, and corresponding phase diagrams are constructed. The peculiarities of the relaxation of the order parameter in organic media are examined.

In **chapter 4**, exact and approximate analytical solutions are obtained for the spatial distributions of the order parameter, expressed in terms of elliptic Jacobian functions (sine, cosine, delta-amplitude). Conditions for the existence of phases are also derived, as well as conditions for the complete evolution of phases from ordered to non-commensurate to commensurate.

Chapter 5 is devoted to the analysis of phase transformations and symmetry-breaking effects in molybdenum targets under the action of concentrated ionising radiation fluxes. Results of modelling structural changes in the material under extreme conditions are presented.

The scientific novelty of the work lies in the following:

1. The phenomenological description of phase transitions for systems with modulated structures has been refined through a detailed analysis of gradient contributions.

2. The conditions for the realisation and stability of new types of soliton solutions (bell- and kink-type) have been identified, depending on the parameters of the thermodynamic potential.

3. Group analysis has been applied to variational equations describing incommensurate states, which has enabled the discovery of various types of solutions.

4. A family of exact analytical solutions for the spatial distribution of the order parameter in the form of elliptic Jacobi functions has been obtained.

5. Patterns of symmetry breaking and phase instability in molybdenum under the influence of intense irradiation have been established.

The results are included in the implementation programme under the departmental theme of the Institute of Electrophysics and Radiation Technologies of

the National Academy of Sciences of Ukraine: ‘Nanoscale structures in metals and alloys as a factor influencing radiation resistance, electrophysical and mechanical properties’.

Keywords: condensed matter systems, solids, order parameter, phase transition, symmetry breaking, structural-phase transformations, microstructure, incommensurate phase, surface physics, multicritical point, molybdenum, mechanical properties, microhardness, irradiation, nonlinear models.

СПИСОК ПУБЛІКАЦІЙ ЗДОБУВАЧА ЗА ТЕМОЮ ДИСЕРТАЦІЇ

Наукові праці в наукових фахових виданнях України, що входять до міжнародних наукометричних баз Scopus та Web of Science:

1. **A. R. Shymanovskyi** and V. F. Klepikov, “Spontaneous chirality of the organic environment as a sign of external radiation exposure”, *Problems of Atomic Science and Technology*, vol. 157, no. 3, pp. 139–141, 2025, doi: 10.46813/2025-157-139.

(Особистий внесок здобувача: участь у формулюванні та аналізі літературних даних, інтерпретації результатів та написанні статті)

2. S. E. Donets, V. V. Lytvynenko, O. L. Rak, V. V. Shatov and **A. R. Shymanovskyi**, “Estimation of the effect of high-current electron beam irradiation on the radiative heat transfer modes on the molybdenum target”, *Problems of Atomic Science and Technology*, vol. 159, no. 5, pp. 45–49, 2025, doi: 10.46813/2025-159-045.

(Особистий внесок здобувача: виконання аналітичних обчислень та розрахунків, написання окремих розділів, участь в обговоренні результатів)

3. V. V. Bryukhovetsky, S. E. Donets, S. A. Kniaziev, O. V. Subbotin, V. V. Lytvynenko, S. I. Bogatyrenko, O. L. Rak and **A. R. Shymanovskyi**, “Structural and phase transformations in a molybdenum target under the impact action of a high-power electron beam”, *Problems of Atomic Science and Technology*, vol. 160, no. 6, pp. 76–82, 2025, doi: 10.46813/2025-160-076.

(Особистий внесок здобувача: виконання аналітичних обчислень та розрахунків, написання окремих розділів, участь в обговоренні результатів)

4. **A. R. Shymanovskyi** and V. F. Klepikov, “Partial Exact Solutions of Nonlinear Distribution One-Component Order Parameter in Equilibrium Systems”, *East European Journal of Physics*, vol. 158, no. 4, pp. 157–163, 2025, doi: 10.26565/2312-4334-2025-4-13.

(Особистий внесок здобувача: участь у формулюванні та аналізі літературних даних, виконання аналітичних обчислень та розрахунків,

інтерпретації результатів та написанні статті)

5. **A. R. Shymanovskyi** and V. F. Klepikov, “Analytical solutions of the thermodynamic potential of the Michelson model in equilibrium systems”, *Problems of Atomic Science and Technology*, vol. 161, no. 1, pp. 103–107, 2026, doi: 10.46813/2026-161-103.

(Особистий внесок здобувача: участь у формулюванні та аналізі літературних даних, виконання аналітичних обчислень та розрахунків, інтерпретації результатів та написанні статті)

Наукові праці, які засвідчують апробацію матеріалів дисертації:

6. **A. R. Shymanovskyi,** V. F. Klepikov, and A. V. Kotova, “Evolution and critical phenomena”, in XII Ukrainian Scientific Conference “*Academic and Scientific Challenges of Diverse Fields of Knowledge in the 21st Century. CLIL in Action”*, Kharkiv, 24 Mar. 2023, Kharkiv: V. N. Karazin Kharkiv Nat. Univ., 2023, pp. 323–329.

(Особистий внесок здобувача: участь у формулюванні задач дослідження, аналізі літературних даних, інтерпретації результатів, написанні статті, доповідь)

7. **А. Р. Шимановський** і В. Ф. Клепіков, “Термодинамічний підхід до опису радіаційно-стимульованих перетворень в органічних речовинах”, у ІІ Міжнар. наук.-техн. конф. імені В. Воєводіна *“Проблеми сучасної ядерної енергетики”*, Харків, 16–18 Квіт. 2025, Київ: Вістка, 2025. с. 47.

(Особистий внесок здобувача: участь у формулюванні задач дослідження, аналізі літературних даних, інтерпретації результатів, написанні тез, доповідь)

8. **А. Р. Шимановський** і В. Ф. Клепіков, “Нелінійні властивості просторової модуляції параметру порядку в тіокарбаміді”, у *10-та Українська наукова конференція з фізики напівпровідників*, Ужгород, 26–30 Трав. 2025, Ужгород: ТОВ «РІК-У», 2025, с. 147.

(Особистий внесок здобувача: участь у формулюванні задач

дослідження, аналізі літературних даних, інтерпретації результатів, написанні тез, доповідь)

9. С. Є. Донець, В. В. Литвиненко, О. А. Мєлякова й **А. Р. Шимановський** “Особливості радіаційних методів сепарації відходів пластику для їх переробки та запобігання засміченню морського середовища”, у XVI Міжнар. наук.-практ. конф. *“Сучасні інформаційні та інноваційні технології на транспорті (MINTT – 2025)”*, Одеса, 28–30 Трав. 2025, Одеса: Херсонська державна морська академія, 2025, с. 377–379.

(Особистий внесок здобувача: аналіз літературних даних, інтерпретації результатів, написанні окремого розділу)

10. **А. Р. Шимановський** і В. Ф. Клепіков “Частинні точні розв’язки моделі Міхельсона фазових переходів першого роду в чистих матеріалах”, у 7-ї Міжнар. конф. *“Високочисті матеріали: отримання, застосування, властивості”*, Харків, 15–17 Вер. 2025, Харків: ННЦ ХФТІ, 2025, с. 46.

(Особистий внесок здобувача: участь у формулюванні задач дослідження, аналізі літературних даних, інтерпретації результатів, написанні статті та тези, доповідь)

ЗМІСТ

ПЕРЕЛІК СКОРОЧЕНЬ, УМОВНИХ ПОЗНАЧЕНЬ ТА ТЕРМІНІВ……. 14
ВСТУП…….. 15
РОЗДІЛ 1. ЛІТЕРАТУРНИЙ ОГЛЯД. ПРОСТОРОВО НЕОДНОРІДНІ СТАНИ І ФАЗОВІ ПЕРЕХОДИ В ТВЕРДИХ ТІЛАХ……. 22
1.1. Просторово неоднорідні стани в твердих тілах……... 22
1.2. Просторово неоднорідні системи з однокомпонентним параметром порядку…… 26
1.3. Несумірні фази в сегнетоелектриках І і ІІ типу……... 28
1.3.1. Моделі систем ІІ типу з вторинним параметром порядку 33
1.4. Теоретичні моделі, що узагальнюють чи доповнюють теорію Ландау фазових переходів…….. 35
1.5. Фазові перетворення в молібдені під впливом інтенсивних потоків випромінювання……. 38
Висновки до розділу 1……. 48
РОЗДІЛ 2. ОБ’ЄКТИ, МЕТОДИ ДОСЛІДЖЕНЬ ТА ЧИСЕЛЬНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ТЕПЛОВИХ ПРОЦЕСІВ…… 50
2.1. Об’єкти дослідження та методика опромінення електронним пучком……... 50
2.2. Методи дослідження мікроструктури, фазового складу та механічних властивостей…… 50
2.3. Математична модель теплових процесів та чисельний алгоритм розрахунку…… 52
2.4. Температурні залежності теплофізичних властивостей молібдену 53
2.5. Чисельна реалізація алгоритму та моделювання фазових переходів……... 55
2.6. Методика обробки та візуалізації результатів моделювання…….. 56
Висновки до розділу 2……. 57

РОЗДІЛ 3. ФЕНОМЕНОЛОГІЧНА МОДЕЛЬ ФАЗОВИХ ПЕРЕХОДІВ З ВИНИКНЕННЯМ ПРОСТОРОВО НЕОДНОРОДНИХ СТАНІВ…….. 58

3.1. Феноменологічний опис систем із модульованими структурами однокомпонентного параметра порядку…… 58

3.1.1. Фізичний та математичний зміст градієнтних доданків у виразі для ТП…… 61

3.2. Якісний аналіз допустимих фаз. Сценарій із виникненням bell-солітонних структур…… 64

3.2.1. Варіаційне диференційне рівняння (ВДР)…….. 64

3.2.2. Деякі можливі типи рішень ВДР…….. 66

3.2.3. Послідовність фаз з появою bell-солітонних структур….. 68

3.2.4. Умови стійкості розглянутих фаз……. 73

3.3. Сценарій фазових переходів, що припускає появу kink-солітонної фази……... 74

3.3.1. Аналіз фазової діаграми ($\varphi'^2 - \varphi$)…… 77

3.4. Роль інваріанту $g \cdot (\varphi'\varphi)^2$……..... 82

3.4.1. Аналогії з теорією невідповідних фаз у системах у двокомпонентному ПП…… 83

3.4.2. Граничні значення параметра g…… 87

3.4.3. Залежність $g^2(q)$…… 88

3.4.4. Стабільність термодинамічного потенціалу при $g > 0$….. 89

3.5. Релаксація параметру порядку в органічних середовищах…….. 90

Висновки до розділу 3……. 94

РОЗДІЛ 4. ЧАСТИННІ ТОЧНІ ТА НАБЛИЖЕНІ РОЗВ'ЯЗКИ ВАРІАЦІЙНОГО РІВНЯННЯ ДЛЯ СИСТЕМ З НЕСПІВМІРНИМИ СТАНАМИ……... 96

4.1. Розподіли ПП, що виражаються через еліптичний синус Якобі… 96

4.1.1. Апроксимація параметра порядку за допомогою еліптичного синуса…….. 99

4.1.2. Умови існування кінк-солітонних рішень……... 111

4.2. Розподіли ПП, що виражаються через еліптичний косинус Якобі 112

4.3. Розподіли ПП, що виражаються через дельта-амплітуду Якобі….. 126

4.4. Висновки до розділу 4……. 133

РОЗДІЛ 5. ФАЗОВІ ПЕРЕТВОРЕННЯ ТА ЕФЕКТИ ПОРУШЕННЯ СИМЕТРІЇ У МОЛІБДЕНОВІЙ МІШЕНІ ПІД ДІЄЮ КОНЦЕНТРОВАНИХ ПОТОКІВ ІОНІЗУЮЧОГО ВИПРОМІНЮВАННЯ…… 134

5.1. Фізична природа опромінюваної молібденової мішені…….. 134

5.2. Мікроструктурні зміни та епітаксіальний ріст переплавленого шару……... 138

5.3. Моделювання температурних полів та аналіз нестійкостей…… 145

Висновки до розділу 5……. 148

ВИСНОВКИ……. 149

СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ…… 152

ДОДАТОК А……. 175

ПЕРЕЛІК СКОРОЧЕНЬ, УМОВНИХ ПОЗНАЧЕНЬ ТА ТЕРМІНІВ

БМ	Бенара-Марангоні (ефект)
ВДР	варіаційне диференційне рівняння
ІЧ	інфрачервоний (діапазон)
ПП	параметр порядку
РСА	рентгеноструктурний аналіз
СЕМ	скануюча електронна мікроскопія
СЕП	сильнострумовий електронний пучок
СПС	спонтанне порушення симетрії
СРЕП	сильнострумовий релятивістський електронний пучок
ТП	термодинамічний потенціал
УФ	ультрафіолетовий (діапазон)
ФП	фазовий перехід
FDM	Finite Difference Method (метод скінченних різниць)
FeRAM	Ferroelectric Random Access Memory (сегнетоелектрична оперативна пам’ять)

ВСТУП

Актуальність теми. Дослідження фізичних систем із неоднорідним просторовим розподілом параметру порядку (ПП) (магнітного моменту, поляризації тощо), а також фазових переходів, що зумовлюють появу таких станів, залишається одним із пріоритетних завдань сучасної фізики протягом останніх десятиліть. Значною мірою це пов’язано з тим, що результати, отримані при дослідженні різних магнітних систем, сегнетоелектриків, надпровідників відіграли важливу роль у розробці новітніх технологій у мікроелектроніці, обчислювальній техніці та створенні матеріалів із заданими властивостями. З іншого боку, вдосконалення уявлень з цього питання сприяло розвитку фізичних і математичних методів, мають важливе, а деяких випадках універсальне значення. Зокрема, йдеться про утвердження варіаційного принципу, як основоположного постулату фізики, про широке застосування симетрійного аналізу та дослідження нелінійних явищ і проблем стійкості станів.

Прикладами систем з просторово неоднорідним розподілом параметра порядку є, зокрема, доменні структури різних типів, магнітні структури типу спінових хвиль, модульовані структури, що виникають при різних структурних фазових переходах, хвилі густини заряду в металах, мікрофазове розшарування в колоїдних чи поверхнево-активних речовинах і т.д.

Особливий інтерес становить з’ясування властивостей систем з неоднорідним розподілом параметра порядку поблизу точок фазових перетворень, зокрема при значеннях фізичних характеристик системи, коли феноменологічний опис все ще допустимий. Цей інтерес зумовлений тим, що поведінка впорядкованих середовищ у критичній області, як правило, істотно відрізняється від їхньої поведінки далеко від точок фазових переходів. Наприклад, доменні структури вже не можна описати як сукупність різко розмежованих областей. Встановлення цих відмінностей та розуміння їх причин важливо при з’ясуванні властивостей та типів допустимих фаз та аналізі механізмів фазових переходів. Використання феноменологічних

підходів (таких як теорія Ландау фазових переходів другого роду), в основі яких лежать перші принципи фізики, дозволяє отримувати результати, що відрізняються великою спільністю і достовірністю. Разом з тим, теоретичне розуміння системи з неоднорідним розподілом параметра порядку поблизу точок фазових перетворень залишається неповним, що створює розрив між теорією та наявними експериментальними даними.

Неоднорідності параметра порядку просторово однорідних середовищах можуть бути зумовлені різними чинниками. Таким фактором, по-перше, є наявність зовнішньої межі, що виявляється, зокрема, або в конкуренції об'ємної та поверхневої анізотропії (що породжує неоднорідність параметра порядку в напрямку нормалі до поверхні зразка), або в конкуренції об'ємної та поверхневої енергій (що призводить до утворення доменних структур). По-друге, просторова модуляція параметра порядку може бути наслідком конкуренції та компромісу внутрішніх взаємодій, як це має місце у разі несумірних структур.

Разом з тим, з формальної точки зору, коли не береться до уваги конкретний фізичний зміст конкуруючих членів, вищезгадані ситуації виникають у результаті конкуренції низки доданків у виразах для термодинамічних потенціалів системи. Це призводить до появи кількох класів, які є близькими за структурою до нелінійних варіаційних рівнянь Ейлера. Аналіз таких рівнянь, зокрема, симетрійний аналіз дозволяє виявити загальні властивості систем з неоднорідним параметром порядку, полегшує пошук рішень, зокрема, рішень спеціального виду (солітони, кінки і т. д.). Цей перспективний напрямок нині розвинений недостатньо.

Критична поведінка упорядкованих фаз у конденсованих середовищах залишається однією з центральних проблем фізики твердого тіла. Перехід речовини у твердий стан сам собою може бути пов'язаний з просторовим упорядкуванням – утворенням кристалічної структури. Прикладами просторового впорядкування є фазові переходи (ФП) у твердих тілах, а також утворення модульованих структур із різними періодами модуляції. Труднощі

в описі впорядкування у твердих тілах пов’язані з необхідністю врахування багатьох ступенів свободи в масштабах від атомних до макроскопічних. Дослідження впорядкованих станів у твердих тілах важливе як із загальнофізичної точки зору, так і з прикладної.

Об’єктом дослідження є фазові переходи першого та другого роду в конденсованих системах, зокрема у сегнетоелектриках, тугоплавких металах, та органічних середовищах.

Предметом дослідження є модульовані структури параметру порядку, що описуються варіаційним рівнянням термодинамічного потенціалу, та впорядковані структури у конденсованих системах під дією критичних чинників.

Мета та основні завдання дослідження. Метою дисертаційної роботи є комплексне теоретичне дослідження та з’ясування особливостей критичної поведінки твердих тіл із просторово-модульованим упорядкуванням. Основна увага приділяється аналізу еволюції параметра порядку в околицях точок Ліфшиця та мультикритичних точок.

Для досягнення поставленої мети було необхідно виконати **такі завдання:**

- Сформулювати та обґрунтувати модель, здатну коректно описувати критичну поведінку системи, що допускає мультикритичні точки з властивостями точки Ліфшиця.
- Побудувати нові просторові розподіли ПП моделі φ^6, відповідні точним розв’язкам нелінійних варіаційних рівнянь. Провести детальний аналіз фізичних умов (енергетичних, симетрійних та граничних), за яких виникають такі розподіли, та визначити їхню термодинамічну стійкість.
- Розширити класичний феноменологічний опис шляхом врахування внесків від вищих нелінійностей та градієнтів параметра порядку у виразі для вільної енергії.

- Дослідити специфіку структурних змін та фазових перетворень у твердих тілах (зокрема, у металах та сплавах) під дією потужних імпульсних потоків випромінювання.
- З’ясувати роль просторової неоднорідності та нерівноважних станів у процесах деградації або модифікації мікроструктури матеріалів у жорстких радіаційних полях.

Методи дослідження. У роботі застосовано комплекс сучасних методів теоретичної фізики твердого тіла:

- Дослідження просторово-неоднорідних та несумірних структур параметра порядку базується на застосуванні варіаційного принципу для функціоналів вільної енергії.
- Для класифікації впорядкованих станів та аналізу стійкості фаз за умов спонтанного порушення симетрії використано методи групового аналізу (симетрійний аналіз).
- Для комплексного аналізу структурно-фазових перетворень, що відбуваються у молібденовій мішені під дією потужного електронного опромінення, було застосовано поєднання методів рентгеноструктурного аналізу, електронної мікроскопії та дюрометричних випробувань.

Наукова новизна одержаних результатів:

1. Встановлено, що спонтанне порушення парності для скалярних параметрів порядку як функцій координат призводить зумовлює виникнення в упорядкованих середовищах низки модульованих фаз, що різняться своєю просторовою симетрією. Зокрема, ідентифіковано існування неперіодичної виродженої солітонної фази.

2. Побудовано нові класи точних просторових розподілів параметра порядку моделі φ^6. Сформульовано критерії та умови інтегрованості нелінійних варіаційних рівнянь у моделях, що враховують внески від вищих градієнтів та нелінійностей ПП.

3. Описано трансформацію просторового розподілу структурних неоднорідностей, зумовлених ефектом Бенара-Марангоні, на прикладі молібдену за умов інтенсивного зовнішнього впливу.

4. Запропоновано новий підхід для обчислення параметра порядку в моделі утворення кірально чистого середовища, яке виникає внаслідок спонтанного порушення симетрії в високомолекулярних сполуках живої природи.

Практичне значення. Встановлено механізми формування періодичного рельєфу молібдену під дією СРЕП. Це дозволяє прогнозувати термічну стабільність першої стінки реактора та оптимізувати радіаційний теплообмін між стінкою та плазмою за рахунок керування мікроструктурою поверхні.

Результати дослідження динаміки електричного заряду в полімерах є основою для вдосконалення методів електростатичної сепарації пластикових відходів. Це підвищує ефективність розділення полімерів для їх подальшої вторинної переробки.

Зв'язок роботи з науковими програмами, планами, темами. Дисертаційну роботу виконано в Навчально-науковому інституті «Фізико-технічний факультет» Харківському національному університеті імені В.Н. Каразіна відповідно до тематичних планів фундаментальних науково-дослідних робіт. Результати досліджень дисертаційної роботи були отримані в межах виконання науково-дослідної роботи з такої держбюджетної теми: «Енергетична залежність і рефракційні властивості взаємодії легких ядер з ядрами», ДР № 0120U102294 (2021 р.) НДР № 20-13-20. Дослідження, що ввійшли до дисертаційної роботи, також виконувались в рамках меморандуму про взаєморозуміння між ХНУ Каразіна та Інституту електрофізики та радіаційних технологій: «Наномасштабні структури в металах і сплавах як чинник впливу на радіаційну стійкість, електрофізичні та механічні властивості», ДР № 0121U108713 (2024 р.) та «Розробка фундаментальних

основ радіаційних і електрофізичних технологій модифікації та випробування матеріалів для потреб енергетичного переходу», ДР № 0123U103150 (2025 р.).

Результати досліджень включені до програми впровадження за відомчою темою Інституту електрофізики і радіаційних технологій НАН України «Наномасштабні структури в металах і сплавах як чинник впливу на радіаційну стійкість, електрофізичні та механічні властивості». Вони використовувались при викладанні наукової дисципліні «Квантова статистична фізика та критичні явища» у навчальному процесі на кафедрі ядерної фізики та фізики високих енергій імені О.І.Ахієзера Харківського національного університету імені В.Н. Каразіна при підготовці здобувачів вищої освіти зі спеціальності 105 «Прикладна фізика та наноматеріали» на освітньому рівні магістратура.

Особистий внесок претендента складається з його участі в аналітичному та чисельному вирішенні поставленого завдання; обробці та інтерпретації експериментальних даних, що стосуються впливу випромінювання на структуру молібдену; у самостійній постановці завдань щодо пошуку нових розподілів ПП; формулюванні висновків та підготовці матеріалів до публікації у провідних наукових виданнях. Конкретний внесок співавторів у опубліковані праці наведено у примітці до дисертації.

Апробація результатів дисертації. Матеріали дисертації були оприлюднені, доповідалися та обговорювалися на наступних конференціях та семінарах: XII Ukrainian Scientific Conference «Academic and Scientific Challenges of Diverse Fields of Knowledge in the 21st Century» (Kharkiv, 2023); II Міжнародна науково-технічна конференція імені В. Воєводіна «Проблеми сучасної ядерної енергетики» (Харків, Україна, 2025 р.):, 10-та Українська наукова конференція з фізики напівпровідників (Ужгород, Україна, 2025 р.); Сучасні інформаційні та інноваційні технології на транспорті (MINTT–2025) (Одеса, Україна, 2025 р.); 7-а Міжнародна конференція «Високочисті матеріали: отримання, застосування, властивості» (Харків, Україна, 2025 р.).

Публікації. Результати дисертаційної роботи викладено в 5 наукових статтях, що входять до наукометричної бази Scopus (квартиль Q3) та доповідались на 5 фахових конференціях.

Структура та обсяг роботи. Дисертація складається із вступу, п’яти розділів, висновків та списку використаних джерел (192 джерел). Загальний обсяг дисертації становить 177 сторінок, у тому числі 66 рисунків.

Подяка. Автор висловлює глибоку вдячність та віддає шану світлій пам’яті наукового керівника — член-кореспондента НАН України, доктора фізико-математичних наук, професора **Клепікова Вячеслава Федоровича**.

Протягом восьми років спільної наукової діяльності Вячеслав Федорович був моїм незмінним наставником, під чиїм мудрим керівництвом були підготовлені бакалаврська і магістерська роботи а також поставлені наукові задачі, результати вирішення яких були публіковані в спільних наукових працях, які стали складовою даної дисертаційної роботи. Його виняткова наукова інтуїція, висока професійна етика та щира віра в успіх моїх пошуків стали визначальними у моєму становленні як дослідника.

Передчасний відхід Вячеслава Федоровича з життя 1 березня 2026 року став непоправною втратою, проте його ідеї та настанови стали фундаментом цієї праці. Світла пам’ять про Вчителя назавжди залишиться в моєму серці та науковій діяльності.

РОЗДІЛ 1. ЛІТЕРАТУРНИЙ ОГЛЯД. ПРОСТОРОВО НЕОДНОРІДНІ СТАНИ І ФАЗОВІ ПЕРЕХОДИ В ТВЕРДИХ ТІЛАХ

1.1. Просторово неоднорідні стани в твердих тілах

Протягом останніх десятиліть у фізиці конденсованого стану спостерігається інтенсифікація експериментальних та теоретичних досліджень систем, здатних формувати просторово неоднорідні стани з довгоперіодичними структурами розподілу фізичних характеристик [1-5]. Феноменологічно такі стани проявляються як стійкі просторові модуляції параметра порядку, чий період суттєво перевищує міжатомні відстані кристалічної решітки, що класифікує їх як несумірні фази. Характерними прикладами подібних об'єктів є розподіли спонтанної поляризації в сегнетоелектриках або намагніченості у феромагнетиках, що виникають під час структурних фазових переходів у об’ємних кристалах, тонких плівках та складних наноструктурах [1, 4, 6-13]. Крім того, до цього класу явищ належать хвилі зарядової щільності в металах, гелікоїдальне впорядкування у магнетиках, а також специфічні модуляції складу в багатокомпонентних сплавах [14].

Окреме місце у ієрархії просторово неоднорідних систем посідають складні багатофазні середовища, зокрема водонафтові емульсії та колоїдні розчини нафти [15, 16]. Процеси мікрофазного розшарування в таких системах призводять до виникнення складних просторових конфігурацій, де параметр порядку (концентрація або густина) розподілений неоднорідно. Фазові переходи в емульсіях типу «вода в нафті» супроводжуються спонтанною зміною морфології агрегатів, що безпосередньо корелює з теорією модульованих структур у твердих тілах. Врахування взаємодії між полярними та неполярними молекулами води та вуглеводневою матрицею дозволяє описувати стабільність таких емульсій через мінімізацію термодинамічного потенціалу з градієнтними членами, аналогічно до опису сегнетоелектричних доменів. Розуміння критичної поведінки таких систем є критичним для

нафтохімії, оскільки дозволяє прогнозувати умови інверсії фаз та ефективність деемульсації.

На сьогодні довгоперіодичні структури виявлені більш ніж у сотні магнітних речовин [17], у декількох десятках сегнетоелектриків [18]. Серед найбільш вивчених власних сегнетоелектриків слід виділити нітрит натрію $NaNO_2$, тіокарбамід $SC(NH_2)_2$, дигідрат хлориду кальцію бетаїну $BCCD$ (betaine calcium chloride dihydrate), Cs_2HgBr_4, тверді сплави сімейства $Sn_2P_2(Se_xS_{1-x})_6$ [3], а з невласних сегнетоелектриків – речовини групи A_2BX_4, наприклад, K_2SeO_4 або Rb_2ZnCl_4 [19].

В даний час інтерес до сегнетоелектриків, в тому числі тих, що допускають просторово модульовані стани, стимулюється швидким прогресом в області фізики тонких плівок і нанорозмірних матеріалів. Незважаючи на те, що такі явища, як сегнетоелектрика, є наслідком колективних ефектів, низькорозмірні системи різної геометрії також виявляють сегнетоелектричні властивості [1]. Подібні матеріали відкривають широкі перспективи з точки зору інтеграції їх у наноелектроніці, телекомунікаційному обладнанні, мобільному зв'язку, медицині та робототехніці.

Практичний потенціал матеріалів із модульованими станами охоплює створення енергонезалежної пам'яті нового покоління — FERAM (FerroElectric Random Access Memory) [1, 18, 20-23], яка поєднує високу швидкість запису з низьким енергоспоживанням. Крім того, такі структури є перспективними для розробки пристроїв надшвидкої комутації, високочутливих детекторів магнітного поля, електрокалорійних систем охолодження для мікропроцесорів та радарів із фазованими антенними решітками. Важливою перевагою модульованих станів є їхня підвищена резистентність до жорсткого радіаційного випромінювання [19, 24, 25]. Це робить їх незамінними при створенні мініатюрних джерел гамма-випромінювання, нейтронів та електронних компонентів, призначених для роботи в екстремальних умовах космосу або ядерної енергетики [22]. Таким

чином, вивчення термодинамічної стійкості та нелінійної динаміки просторово неоднорідних структур є не лише фундаментальною науковою задачею, а й необхідною умовою для технологічного прориву у стратегічних галузях техніки.

При експериментальному та теоретичному дослідженні структурних фазових переходів, що супроводжуються виникненням просторово-неоднорідних конфігурацій, традиційно виділяють три фундаментальні стани (або групи однотипних фаз), які визначають еволюцію системи [26]:

- Вихідна фаза: невпорядкований високосиметричний стан, у якому середнє значення параметра порядку дорівнює нулю, а симетрія системи відповідає просторовій групі кристалічної решітки;
- Несумірна (також іменована модульована або довгоперіодична) фаза: стан, у якому певна характерна величина − параметр порядку φ – набуває відмінного від нуля значення та характеризується просторовою періодичністю. Прикладами такого роду величин є спонтанна поляризація в сегнетоелектриках або намагніченість в магнетиках, що періодично змінюється вздовж деяких виділених напрямків, при цьому період модуляції не кратний і набагато більший за період кристалічної решітки;
- Кінцева впорядкована (сумірна) фаза: низькосиметричний стан, де параметр порядку є макроскопічно однорідним або постійним у межах окремих доменів. Тут просторова симетрія визначається фіксованим вектором впорядкування, що узгоджується з періодичністю кристалічної структури.

Фазовий перехід із високосиметричного стану в несумірну фазу зазвичай класифікується як перехід другого роду. В околиці критичної температури T_I просторовий розподіл параметра порядку має квазісинусоїдальний характер і добре описується одногармонічним наближенням. Однак при подальшому зниженні температури та наближенні до точки переходу в сумірну фазу ($T \to T_C$) фізична картина суттєво ускладнюється. Хвильовий вектор модуляції k, що визначає просторову періодичність, починає сильно залежати від зовнішніх параметрів. При наближенні до T_C період модуляції зростає, а

гармонічний розподіл трансформується у решітку доменноподібних областей, розділених вузькими перехідними зонами — солітонами або фазонами.

Перехід у сумірну фазу (так званий lock-in перехід) характеризується фіксацією хвильового вектора на постійному значенні $k = k_0$ [27]. Відбувається процес «замикання» періодів модуляції на значення, що є кратними примітивним періодам високосиметричної фази. Важливою особливістю є те, що зародження доменної структури — енергетично еквівалентних областей сумірності — починається ще в межах модульованої фази [19, 28, 29].

Особливе місце в теорії фазових перетворень посідає концепція точки Ліфшиця, наявність якої докорінно змінює характер впорядкування в системі. З термодинамічної точки зору точка Ліфшиця являє собою специфічну потрійну точку на фазовій діаграмі, що розділяє області прямого переходу з невпорядкованої фази в сумірну від послідовності переходів «невпорядкована фаза → несумірна фаза → сумірна фаза» [30]. Фізично ця точка відповідає стану, при якому коефіцієнт при градієнтному члені в розкладі вільної енергії $(\delta(\nabla\varphi)^2)$ звертається в нуль, що вимагає врахування внесків вищого порядку за просторовими похідними.

Експериментально наявність точки Ліфшиця підтверджена, крім рідких кристалів, для магнетика MnP [19, 31] та одноосних власних сегнетоелектриків родини $Sn_2P_2(Se_xS_{1-x})_6$ [32-34]. У цих кристалах варіювання концентрації селену (x) дозволяє «керувати» положенням системи на фазовій діаграмі, наближаючи її до критичної області.

Розвиток теорії мультикритичних явищ вказує на можливість існування ще більш складних топологічних об'єктів, що поєднують у собі властивості точки Ліфшиця та звичайних критичних точок вищих порядків [34, 35]. Одним із найбільш обговорюваних прикладів є трикритична точка Ліфшиця. Передбачалося, що така точка може реалізуватися на фазовій діаграмі «температура — тиск — концентрація» для кристалів типу $Sn_2P_2(Se_xS_{1-x})_6$. Однак сучасні прецизійні експериментальні дослідження [36-38] ставлять під

сумнів коректність цієї гіпотези для даної родини сполук, що підкреслює необхідність уточнення теоретичних моделей та врахування додаткових факторів, таких як дефекти структури чи нелінійні взаємодії вищих порядків.

1.2. Просторово неоднорідні системи з однокомпонентним параметром порядку

Теоретичні моделі систем, що описуються однокомпонентним (скалярним) параметром порядку, відіграють важливу роль у фізиці конденсованого стану. Такі моделі дозволяють успішно досліджувати широке поле проблем статики та динаміки фазових переходів: утворення несумірних структур при структурних переходах [25, 39, 40], процесів спінодального розпаду в системах із конкуруючими взаємодіями [41-43], а також специфіки зародкоутворення і вплив далекодіючих сил при фазових переходах першого роду [41], деякі аспекти флуктуаційної теорії, наприклад, ефект «великої ріки» [44], прояви універсальності фазових переходів [45, 46] тощо. Ці моделі ефективно використовуються для опису фазових переходів у конкретних середовищах − ряді сегнетоелектриків, магнетиків, бінарних сплавів [19, 25]. Крім того, вони корисні при дослідженні явищ самоорганізації, зокрема виникнення стабільних просторово-неоднорідних структур, оскільки варіаційне рівняння для систем зі скалярним параметром порядку аналогічне рівнянням теорії утворення стійких стаціонарних дисипативних структур в активних середовищах [47], що вказує на глибоку міждисциплінарну спорідненість цих процесів.

Слід також зазначити, що значення теорії систем з однокомпонентним ПП виходить за рамки фазових переходів в окремих кристалах, оскільки для цілого ряду речовин (сегнетоелектриків, магнітів, рідких кристалів, надпровідників без магнітного поля) число компонент параметра порядку поблизу критичної області ефективно зменшується, і відповідні ФП, принаймні в першому наближенні, можуть бути описані за допомогою

однокомпонентного параметра порядку [48-53]. У цьому випадку в системі має місце спонтанне порушення симетрії для дискретної групи відбиттів $\varphi \to -\varphi$.

Спочатку поняття параметра порядку було введено в феноменологічній теорії Ландау фазових переходів, яка широко використовується при теоретичному описі параметричної еволюції несумірних станів [1, 3, 48, 50, 54]. Центральним об'єктом такого підходу є побудова та аналіз нерівноважного термодинамічного потенціалу системи, який у загальному випадку є функціоналом просторово неоднорідного параметра порядку $\varphi(x)$ [26, 51]. У цій концепції просторова модуляція $\varphi(x)$ розглядається як результат конкуренції та компромісу різних внутрішніх взаємодій [26, 55], які на рівні модельного термодинамічного потенціалу описуються за допомогою ряду градієнтних і нелінійних інваріантів, що допускаються симетрією системи.

Серед систем з однокомпонентним ПП особливий інтерес викликають середовища, в яких можуть існувати несумірні стани [1, 3, 26]. На якісному рівні картина параметричної еволюції модульованого стану і відповідний ланцюжок фазових переходів вихідна → несумірна → впорядкована фази в таких системах відомі досить добре [26, 56]. Але цілий ряд моментів у поведінці несумірних структур однокомпонентного параметра порядку залишається досі нез'ясованим.

Зокрема, це стосується причин утворення істотно нелінійних розподілів [57], в тому числі просторових солітонів (див., наприклад, [58-61]), їх ролі та властивостей. Відкритим залишається питання про можливість опису ключових термодинамічних характеристик системи на кількісному рівні, оскільки отримані раніше результати мають часом суперечливий характер. Наприклад, при спробах теоретично відтворити залежність від температури для хвильового числа модуляції $k(T)$ і теплоємності $\Delta C_P(T)$ в сегнетоелектриці $Sn_2P_2(Se_xS_{1-x})_6$, задовільної відповідності експериментальним даним вдається досягти або для однієї величини, або для іншої, але не для обох відразу [62]. На даний момент багато питань викликає

розбіжність експериментальних даних і передбачень теорії в околиці точки переходу в сумірну фазу – для багатьох термодинамічних характеристик в цій області температур спостерігається додатковий внесок, джерела якого до кінця не з'ясовані (див., наприклад, [3, 63]). Нові експерименти з вивчення фазових діаграм виду температура–тиск, температура–концентрація або температура–зовнішнє поле, що проводяться на основі вдосконалених методик і зразків, виявляють моменти, що суперечать колишнім даним і не знаходять поки що пояснення (наприклад, [36, 37]). Крім того, несумірні системи з однокомпонентним ПП демонструють цілий ряд аномальних особливостей, які також не отримали задовільного тлумачення [3] (див. також розділ 1.4).

1.3. Несумірні фази в сегнетоелектриках I і II типу

Наявність великого масиву експериментальних даних щодо властивостей несумірних фаз [1, 3, 19], існування експериментально спостережуваних критичних точок [32], складні нелінійні взаємодії та незвичайні властивості (наприклад, ефект пам'яті [21, 64-66], стани типу спінового скла [67, 68], метастабільні неполярні області в доменній структурі поблизу точки фазового переходу другого роду [69]) роблять сегнетоелектрики особливо привабливими як об'єкт дослідження при вивченні модульованих станів.

У сучасній фізиці конденсованого стану заведено виділяти два фундаментальні типи систем із модульованими станами, що різняться симетрійною природою виникнення неоднорідностей [19, 29].

Характерною особливістю несумірних систем I типу є можливість існування в термодинамічному потенціалі системи інваріанта Ліфшиця, білінійного за компонентами параметра порядку і їх першими просторовими похідними [1, 70]. Зазвичай параметр порядку перетворюється за двовимірним незнижуваним представленням групи симетрії вихідної фази і є двокомпонентним [29, 71]. Для компонент ПП $\eta(x)$ і $\xi(x)$ інваріант Ліфшиця

має вигляд $\sim\left(\eta\frac{\partial\xi}{\partial x}-\xi\frac{\partial\eta}{\partial x}\right)$, де x – просторова координата. При цьому в системі існують симетричні обмеження, що забороняють перехід з високосиметричної фази безпосередньо в низькосиметричну однорідну фазу, що і створює умови для виникнення несумірного стану.

Прикладами сегнетоелектриків I типу є фторберілат амонію $(NH_4)_2BeF_4$ [72], $2H-TaSe_2$; Rb_2ZnCl_4, K_2SeO_4 та інші сполуки структури A_2BX_4 [19, 70].

Згідно з класифікацією [73], для несумірних систем II типу у виразі для термодинамічного потенціалу інваріант Ліфшиця відсутній. Параметр порядку перетворюється за одномірним незнижуваним представленням групи симетрії невпорядкованої фази, тобто є однокомпонентним (для сегнетоелектриків він відповідає спонтанній поляризації) і орієнтованим паралельно деякому виділеному просторовому напрямку. Поява несумірного стану в цьому випадку обумовлена не симетрією системи, а пов'язана з особливостями міжатомних взаємодій конкретних речовин, при цьому матеріальні константи системи такі, що виникнення неоднорідних структур стає енергетично вигідним [25].

До такого роду систем відносяться, наприклад, сегнетоелектрики нітрит натрію $NaNO_2$ [60, 74-76], тіокарбамід $SC(NH_2)_2$ [60, 61] і тверді розчини сімейства $\left(Pb_ySn_{1-y}\right)_2P_2(Se_xS_{1-x})_6$ [67, 77, 78].

У речовинах I типу критичні аномалії в околиці точки фазового переходу другого роду з високосиметричної фази в несумірну фазу описуються тривимірною моделлю Гейзенберга з двокомпонентним параметром порядку (клас універсальності $3d-xy$) [29].

У загальному випадку для систем II типу також можна очікувати, що опис критичної поведінки в околиці температури T_I переходу з невпорядкованого в модульований стан можливий за допомогою $3d-xy$ - класу. Але у випадку одноосних власних сегнетоелектриків має місце особлива ситуація. У таких кристалах критичні флуктуації істотно пригнічені далекодіючими кулонівськими силами, що, згідно з емпіричним правилом

[32], ефективно зменшує верхню критичну розмірність системи на одиницю і дозволяє описувати відповідний фазовий перехід в рамках теорії середнього поля з логарифмічними поправками. Точніше, такого роду системи належать до класу універсальності, розглянутого в [35, 79].

При цьому потрібно зазначити, що в околиці особливих точок на фазовій діаграмі – таких, наприклад, як точки Ліфшиця або мультикритичні точки – критична поведінка сегнетоелектриків з модульованими станами має свої особливості [32, 35]. Так, для одноосних сегнетоелектриків поблизу точки Ліфшиця вже не можна нехтувати флуктуаційними ефектами [32, 79]. У той же час поблизу трикритичної точки Ліфшиця флуктуації пригнічені, і в її околиці очікується поведінка, близька до класичної трикритичної.

Як уже зазначалося, властивості несумірної фази в системах I і II типів в околиці точки T_I переходу високосиметрична – несумірна фази багато в чому схожі. Зокрема, просторова модуляція параметра порядку близька до синусоїдальної. Однак поблизу точки T_C переходу в сумірний стан спостерігаються значні відмінності [19, 29].

У системах I типу еволюція властивостей несумірної фази при зниженні температури задовільно описується в припущенні про перехід синусоїдальної одногармонічної структури ПП в сильно нелінійну доменоподібну (так звану солітонну решітку), в якій області з майже незмінним вздовж осі модуляції значенням ПП чергуються з вузькими межами, що відокремлюють ділянки з протилежними знаками параметра порядку [26, 80, 81]. Ступінь солітоноподібності модуляції характеризується так званою щільністю солітонів [82]. Наприклад, для параметра порядку, що виражається за допомогою еліптичних функцій, вона дорівнює $n_S = \pi/\big(2K(k)\big)$, де $K(k)$ – повний еліптичний інтеграл першого роду [83]. Математичний апарат і відповідні нелінійні рішення, що описують подібну трансформацію одногармонічної хвилі в солітонну решітку, добре вивчені [49, 80].

У системах I типу сумірна фаза може втратити деякі елементи трансляційної симетрії, і об'єм елементарної комірки буде мультиплікований

по відношенню до вихідної невпорядкованої фази (наприклад, потроєний у селенаті калію або подвоєний у фторберілаті амонію) [72]. Протікання фазових переходів залежить також від того, чи дозволені симетрією системи інваріанти з непарними ступенями параметра порядку (так звані umklapp terms) [25, 29].

У системах II типу на низькотемпературній межі несумірної фази перетворення профілю хвилі модуляції в доменоподібні «сходинки» зазвичай експериментально не спостерігається [19]. Іншими словами, несумірна фаза залишається одногармонічною або слабо ангармонічною аж до T_C [70]. У роботі [19] на підставі оцінок декількох перших гармонік ПП стверджувалося, що вищі гармоніки відіграють незначну роль у всій області існування несумірної фази майже у всіх відомих системах II типу, і структура просторового розподілу параметра порядку залишається весь час практично синусоїдальною. Єдиним винятком є тіокарбамід, для якої виявлено порівняно великий внесок вищих гармонік [58, 60]. Однак солітонна решітка в тіокарбаміді не настільки розвинена, як, наприклад, для сполук сімейства A_2BX_4, що належать до I типу [51].

У системах II типу фазовий перехід з несумірної в сумірну фазу є переходом першого роду, при цьому зазвичай сумірна фаза є еквітрансляційною з вихідною фазою [84].

У той же час в низькотемпературній області несумірної фази (поблизу точки T_C) системи II типу виявляють деякі аномальні властивості, властиві системам I типу, наприклад, зростання діелектричної константи $\varepsilon \sim (T - T_C)^{-1}$ [85] або додатковий внесок в інтегральну інтенсивність сателітів [63]. У випадку тіокарбаміду незалежні рентгеноструктурні дифракційні дослідження [86] показують наявність сильного солітонного режиму поблизу T_C, а також співіснування солітонної та синусоїдальної структур модуляцій.

Слід зазначити, що доменоподібні структури в системах з однокомпонентним параметром порядку $\varphi(x)$ формально можливі [87]. Але при параметрах термодинамічного потенціалу, знайдених для конкретних

сполук [84, 88], дані нелінійні стани [87] можуть бути тільки метастабільними [49]. Згідно з оцінками [29, 60, 89] внесок вищих гармонік у рівноважний стан невеликий.

Теоретично, в системах II типу може реалізовуватися і lock-in перехід другого роду, принаймні в зразках без дефектів [29]. У [19] з точністю до похибки чисельної мінімізації показана можливість обертання в нуль щільності солітонів для деяких приватних значень матеріальних параметрів термодинамічного потенціалу [1], що також відповідає безперервному переходу з несумірної фази в сумірний стан. При цьому в системах II і I роду залежність амплітуди ПП від щільності солітонів практично однакова [19]. Вперше на можливість безперервного фазового переходу несумірна → сумірна фази було вказано в [90].

У речовинах обох типів існують сумірні фази з раціональним хвильовим числом $k = m/l$, де k вимірюється в одиницях зворотної решітки $b^* = 2\pi/b$, а b − період кристала вздовж Ox. Так, у дейтерованому тіокарбаміді при зміні температури, крім вихідної і сумірної фази, еквітрансляційної з вихідною, спостерігаються також сумірні фази з k, рівним 1/7 і 1/9, а на фазовій діаграмі температура–тиск $T - P$ − ще й з $k = m/l$ =1/8, 1/3 (див. [91, 92] і посилання там). У кристалі $BCCD$ $((CH_3)_3NCH_2COO \cdot CaCl_2 \cdot 2H_2O)$ при зміні температури спостерігається до 15 сумірних фаз [93], а на $T - P$ фазовій діаграмі з'являється ще багато нових сумірних фаз (див. огляд [93]).

Феноменологічний підхід до опису каскаду фазових переходів між такими фазами за участю несумірної фази (так званої «диявольської драбини») був запропонований для речовин I типу в [94] і поширений на речовини II типу на прикладі тіокарбаміду в [95] і дейтерованого тіокарбаміду $SC(ND_2)_2$ в [96]. При цьому термодинамічний потенціал для сумірної фази з $k = 0$ (параметр порядку в цьому випадку однокомпонентний) визначається в [94] наступним чином: вираз для сумірної фази в підході [1] необхідно перетворити так, як це випливає з умови рівності термодинамічних потенціалів для несумірної фази в цих двох підходах [25]. При цьому передбачається, що всі фази обумовлені

однією м'якою оптичною гілкою спектра нормальних коливань кристала [58]. За допомогою виразів для потенціалів усіх можливих фаз знаходять вирази для меж між фазами, за якими можна побудувати фазові діаграми на площині двох коефіцієнтів ТП при різних значеннях зовнішнього поля H. У припущенні найпростішої лінійної залежності цих коефіцієнтів від температури T і тиску P можна побудувати теоретичні $T-P$ і $T-H$ фазові діаграми.

Цікавою особливістю описаних систем є точка, аналогічна точці Ліфшиця, але в якій, на відміну від «справжньої» точки Ліфшиця, сходяться вихідна, несумірна і сумірна фази з ненульовим k $(C_{m/l})$ [97]; у цій точці k змінюється стрибком до нуля, а межа вихідна фаза − $C_{m/l}$ є лінією фазового переходу першого роду [71].

Можливість існування модульованої фази впливає на поведінку системи і в полярному стані. Сумірний стан в сегнетоелектриках зазвичай супроводжується появою таких просторово неоднорідних утворень, як доменні структури [98, 99]. При цьому в несумірних системах II типу в полярній фазі поблизу межі 180°-доменів $P=\pm P_0$, де P − спонтанна поляризація, спостерігаються осциляції параметра порядку вздовж осі, перпендикулярної площині доменної стінки, і є області, де поляризація перевищує рівноважне значення P_0 [28].

1.3.1. Моделі систем II типу з вторинним параметром порядку

У прагненні використовувати наочність і потужність математичного апарату, побудованого при вивченні систем I типу, для опису нелінійних властивостей несумірних систем II типу, було розроблено ряд моделей, в яких термодинамічний потенціал враховував «вторинний» ступінь свободи (вторинний ПП) ξ, що перетворюється як $\sim(\partial\eta/\partial x)$[71]. У сумірній фазі вторинний ПП дорівнює нулю, а в несумірному стані обидва параметри порядку модульовані. Як наслідок, з'являлася можливість додати в термодинамічний потенціал інваріант, що збігається за формою з інваріантом

Ліфшиця, але не є ним, оскільки первинний і вторинний параметри порядку перетворюються за різними незнижуваними представленнями (так званий LT-інваріант).

В рамках такого підходу можна описати кілька видів несумірних станів. У звичайній модульованій фазі первинний і вторинний параметри порядку мають вигляд $\eta(x) = a(x)\,cos(\,\varphi(x))$ і $\xi(x) = a(x)\,sin(\,\varphi(x))$ [100], де амплітуда a зазвичай слабо залежить від просторової координати x. У станах другого виду основний ПП осцилює біля значень $\eta_0 = \pm\eta_{cp}$, характерних для сумірної фази (так звана rippled-фаза): $\eta(x) = \eta_0 + acos\big(\varphi(x)\big)$, $\xi(x) = bsin\big(\varphi(x)\big)$. Така несумірна фаза вперше відзначена в [101]. У присутності зовнішнього поля в деяких системах можуть з'являтися стани з осциляцією параметра порядку близько інших значень [102]. Rippled-фази існують і в системах з однокомпонентним параметром порядку [32].

При переході зі звичайної несумірної в rippled фазу виявлено просторовий хаос, обумовлений механізмом конкуруючих періодичностей (оскільки існує безліч незвичайних метастабільних рішень) [102].

Дещо інший підхід для опису солітонного режиму, виявленого експериментально в тіокарбаміді, був розвинений в [58]. У роботі [58] була зроблена спроба пояснити особливості даної системи за допомогою гіпотези співіснування солітонної та синусоїдальної модуляцій. За допомогою чисельних розрахунків на основі термодинамічного потенціалу, взятого з роботи [1], було показано, що для деяких значень матеріальних параметрів при наближенні до lock-in переходу просторові розподіли параметрів порядку приймають солітонний характер.

При цьому параметр порядку, так само як і в системах I типу, можна параметризувати за допомогою пробної функції, в якій амплітуда вважається майже постійною, а фаза $\theta(x)$ змінюється в координатному просторі і наближено задовольняє рівнянню sin-Gordon:

$$(\theta')^2 = a_0 + a_1\, cos(\,2\theta) + \sum_{n=2}^{\infty} a_n\, cos(\,2n\theta), \qquad (1.1)$$

де, як показав чисельний розрахунок для тіокарбаміді [58], $|a_2|$, $|a_3|$ набагато менше $|a_0|$, $|a_1|$. Для пояснення вищезазначеного співіснування модуляцій у несумірній фазі необхідно врахувати акустичний (пружний) ступінь свободи, оскільки пов'язані трансляції молекул елементарної комірки вздовж осі модуляції є софазними. У цьому випадку м'яка мода, з якою пов'язаний ПП, може розглядатися як комбінація трьох мод з модуляціями, які можуть змінюватися незалежно при зміні температури. Зокрема, в [58] показано, що в той час як параметр порядку поблизу lock-in переходу має солітоноподібний вигляд, заморожена акустична хвиля може залишатися синусоїдальною при деяких значеннях матеріальних параметрів.

Зауважимо також, що врахування пружних сил призводить до перенормування деяких матеріальних параметрів термодинамічного потенціалу, при цьому результат перетворення різний для однорідної сумірної фази $\varphi = const$ і несумірного стану $\varphi = \varphi(x)$ через взаємодію в останньому випадку неоднорідного розподілу параметра порядку з індукованими ним неоднорідними деформаціями [103].

В цілому слід зазначити, що роль вищих гармонік хвилі модуляції параметра порядку на низькотемпературній межі несумірної фази T_C до кінця не з'ясована і вимагає подальшого вивчення.

1.4. Теоретичні моделі, що узагальнюють чи доповнюють теорію Ландау фазових переходів

Складності теоретичного опису властивостей фазових переходів з утворенням несумірних структур у системах типу II стимулювали спроби узагальнити стандартну теорію Ландау. Зокрема, розглядалися формулювання з температурною залежністю у квадратичного інваріанту, а й в інших членів. Так, наприклад, пропонувалося вважати температуро-залежним коефіцієнт

при градієнтному інваріанті нижчого порядку $(\varphi')^2$ (див. наприклад, [104, 105]). Необхідність враховувати залежність аномально малих коефіцієнтів потенціалу від температури T і тиску P обговорювалася також у [102].

Слід зазначити, що моделі з некласичною температурною залежністю доданків у розкладанні термодинамічного потенціалу є абсолютно новими теорії фазових переходів в сегнетоелектриках. Зокрема, при описі титанату барію $BaTiO_3$ нестандартна для теорії Ландау T-залежність коефіцієнтів ТП була введена та використовувалася з 1966 [106]. Відповідно до [106], для $BaTiO_3$ на додаток до стандартної температурної залежності квадратичного члена основні інваріанти четвертого та шостого порядку також розглядаються як лінійні функції від температури T.

Варто зазначити, що за своїми властивостями перовскіти (і титанат барію як один з них) та халькогеніт сегнетоелектрики (такі як $Sn_2P_2(Se_xS_{1-x})_6$) помітно відрізняються один від одного. Зокрема, в останньому випадку симетрія кристалічної системи є нижчою. З іншого боку, саме завдяки високосиметричній структурі $BaTiO_3$, яка суттєво спрощує багато моментів побудови теоретичних моделей та чисельного моделювання, активно розвиваються як мікроскопічні, так і феноменологічні моделі фазових переходів для даної речовини. Безумовно, накопичений при цьому багатий досвід може бути корисним та стимулюючим і щодо інших типів конденсованих середовищ.

Нещодавно феноменологічна теорія $BaTiO_3$ [106] була піддана істотній ревізії в [107]. Авторами була пояснена (і за допомогою цього виключена з моделі) некласична температурна залежність ангармонічних коефіцієнтів у розкладанні ТП для $BaTiO_3$ – згідно з цією роботою, така залежність виникає як результат не врахування в підході [106] інваріантів восьмого порядку, якими в даному випадку немає. Пізніше було показано, що температурну залежність ангармонічних членів все-таки необхідно враховувати, проте члени восьмого порядку також відіграють важливу роль і дозволяють істотно

поліпшити опис діелектричних і сегнетоелектричних властивостей $BaTiO_3$ [108, 109].

Інше пояснення незвичайної температурної залежності коефіцієнтів термодинамічного потенціалу для $BaTiO_3$ було запропоновано в [110, 111]. Автори зазначили, що ангармонічність сегнетоелектричної підсистеми у титанаті барію має аномальні особливості. Як один із наслідків цієї обставини, ангармонічні коефіцієнти в ТП можуть суттєво змінюватися з температурою внаслідок температурно-залежного внеску термічних (тобто регулярних некритичних) флуктуацій параметра порядку.

Сегнетоелектрики II типу, зокрема, кристали $Sn_2P_2(Se_xS_{1-x})_6$, також демонструють яскраво виражені нелінійні властивості [34]. Крім того, як ми зазначали вище, відповідно до мікроскопічного аналізу та комп'ютерного моделювання потенційна енергія для даного типу кристалів може мати складну структуру [112] або центральне плоске плато [112, 113], які зазвичай погано апроксимуються кінцевими рядами.

Модифікована теорія середнього поля для сегнетоелектриків, що узагальнює теорію Ландау, побудована в [114]. Аналіз, проведений у [114], показав, що крім коливань кристалічної решітки, які зазвичай пов'язують з фазовими переходами в такого роду середовищах, у сегнетоелектриках важливу роль відіграє і інший вид атомних рухів, які можна описати як повільну еволюцію частково впорядкованої нематичної фази високотемпературної структури. Нематична фаза може істотно впливати на поведінку кристала поблизу точки фазового переходу другого роду. Згідно з розрахунками та оцінками, наведеними в [114], саме наявність нематичної структури (а не вплив критичних флуктуацій) є причиною відхилення теорії Ландау від експериментальних даних поблизу точки Кюрі у сегнетоелектриках.

Таким чином, можна припустити, що нелінійні властивості та ефекти і, відповідно, ангармонічні інваріанти високих порядків у розкладанні термодинамічного потенціалу та/або їх некласична для теорії Ландау

температурна залежність можуть бути суттєвими при описі експериментально спостерігаються властивостей таких несумірних систем II типу, як, зокрема, сегнето $Sn_2P_2(Se_xS_{1-x})_6$.

1.5. Фазові перетворення в молібдені під впливом інтенсивних потоків випромінювання

Молібден має низку застосувань завдяки високим показникам теплостійкості та радіаційної стійкості [115-119], що стимулює дослідження з метою встановлення меж збереження його експлуатаційних характеристик в умовах впливу на матеріал концентрованих потоків енергії. Зважаючи на те, що в процесі експлуатації з радіаційно-термічні навантаження на матеріал можуть сягати значень, за яких відбувається зміна фазового стану з ланцюжком (тверде тіло – рідина – тверде тіло) виникає виокремлена задача оцінки наслідків такого впливу та з'ясування наявності додаткових чинників термодинамічної природи, що випливають на зворотність у відновленні початкових властивостей.

Серед свідчень того, що такі дослідження є важливими для реалізації проектів зі створення ядерних установок майбутнього, одержання матеріалів здатних експлуатуватись в умовах космосу, реалізації технологій ядерного синтезу ізотопів медичного та промислового призначення, наведемо перелік прикладів того, що молібден є серед критично важливих матеріалів.

Однією з важливих задач практичної реалізації джерел енергії на основі термоядерного синтезу є обґрунтування вибору матеріалів першої стінки реактора, зокрема, забезпечення її стійкості до стаціонарних температурних навантажень та екстремальних, наприклад, зриву плазмового шнуру, що супроводжується безпосереднім впливом на стінку концентрованого потоку енергії. Для оцінки стійкості матеріалу до дії високо інтенсивних потоків випромінювання застосовують різноманітні інструменти, наприклад, прискорювачі плазми [115, 116], джерела нейтронів, сильно струмові прискорювачі електронів [117]. В роботі [117] частково розглядалась

проблема оцінки стійкості молібдену, як конструкційного матеріалу, при проведенні досліджень з керованого термоядерного синтезу. Було відзначено, що вплив на поверхню сильнострумового релятивістського електронного пучка (СРЕП) зумовлює як зміну структури приповерхневого шару, так і спричиняє утворення шорсткої поверхні, що відображається на коефіцієнті відбиття інфрачервоного (ІЧ) випромінювання. Іншою складовою важливості оцінки наслідків впливу СРЕП на конструкційні матеріали є напрацювання знань для реалізації методу інерціального термоядерного синтезу [118]. У випадку екстремальних навантажень на матеріали першої стінки виникає задача розуміння того, наскільки набуті внаслідок такого впливу нові властивості матеріалу здатні зберігати власну форму, цілісність, міцнісні характеристики , відповідати вимогам по насиченню воднем [119]. Вельми важливим є те, що в умовах температур, за яких існує плазма термоядерного реактора, переважаючим режимом теплообміну є радіаційний теплообмін, відтак відмінності в коефіцієнті відбиття ІЧ випромінювання здатні істотно вплинути на перерозподіл температурних полів, виникнення термічних напружень в конструкціях а за умови їх циклічності стати додатковим руйнуючим чинником. Виходячи з важливості цього, інфрачервона термографічна система застосовувалась в низці термоядерних пристроїв [120, 121] і становила ключовий засіб діагностики для контролю температури та вивчення теплових навантажень на елементах, що обернені до плазми, щоб, таким чином, розуміти фактичні значення їх теплового навантаження та вивчити можливості запобігання втрати ними експлуатаційних характеристик. Отже постає задача оцінки того, як опромінення поверхні з частковим неуникненим її оплавленням відобразиться на відбивній здатності (в ІЧ діапазоні) поверхні тугоплавкого матеріалу, а отже чи можуть прослідковуватись закономірності утворення періодичних структур на поверхні.

В роботі [122] відзначається, що при високо інтенсивному впливові компресійної плазми на молібден субзеренна структура формується завдяки

ефекту Bénard–Marangoni, який в свою чергу виникає через температурний градієнт по поверхні мішені. При цьому для переплавленого поверхневого прошарку є властивим утворення колумнарної структури (Рисунок 1.1). Як видно з Рисунок 1.1 зі збільшенням флюєнсу енергії компресійної плазми збільшується хвилястість рельєфу і більш чітко формується колумнарна структура.

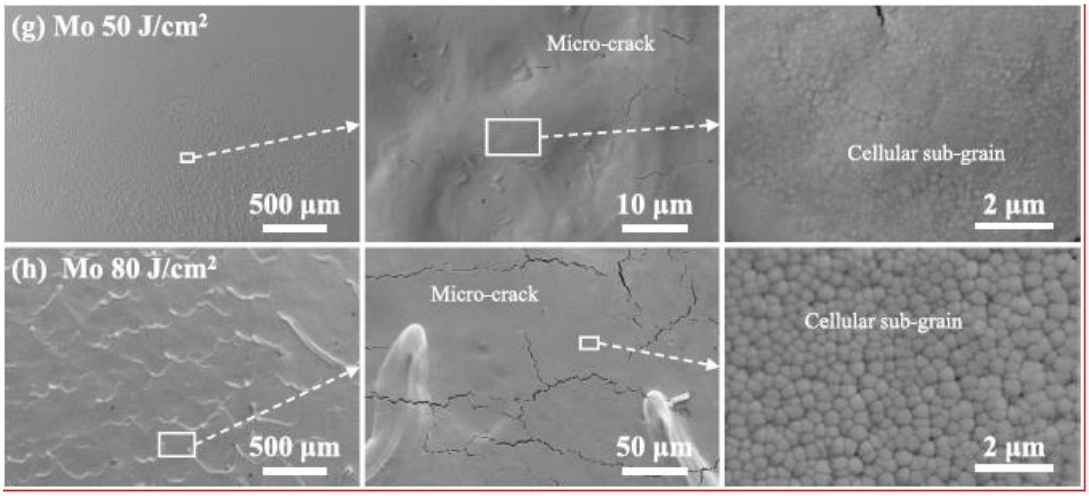


Рисунок 1.1 – СЕМ-зображення поверхні молібдену після впливу потоку компресійної плазми з флюєнсом енергії: g) 50 Дж/см^2 h) 80 Дж/см^2[122]

Щодо зміни мікротвердості, то автори роблять висновок що тут мають місце два конкуруючих процеси. Так утворення субзеренної структури сприяє збільшенню мікротвердості, тоді як формування колумнарної будови спричиняє її зменшення. Порівнюючи стан поверхні молібдену і вольфраму, відзначається, що у вольфраму утворюються макротріщини через механізм генерації внутрішніх напружень, тоді як в молібдені виникають мікротріщини внаслідок процесів ресолідифікації. Звертаючи увагу на ці механізми слід вказати, що у випадку обробки плазмовим компресійним потоком максимум енерговиділення припадатиме на поверхню, тоді як у випадку застосування електронного пучка, цей максимум буде зсунутий в підповерхневу область. І за умови порівняно однакової величини потоку потужності, від дії електронного пучка можна очікувати більшого різноманіття як руйнівних, так і модифікуючих процесів. Така температурна нерівномірність більш виразно

має відобразитись також на прояві ефекту Бенара-Марангоні, який полягає у виникненні дисипативних структур не по товщині об’єкту, вздовж поверхні.

Молібден знаходить застосування також в експериментах з фізики елементарних частинок, як spallation мішень та beam intercepting devices разом з тим до матеріалу так само висуваються вимоги радіаційно-термічної стійкості, оскільки його температура піднімається до понад 900 C^o, що було досліджено в роботі [123]. В той же час відтворення більш екстремальних умов радіаційно-термічного навантаження, які можуть виникати під час експлуатації прискорювачів, можна досягти з застосуванням сильнострумового релятивістського електронного пучка.

Молібден також використовується як мішень для напрацювання медичних ізотопів, а відтак це так само потребує оцінки стабільності його механічних характеристик та збереження цілісності уже в умовах одночасного радіаційного розігріву та примусового охолодження [124]. Оскільки для встановлення експлуатаційних меж цілісності молібденової мішені створювались умови виникнення температурного градієнту, то застосування саме імпульсного джерела випромінювання дасть можливість завдяки високим швидкостям нагрівання (охолодження) досягти високих значень різниць температури на різних ділянках мішені.

В роботі [125] молібден використовувався як конструкційний термостійкий матеріал для виготовлення іспитової капсули в якій випробувались експериментальні паливні елементи на основі сполук урану для легководного ядерного реактора. В даному випадку є важливим розуміння меж стійкості в разі виникнення аварійних радіаційних ситуацій, які моделюються в тому числі з застосуванням сильно струмових джерел заряджених частинок.

Зважаючи на широкий спектр застосувань молібдену, в тому числі в аерокосмічній техніці, постає задача його сполучення зі спеціальними сплавами, наприклад, Kovar [126]. Одним зі способів формування з’єднання полягає в застосуванні електронно- променевого зварювання. В роботі [126]

досліджувались особливості зміни механічних характеристик обох матеріалів внаслідок високотемпературного впливу низько енергетичного пучка. Разом з тим збільшення енергії електронів здатно активувати додаткові механізми радіаційно-стимульованих процесів.

В роботі [127] досліджено властивості молібденового покриття, нанесеного на алюмінієву підкладинку, яке було опромінено сильнострумовим електронним пучком. Внаслідок опромінення шар молібдену був розплавлений перемішаний з матеріалом підкладки з утворенням фази $MoAl_5$. Результатом такого способу модифікації поверхні було підвищення корозійної стійкості.

Зазвичай при електронно-променевій плавці металів з метою встановлення заданого режиму нагрівання та теплообміну на опромінюваній поверхні задається форма траєкторії руху пучка поверхні мішені [128]. Відмінністю імпульсного електронного пучка є те, що форма його проекції на мішень визначається особливостями будови катоду а поглинена доза випромінювання визначатиметься розподілом густини струму в перерізі. Це в свою чергу визначатиме розподіл температурного поля і постає задача здобуття інформації про вплив нерівномірності розподілу густини струму в перетині пучка на розподіл температурного поля.

В роботі [129] показано, що вивчення поведінки в металах і сплавах під впливом потужних імпульсних потоків випромінювання, дозволяв не тільки одержувати дані про вплив елементного складу та внутрішньої будови на температурні залежності фазових переходів, але й робити оцінку впливу на них механічних та теплофізичних характеристик матеріалу. Разом з тим опромінення металів потужними потоками випромінювання здатно реалізовувати декілька сценаріїв фазових переходів. Так у випадку, коли інтенсивності опромінення достатньо для розплавлення та випаровування матеріалу, ми можемо спостерігати фазові переходи другого роду, зумовлені переходом речовин в інший агрегатний стан. Досягнення внаслідок поглинання енергії випромінювання значення температури, яке відповідає

зміні будови кристалічної решітки може реалізувати фазовий перехід першого роду наприклад, мартенситного перетворення, у випадку досягнення температури Кюрі, реалізується фазовий перехід другого роду, про що йшлось в роботі [129]. Спостереження за перебігом процесів в опромінюваній мішені проводилось на підставі реєстрації акустичних імпульсів, які генеруються внаслідок термопружного ефекту [129-131], що виникає як результат імпульсного підвищення температури. Значення механічних напружень визначаються з виразу [129-131].

$$\sigma(x,t) = \frac{\alpha}{2 \cdot k \cdot \rho \cdot c} \cdot \varepsilon(x - s \cdot t), \tag{1.2}$$

де α – коефіцієнт теплового розширення;

κ – стисненість;

c – питома теплоємність;

ρ – густина;

ε – поглинена енергія випромінювання;

s – швидкість звуку в опромінюваній речовині;

t – час.

Відповідно, знаючи величину поглиненої дози і амплітуди акустичного імпульсу можна визначити коефіцієнт теплового розширення, який, наприклад, для гадолінію, змінює знак при досягненні температурою значення точки Кюрі, що підтверджується експериментальними результатами [129]. Говорячи про формування механічних напружень під дією потужних імпульсів опромінення, слід мати на увазі, що у випадку розплавлення матеріалу мішені та, відповідно, його подальшого швидкого затвердівання в мішені виникають залишкові напруження, які при дії наступного імпульсу вивільняються та фактично додаються до напружень, що формуються в результаті термопружного ефекту діючого імпульсу. В роботі [132] встановлено, що при опроміненні молібденової мішені сильнострумовим релятивістським електронним пучком значення середньої амплітуда наступних імпульсів в 2,3 рази більше за амплітуду першого імпульсу. Подібне

акумулювання внутрішньої енергії повинно братись до уваги як чинник збурень розплавленої опроміненням поверхні та формування рельєфу.

Вказуючи на згаданий в роботі [122] вплив ефекту Бенара-Марангоні (БМ) на формування приповерхневої структури та рельєфу поверхні молібдену слід зазначити, що даний ефект виникає як конкурентний до ефекту Релея-Бенара. В той же час сам БМ ефект в залежності від значень матеріальних параметрів може давати різний характер просторового розподілу дисипативних структур. Так в роботі [133] йдеться про вивчення закономірностей формування напрямків руху речовини металів, що були розплавлені електронним пучком (Рисунок 1.2.). Визначальним параметром тут було число Марангоні [133]

$$M_a = \frac{\partial \gamma}{\partial T} \cdot \frac{\partial T}{\partial x} \cdot L^2/\mu \cdot \alpha, \qquad (1.3)$$

де $\frac{\partial \gamma}{\partial T}$ залежність коефіцієнту поверхневого натяжіння від температури, x - радіально координата відносно осі пучка. μ - динамічна в'язкість, α - коефіцієнт теплопровідності, L - геометричний параметр, що характеризує лінійні розміри басейну.

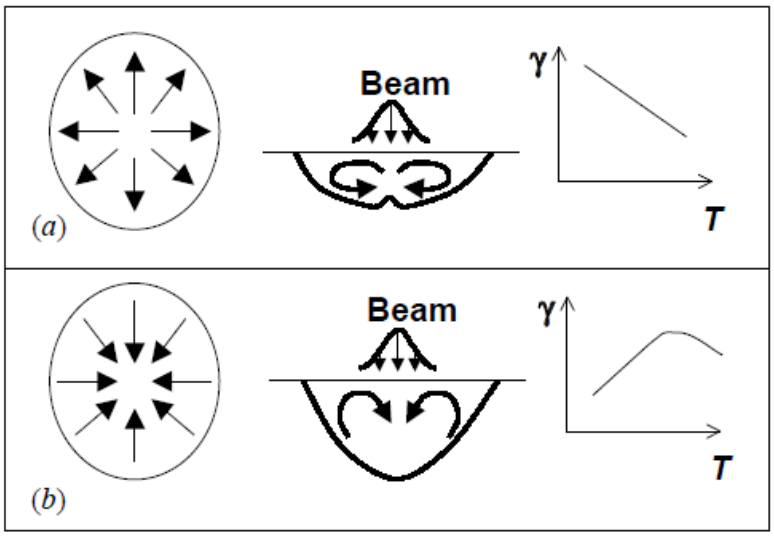


Рисунок 1.2 – Схематичне зображення напрямків руху розплавленого електронним пучком металу: а) концентрація елементів VI групи нижче критичного рівня, б) концентрація елементів VI групи вище критичного рівня [133]

За твердженням авторів роботи [133] зміна напрямків руху розплавленого електронним пучком металу (фактично дисипативних структур) була зумовлена зміною концентрації концентрація елементів VI групи (O, S, Se, Te) в сплаві, а критична точка зміну напрямку течії розташована на залежності коефіцієнту поверхневого натяжіння від температури (див. Рисунок 1.2 нижня крива справа). В той же час у виразі (1.2) присутній множник, що означає градієнт температури вздовж радіальної координати. У випадку його зміни до певної критичної величини так само можна очікувати, що це відобразиться на просторовому розподілу модульованих структур розплавленої речовини а в подальшому на твердотільній структурі. Завдяки тугоплавкості молібдену ми можемо очікувати на більш виразний слід від утворення модульованих структур у речовині після її кристалізації. Адже вплив сильнострумового пучка на мішень супроводжується генерацією ударних хвиль імпульсний тиск яких, наприклад, за даними роботи [134] визначається виразом

$$p = \frac{4Wt(\gamma - 1)}{\pi d S^2}, \tag{1.4}$$

де W енергія випромінювання, що поглинена в розплавленій частині мішені, d товщина розплавлення мішені, S опромінювана площа, t час перебування у розплавленому стані, γ співвідношення теплоємностей в розплавленому та твердому станах. Виникнення імпульсних хвиль в розплавленій речовині приводять до різних наслідків формування поверхні при незначних відмінностях в значенні густини струму пучка. Так в роботі [135] з метою «ущільнення» струму пучка на шляху його руху до мішені з нержавіючої сталі встановлювались концентруючі колекторні вставки, наслідком цього були зафіксовані на поверхні кратери

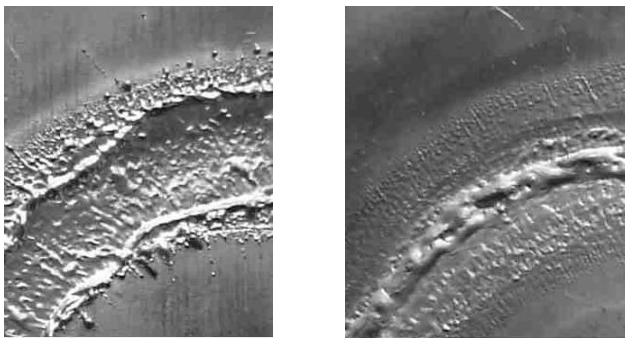


Рисунок 1.3 – Фотографія поверхонь мішеней а)- опромінення з колекторною вставкою, б)- опромінення без колекторної вставки [135]

Говорячи про формування ударного імпульсу внаслідок дії опромінення, наведемо приклад того, що в роботі [136] сильнострумовий електронний пучок застосовувався для імітаційного моделювання ударного впливу мікрочастинок навколоземного простору на зовнішню частину космічних літальних апаратів (модельним об'єктом була сталь 12Х18Н10Т). При цьому зовнішні пошкодження від дії пучка з енергіями в діапазоні 330-500 кеВ та густинами потоків від $5x10^8$ Вт/см^2 до $5x10^{10}$ Вт/см^2 являли собою мікрократери, подібні до тих що спостерігались внаслідок зіткнення з частинками космічного сміття. Але звертає увагу характер розльоту розплавленої пучком речовини (Рисунок 1.4). Починаючи з більш високої енергії частинок утворюється більш виразна текстура закристалізованих променів розльоту (Рисунок 1.4б).

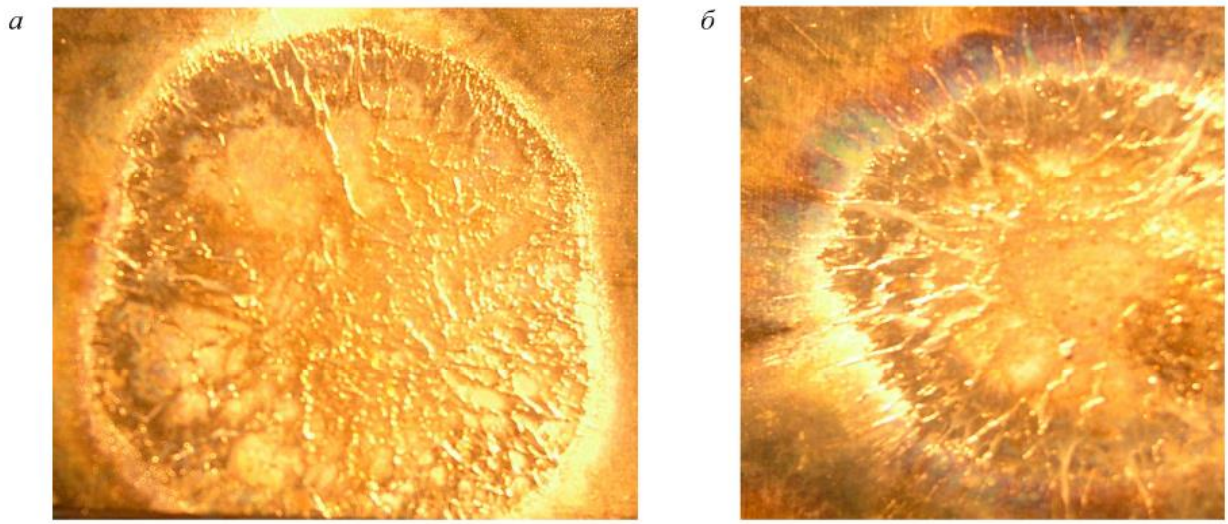


Рисунок 1.4 – Фотографія поверхні сталі 12Х18Н10Т після опромінення електронним пучком густиною потоку $5x10^{10}$ Вт/см^2 з енергіями: а) 300 кеВ, б) 500 кеВ [136]

Утворення подібної текстури, ймовірно, є свідченням того, що відбулось переваження сили взаємного відштовхування в об’ємі розплавленої речовини над силами поверхневого натягу та силами гравітації. В роботі [137] проводиться узагальнення результатів спостереження за станом металічної поверхні після обробки компресійними потоками плазми в діапазоні значень флюєнсу енергії від 10 Дж/см^2 до 35 Дж/см^2. Для плазмового потоку є властивим нерівномірність розподілу флюєнсу енергії з максимумом на осі та спадом до периферії. При цьому в області максимуму спостерігається рельєф з невпорядкованим розташуванням гребнів, тоді як по мірі зменшення інтенсивності опромінення та наближення до периферійної зони, простежується більш очевидна спрямованість хвиль на поверхні.

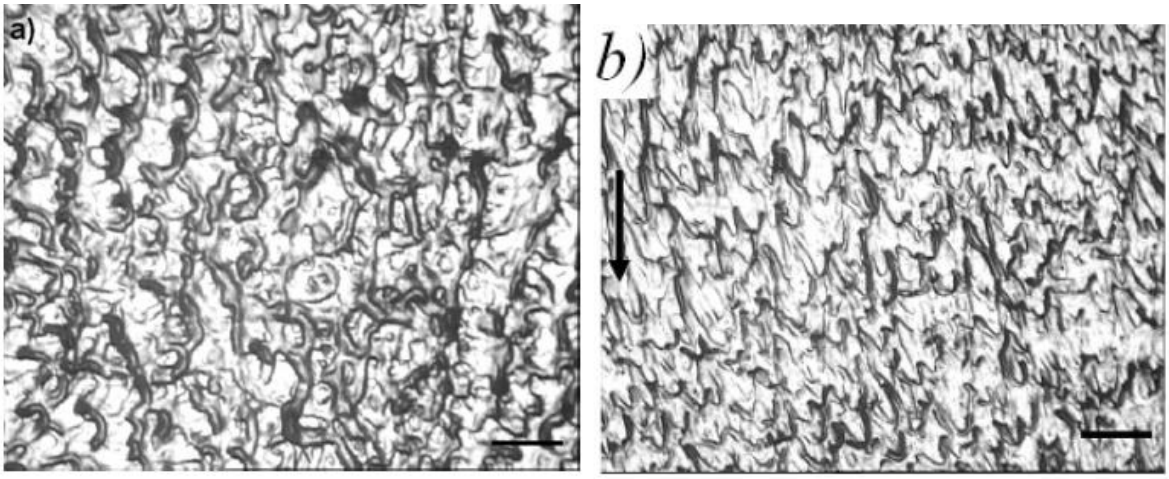


Рисунок 1.5 – Поверхня зразка ст. 3. після опромінення компресійним плазмовим потоком з флюєнсом енергії:
а) 20 Дж/см^2, б) 15 Дж/см^2 [137]

Розглядаючи питання залежності зеренної структури опроміненого молібдену від густини потоку електронного випромінювання, зазначимо, що тут відслідковується певна якісна відмінність при досягненні певного значення флюєнсу. Так в роботі [138] вивчались особливості використання методу електронно-променевого плавлення для переробки молібден містких відходів. Як бачимо з Рисунка 1.6, початкова структура молібденових відходів, що містила певні залишки, після опромінення до переплаву електронним пучком з потужністю 14 кВт утворює різнозернисту багатокутову структуру,

тоді як потужність в 17 кВт забезпечує рівновісну гомогенну зеренну структуру. Зазначимо , що час опромінення був однаковим і становив 5 хвилин Окрім того, при більш високому значення потужності забезпечується краще видалення домішкових елементів. Тобто можна припустити, що при досягнення певного критичного значення потужності відбуваються якісно відмінні процеси формування внутрішньої структури, зумовлені інтенсивністю теплообміну між поверхневими шарами та об'ємом опроміненого матеріалу.

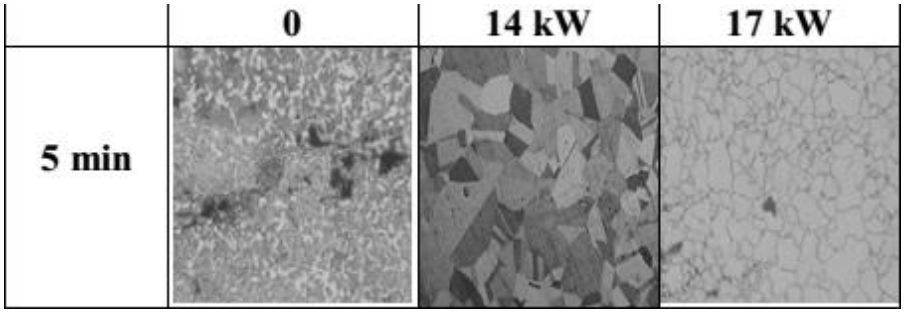


Рисунок 1.6 – Структура молібдену після переплавлення електронним пучком з різними значеннями потужності [138]

Висновки до розділу 1

1. Просторово неоднорідні (несумірні) фази є універсальним відгуком складних квантових та класичних систем на конкуренцію внутрішніх взаємодій. Встановлено, що перехід від високосиметричного до впорядкованого стану через проміжну модульовану фазу супроводжується складною трансформацією параметра порядку — від синусоїдальних гармонік до солітонних решіток.

2. Доведено, що для широкого класу сегнетоелектриків та магнетиків опис у межах однокомпонентного (скалярного) параметра порядку є не лише методично виправданим, а й фізично адекватним поблизу критичних точок. Це дозволяє використовувати потужний апарат теорії Ландау для аналізу стабільності та релаксації неоднорідних структур.

3. Проаналізовано ключову роль симетрійних факторів: якщо в системах I типу формування модуляцій зумовлене наявністю інваріанта

Ліфшиця, то в системах II типу (зокрема у сімействі $Sn_2P_2S_6$) воно визначається специфікою міжатомних сил та градієнтних внесків. Виявлено, що залучення вторинних параметрів порядку та пружних ступенів свободи є необхідним для пояснення солітонних режимів та аномалій поблизу lock-in переходів.

4. Встановлено, що класична феноменологічна схема потребує розширення шляхом врахування некласичних температурних залежностей коефіцієнтів та інваріантів високих порядків. Це зумовлено складною структурою потенціального рельєфу реальних кристалів та впливом некритичних флуктуацій, що є критично важливим для усунення існуючих суперечностей між теоретичними передбаченнями та експериментальними даними.

5. Розуміння особливостей поведінки тугоплавких матеріалів під дією потужних потоків випромінювання, зокрема, молібдену має істотне прикладне значення для високотехнологічних галузей (термоядерна енергетика, синтез ізотопів, випробування ядерних матеріалів, одержання чистих матеріалів з заданою структурою)

6. Процеси тепло масообміну молібдену та інших тугоплавких матеріалів, опромінених в режимі часткового переплаву мають нелінійних характер, якісні особливості якого визначаються значеннями інтенсивності потоку випромінювання.

7. Ознакою нелінійності термодинамічних процесів в опроміненому молібдені є утворення впорядкованих модульованих структур в напрямках, що корелюють з градієнтами температурних полів. Такі структури являють собою твердо фазні відбитки дисипативних процесів, що були ініційовані в рідкій фазі як результат просторової нерівномірності імпульсного поля випромінювання.

РОЗДІЛ 2. ОБ'ЄКТИ, МЕТОДИ ДОСЛІДЖЕНЬ ТА ЧИСЕЛЬНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ТЕПЛОВИХ ПРОЦЕСІВ

2.1. Об'єкти дослідження та методика опромінення електронним пучком

Об'єктом дослідження у даній роботі слугували зразки молібдену високої чистоти (99,9 %), виготовлені у формі мішеней завтовшки 1 мм.

Модифікація приповерхневого шару зразків проводилася шляхом опромінення імпульсним пучком релятивістських електронів високої сили струму. Експериментальні дослідження виконувалися на базі прискорювача ТЕМР-А, розташованого в Національному науковому центрі «Харківський фізико-технічний інститут» (ННЦ ХФТІ). Дана установка дозволяє генерувати потужні електронні потоки з параметрами, що забезпечують швидкісний нагрів матеріалу аж до фазових переходів плавлення та випаровування.

Опромінення здійснювалося електронним променем діаметром 60 мм. Основні технічні характеристики імпульсного впливу під час проведення експериментів становили: енергія електронів — 350 кеВ; тривалість фронту імпульсу — 5 мкс; середній струм під час фронту імпульсу — 2 кА.

Для вивчення морфології поверхні та особливостей руйнування приповерхневого шару використовувався металографічний мікроскоп ІЕ-200 та скануючий електронний мікроскоп JEOL-840. Останній дозволяв проводити детальний фрактографічний аналіз фрагментів руйнування з високою роздільною здатністю.

2.2. Методи дослідження мікроструктури, фазового складу та механічних властивостей

Для комплексного аналізу структурно-фазових трансформацій, що відбуваються у молібденовій мішені під дією потужного електронного

опромінення, було застосовано поєднання методів рентгеноструктурного аналізу, електронної мікроскопії та дюрометричних випробувань.

Рентгеноструктурний аналіз (РСА) проводився з метою ідентифікації фазового складу приповерхневих шарів та оцінки параметрів кристалічної решітки після термічного впливу. Вимірювання виконувалися на автоматизованому рентгенівському дифрактометрі DRON-4. Зйомка дифракційних спектрів здійснювалася у мідному випромінюванні ($Cu - K_\alpha$).

Якісний та кількісний фазовий аналіз, а також уточнення параметрів елементарної комірки проводилися за допомогою спеціалізованого програмного комплексу Match!4. У роботі використовувалася оновлена версія кристалографічної бази даних (реліз літа 2025 року), що забезпечило високу точність ідентифікації фаз та відповідність отриманих результатів міжнародним стандартам кристалографії. Такий підхід дозволив не лише підтвердити чистоту вихідного матеріалу, але й детально проаналізувати динаміку зміни параметрів решітки у зонах термічного впливу та переплаву.

Дослідження морфології та мікроструктури проводилося методом скануючої електронної мікроскопії (СЕМ) на приладі JEOL-840. Особлива увага приділялася вивченню фрагментів руйнування приповерхневого шару зразка. Використання СЕМ дозволило візуалізувати наслідки швидкісного нагріву та подальшої кристалізації, зокрема виявити мікротріщини, пори та особливості рельєфу, що виникають внаслідок нерівномірного розподілу щільності енергії у пучку. Висока роздільна здатність мікроскопа забезпечила можливість детального аналізу зон термічного впливу на субмікронному рівні.

Механічні властивості приповерхневих зон досліджувалися шляхом вимірювання мікротвердості за методом Віккерса. Випробування проводилися на приладі ПМТ-3. Для отримання коректних даних про градієнт зміцнення (або пом'якшення) матеріалу по глибині та радіусу зони опромінення було обрано навантаження на індентор масою 20 г.

2.3. Математична модель теплових процесів та чисельний алгоритм розрахунку

Для теоретичної інтерпретації експериментальних результатів та аналізу динаміки температурних полів у молібденовій мішені при опроміненні потужним електронним пучком було розроблено математичну модель, що базується на розв'язанні нестаціонарного рівняння теплопровідності. Враховуючи геометрію пучка та мішені, задача розглядалася у циліндричній системі координат (r, z). Прийняте припущення про аксіальну симетрію пучка дозволило знехтувати залежністю від кутової координати, що суттєво оптимізувало обчислювальну складність моделі без втрати фізичної достовірності.

Розподіл температури в об'ємі матеріалу описується нелінійним рівнянням теплопровідності з внутрішнім джерелом тепла:

$$\rho(T)c(T)\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(rk(T)\frac{\partial T}{\partial r}\right) + \frac{\partial}{\partial z}\left(k(T)\frac{\partial T}{\partial z}\right) + Q(r,z,t) - \frac{\partial E_{ph}}{\partial t} \qquad (2.1)$$

де $\rho(T)$ — густина матеріалу, $c(T)$ — питома теплоємність, $k(T)$ — коефіцієнт теплопровідності. Член $Q(r,z,t)$ відповідає за об'ємну щільність потужності джерела тепла, зумовлену поглинанням енергії електронного пучка. Вплив фазового переходу (плавлення) враховувався через член E_{ph}, пов'язаний з питомою ентальпією плавлення:

$$E_{ph} = L \cdot h(T - T_m) \qquad (2.2)$$

де L — прихована теплота плавлення молібдену, $T_m = 2896$ K — температура плавлення, а $h(T - T_m)$ — функція Хевісайда, що визначає стан агрегатної фази.

Чисельна реалізація моделі виконана методом скінченних різниць (FDM) з використанням явної часової схеми. Для забезпечення стійкості розв'язку та високої точності відтворення градієнтів температури було обрано анізотропну розрахункову сітку з наступними параметрами дискретизації:

часовий крок $\Delta t = 10$ нс; крок за радіальною координатою $\Delta r = 100$ мкм; крок за глибиною $\Delta z = 2$ мкм.

Такий малий крок за глибиною Δz є критичним для коректного опису енерговиділення у тонкому приповерхневому шарі, де відбувається основне поглинання енергії релятивістських електронів. Програмний комплекс був розроблений в інтегрованому середовищі розробки Spyder (версія 6.0.7) для наукового програмування мовою Python з активним використанням бібліотеки NumPy для векторизації обчислень, що дозволило ефективно оперувати великими масивами даних при розрахунку динаміки температурних полів.

2.4. Температурні залежності теплофізичних властивостей молібдену

Для забезпечення високої достовірності результатів моделювання в умовах екстремальних температурних градієнтів, у Spyder було реалізовано динамічний перерахунок теплофізичних характеристик молібдену на кожному часовому кроці.

У даній роботі температурні залежності густини $\rho(T)$ (Рисунок 2.1), питомої теплоємності $c(T)$ (Рисунок 2.2) та коефіцієнта теплопровідності $k(T)$ (Рисунок 2.3) були отримані шляхом кусково-поліноміальної апроксимації даних міжнародної бази MPDB (Material Property Database). Розрахунковий діапазон температур охоплює інтервал від 0 до 5000 К, що дозволяє коректно описувати стан матеріалу як у твердій, так і в рідкій фазах.

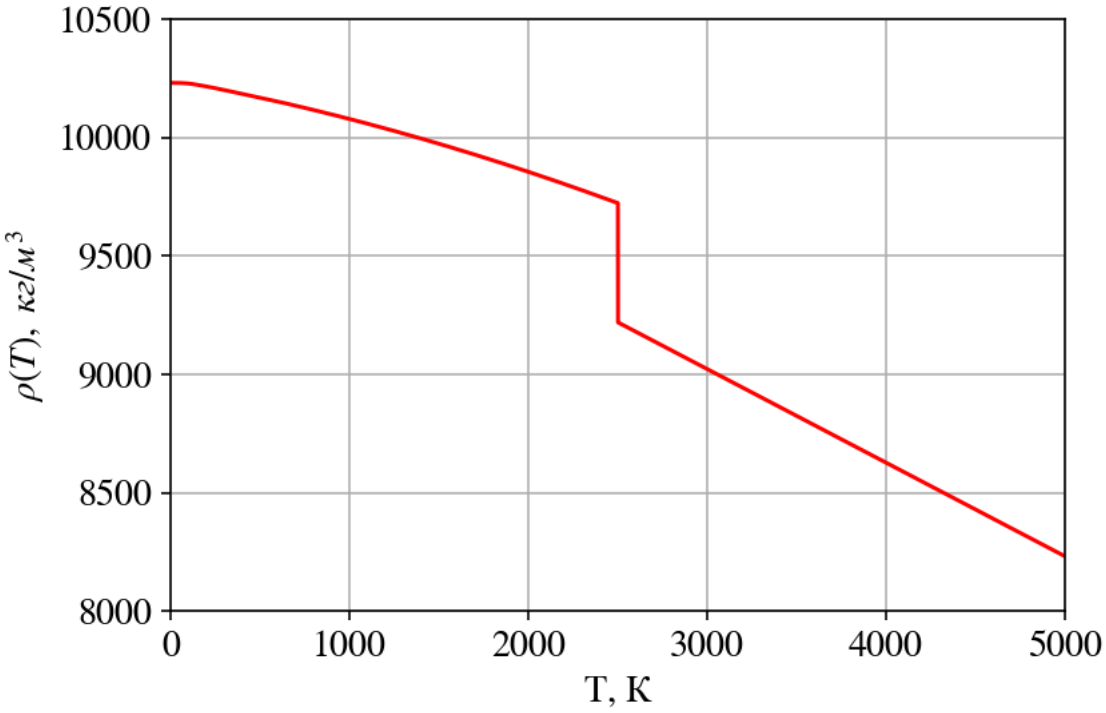


Рисунок 2.1 – Температурна залежність густини $\rho(T)$ для Mo

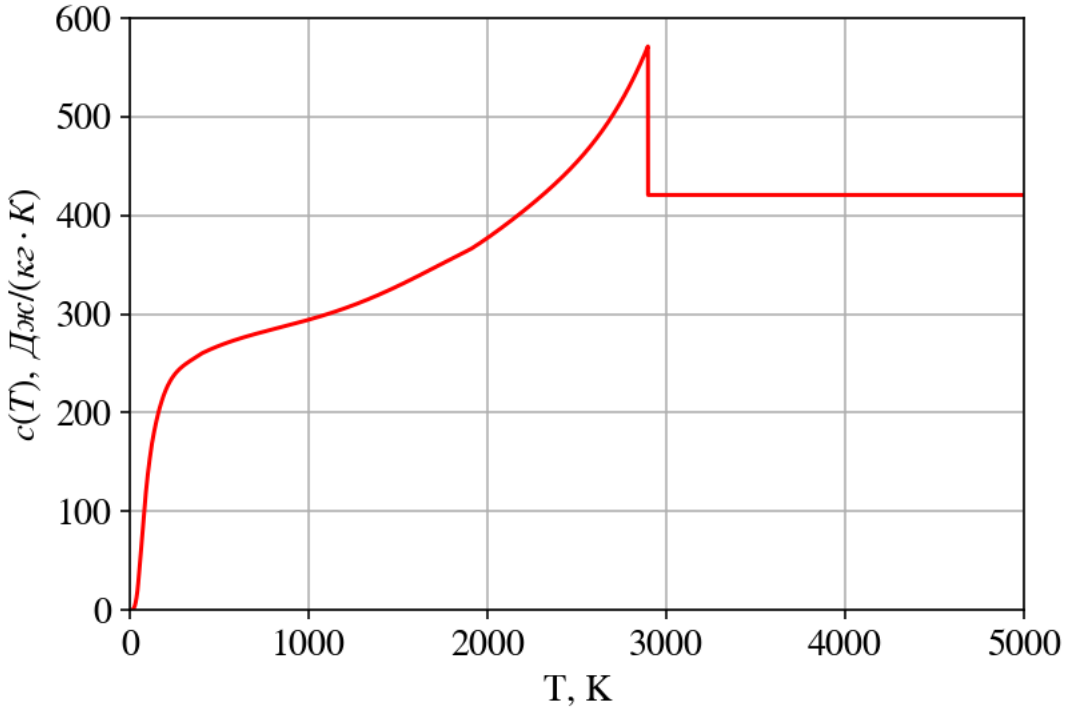


Рисунок 2.2 – Температурна залежність питомої теплоємності $c(T)$ для Mo

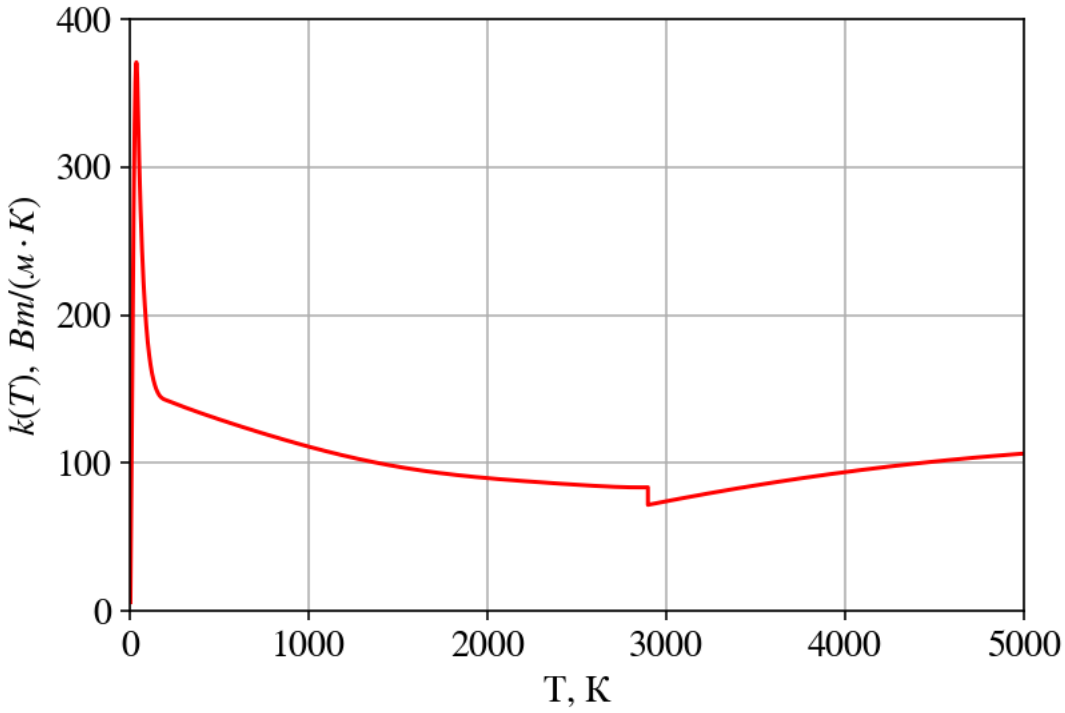


Рисунок 2.3 – Температурна залежність коефіцієнта теплопровідності $k(T)$ для Mo

2.5. Чисельна реалізація алгоритму та моделювання фазових переходів

Програмна реалізація чисельної схеми базується на ітераційному алгоритмі оновлення температурних полів за явною схемою методу скінченних різниць. Для коректного врахування граничних умов та мінімізації крайових ефектів у коді використано метод доповнення масивів з крайовими значеннями, що дозволяє одноманітно обробляти внутрішні та граничні вузли розрахункової сітки.

Ключовою особливістю алгоритму є обчислення дифузійних термів у циліндричній системі координат. Радіальна та аксіальна дифузія реалізована з урахуванням центральних різниць для апроксимації потоків тепла.

Радіальний внесок враховує як чисту теплопровідність $\left(1/\,\partial r(k(T)\cdot \partial T/\,\partial r)\right)$, так і геометричний чинник циліндричної системи $(1/r\ \cdot k(T)\cdot \partial T/\,\partial r)$. Перший внесок реалізовано, як

$$term_1 = \left[\left(\frac{1}{4}k_{i+1,j} + \frac{3}{4}k_{i,j}\right)\cdot\left(T_{i+1,j} - T_{i,j}\right) - \left(\frac{1}{4}k_{i-1,j} + \frac{3}{4}k_{i,j}\right) \cdot\left(T_{i,j} - T_{i-1,j}\right)\right]/\Delta r^2, \tag{2.3}$$

з ваговим коефіцієнтом $1/4$ а другий внесок –

$$term_2 = k_{i,j}\cdot\left(T_{i+1,j} - T_{i,j}\right)/\Delta r/(r_i + \Delta r/2), \tag{2.4}$$

де доданок $\Delta r/2$ вирішує проблему сингулярності в початку координат.

Аксіальний внесок розраховується так само як і (2.3), але з коефіцієнтом $1/2$:

$$term_z = \left[\left(k_{i,j+1} + k_{i,j}\right)\cdot\left(T_{i,j+1} - T_{i,j}\right) - \left(k_{i,j-1} + k_{i,j}\right) \cdot\left(T_{i,j} - T_{i,j-1}\right)\right]/\Delta z^2/2. \tag{2.5}$$

Причиною вибору різних вагових коефіцієнтів у (2.3) та (2.5) пояснюється тим, що крок за радіальною координатою є набагато більший за крок глибинної координати.

Особлива увага приділена моделюванню прихованої теплоти плавлення. На відміну від спрощених моделей, де фазовий перехід ігнорується, у даному алгоритмі реалізовано метод «енергетичного затвору» (enthalpy-like method). Такий підхід дозволяє з високою точністю відстежувати положення фронту плавлення в реальному часі та визначати динамічну межу розділу фаз, що є критичним для розрахунку глибини зони термічного впливу.

2.6. Методика обробки та візуалізації результатів моделювання

Заключним етапом методології є статистична обробка та багатовимірна візуалізація отриманих даних, що реалізовано засобами бібліотек Matplotlib та NumPy в єдиному середовищі з обчислювальним ядром.

Методика аналізу результатів включає наступні кроки:

Побудова тривимірних розподілів: Для отримання цілісної картини теплового стану мішені проводиться побудова 3D-поверхонь розподілу температури $T(r, z)$. Це дозволяє візуально оцінити геометрію зони розплаву та виявити області максимальних термічних напружень. Масштабування осей

(перевід z у мікрометри, а r у міліметри) забезпечує наочність представлення результатів для тонких приповерхневих шарів.

Висновки до розділу 2

1. Описано параметри опромінення на прискорювачі ТЕМП-А (енергія 350 кеВ, тривалість фронту 5 мкс), що забезпечують швидкісний нагрів матеріалу.

2. Сформовано комплексний методичний підхід до аналізу структурно-фазового стану та механічних властивостей мішеней після радіаційного впливу, що включає растрову електронну мікроскопію (JEOL-840), рентгеноструктурний аналіз (DRON-4) та вимірювання мікротвердості за Віккерсом (ПМТ-3).

3. Розроблено та реалізовано в Spyder нелінійну теплофізичну модель, що враховує температурні залежності властивостей матеріалу та фазові переходи, що створює фундамент для аналізу експериментальних даних у наступних розділах.

РОЗДІЛ 3. ФЕНОМЕНОЛОГІЧНА МОДЕЛЬ ФАЗОВИХ ПЕРЕХОДІВ З ВИНИКНЕННЯМ ПРОСТОРОВО НЕОДНОРОДНИХ СТАНІВ

3.1. Феноменологічний опис систем із модульованими структурами однокомпонентного параметра порядку

У сучасній фізиці конденсованого стану для опису довгоперіодичних структур параметра порядку (ПП), що характеризуються просторовою неоднорідністю, фундаментальне значення мають феноменологічні моделі середнього поля. Зокрема, аналіз фазових переходів другого роду базується на положеннях теорії Ландау [26, 56]. Перевага такого підходу полягає в можливості кількісного опису властивостей системи за допомогою обмеженого набору макроскопічних величин. Ці параметри можна отримати як шляхом прямих експериментів, так і через оцінки в межах мікроскопічних моделей [51].

Головна цінність феноменологічного підходу полягає у здатності розкрити фундаментальні фізичні механізми досліджуваних явищ, уникаючи надмірної деталізації розрахунків або обчислювальних обмежень, що часто притаманні комп'ютерному моделюванню під час використання мікроскопічних підходів.

Ключовою концепцією теорії Ландау є припущення про те, що будь-який стан системи описується єдиною за своєю аналітичною формою термодинамічною функцією. Реалізація цього завдання передбачає побудову та аналіз нерівноважного термодинамічного потенціалу системи Ф, який, в загальному випадку, розглядається як функціонал від параметра порядку $\varphi(x)$, що в свою чергу залежить від просторової координати [26].

Зазвичай залежність термодинамічного потенціалу $\Phi(\varphi)$ подається у вигляді степеневого ряду за φ, де враховуються кілька перших членів з нижчими ступенями. Конкретний склад і властивості доданків у цьому виразі диктуються симетрією досліджуваної фізичної системи. У разі, якщо в системі

можуть існувати просторово-модульовані фази, в яких параметр порядку є періодичною функцією координати, у вираз для термодинамічного потенціалу (ТП) необхідно додати доданки, що містять просторові похідні параметра $\varphi(x)$. При цьому просторова модуляція ПП виникає як результат конкуренції та компромісу різних внутрішніх взаємодій [26, 55], які на рівні ТП і описуються за допомогою зазначених градієнтних та нелінійних інваріантів. Таке розширення теорії Ландау фазових переходів дає змогу кількісно та адекватно описати модульовані структури ПП, що спостерігаються в експериментах [139]. Рівноважний розподіл ПП у невідповідній фазі є екстремаллю ТП і визначається шляхом розв'язання нелінійного варіаційного диференціального рівняння $\delta\Phi = 0$.

У цьому розділі розглянуто модель, що дозволяє описувати просторово-неоднорідні стани однокомпонентного параметра порядку, та проаналізовано допустимі моделлю несумірні фази.

Феноменологічний опис систем, що характеризується скалярним параметром порядку, може бути виконано на основі термодинамічного потенціалу наступного виду [140]:

$$\Phi = \frac{1}{L}\int_0^L \Big[\kappa(\varphi'')^2 - \eta(\varphi\varphi')^2 - \sigma(\varphi')^2 + A\varphi^2 + \frac{B}{2}\varphi^4 + \frac{C}{3}\varphi^6 + \cdots - H\varphi\Big]\, dx, \tag{3.1}$$

(3.1)

де прийняті такі позначення:

L - Довжина кристала вздовж осі модуляції OX;

$\varphi(x)$ - скалярний параметр порядку;

$\varphi'(x) \equiv \partial\varphi/\partial x$ - просторова похідна ПП уздовж осі модуляції;

$\kappa,\ \eta,\ \sigma,\ A,\ B,\ C$ - матеріальні параметри середовища, що визначаються характером міжатомної взаємодії, зазвичай передбачається $\kappa > 0,\ \sigma > 0$ і $C > 0$;

H – зовнішнє поле, наприклад, електричне поле для власних сегнетоелектриків.

Трикрапка у формулі (3.1) вказує на вказує на можливість додавання інших інваріантів, які допустимі симетрією системи і побудовані з ступенів параметра порядку і просторових похідних ПП. Згідно з теорією Ландау фазових переходів передбачається, що фазові переходи в системі відбуваються при зміні температури, звідки параметр A лінійно залежить від T ($A = A_0(T - T_0)$), де A_0, T_0 - деякі константи.

У подальшому розгляді вважатимемо зовнішнє поле відсутнім $H = 0$.

Що ж до інваріантів, не зазначених у (3.1) явно, то прикладом таких доданків може бути $\sim(\varphi')^4$ [101, 141]. Слід зазначити, що такі члени мають менший порядок малості, ніж наведені в (3.1). Справді, якщо вважати, що ПП має вигляд $\varphi(x) = a \cdot f(bx)$, де амплітуда a і вектор модуляції b розглядаються як малі величини (що справедливо як мінімум поблизу точки переходу з високосиметричної в несумірну фазу [26]), то тоді у виразі (3.1) зібрані всі доданки $\sim a^n b^l$, порядок малості яких за параметром $m = n + l$ не більше 6 (див. також розгляд нижче в розділі 2). Інваріант $\sim(\varphi')^4$ має порядок $m = 8$. Тому його додавання (3.1) вимагає або специфічних фізичних умов (вимог до системи), або або врахування абсолютно всіх членів такого ж порядку, що значно ускладнює, і так складної, розв'язання варіаційної задачі (3.1).

Для зручності аналізу та чисельних обчислень виконаємо перехід до безрозмірних параметрів шляхом перенормування параметра порядку та просторового масштабу довжини згідно $\varphi(x) \to \sqrt{\sigma}/(\kappa C)^{1/4} \cdot \varphi\left(\sqrt{\{\kappa/\sigma} \cdot x\right)$, при цьому термодинамічний потенціал (3.1) перетворюється на вигляд:

$$\Phi = \frac{\Phi_1}{L_1} \cdot \int_0^{L_1} \left[(\varphi'')^2 - g(\varphi\varphi')^2 - \gamma(\varphi')^2 + q\varphi^2 + \frac{1}{2}p\varphi^4 + \frac{1}{3}h\varphi^6\right] dx, \quad (3.2)$$

де $\Phi_1 = \sigma^3/\left(\kappa\sqrt{\kappa C}\right)$; $L_1 = L \cdot \sqrt{\sigma/\kappa}$; $g = \eta/\sqrt{\kappa C}$; $q = \kappa A/\sigma^2$; $p = B/\sigma \cdot \sqrt{\kappa/C}$; $\gamma \equiv 1$ і $h \equiv 1$. При цьому параметр порядку $\varphi(x)$ і величина x - безрозмірні.

Позначення параметрів γ і h збережені у виразі (3.2) для відстеження вкладу цих доданків у вирази для величин і характеристик системи, що спостерігаються. Як приклад порядку одержуваних значень наведемо значення наведених параметрів для $NaNO_2$: $g = -9.51$, $p = -0.651$, вихідні дані взяті з [84].

Як видно, поведінка термодинамічного потенціалу (3.2) визначається трьома основними безрозмірними узагальненими параметрами: ефективною температурою q, величиною локальної нелінійної взаємодії p і величиною взаємодії g взаємодії поля $\varphi(x)$ з полем градієнтів $\nabla\varphi(x)$.

В рамках моделі (3.2) можна описати структурні переходи з появою спонтанної поляризації в сегнетоелектриках $NaNO_2$, $SC(NH_2)_2$ [19, 60], твердих розчинах $\left(Pb_ySn_{1-y}\right)_2P_2(Se_xS_{1-x})_6$ [34], намагніченість у ряді магнетиків [19], фазові переходи в рідких кристалах [42] та інших речовинах.

Окремим випадком є ситуація, коли $g = h = 0$ модель (3.2) зводиться до моделі Міхельсона, яку використовують для опису модульованих структур деяких магнетиках [97]. Хоча модель Міхельсона досить добре описує перехід із високосиметричної фази в модульовану, але практично не відтворює подальшу параметричну еволюцію системи.

3.1.1. Фізичний та математичний зміст градієнтних доданків у виразі для ТП

У межах моделі (3.2) відсутність градієнтних доданків повертає нас до класичного розкладу термодинамічного потенціалу теорії Ландау, де параметр порядку вважається малим.

Якщо внесок градієнтних членів (3.2) позитивний або вони відсутні, то T_0 є температурою фазового переходу другого роду з високосиметричної фази $\varphi = 0$ безпосередньо в сумірний стан $\varphi = (-q/p)^{1/2}$ [26], і модульована фаза в такій системі не виникає. У цьому випадку система має лише один ступінь свободи: параметр порядку $\varphi = const(x)$.

Введення у вираз для термодинамічного потенціалу Ф одного градієнтного члена, пропорційного $(\varphi')^2$, що відповідає моделі Гінзбурга-Ландау-Вільсона), додає до φ континуум ступенів свободи, що взаємодіють за допомогою короткодіючих сил, і дозволяє взяти до уваги як кореляції, так і взаємодію флуктуації $\varphi(x)$. Проте для появи стабільних просторово-неоднорідних періодичних структур $\varphi(x)$ лише одного градієнтного доданка недостатньо. Вони виникають лише як результат конкуренції між декількома градієнтними членами або через специфічні граничні умови, як у випадку доменних структур.

З погляду математичного аналізу, наявність інваріанту $\sim(\varphi'')^2$ приводить до того, що зростання флуктуації параметра порядку $\varphi(x)$ та збільшення нестабільності вихідної високосиметричної фази $\varphi = 0$ призводить до фазового переходу другого роду в точці $q = \gamma^2/4$ у фазу MS1 [140]. Цей процес можна описати в лінійному наближенні моделі (3.2) як результат конкуренції трьох квадратичних членів: φ''^2, $\gamma\phi'^2$ і $q\varphi^2$. Цей перехід є наслідком спонтанного порушення симетрії у системі ступенів свободи поля $\varphi(x)$. Аналіз умов стійкості високосиметричної та модульованої фаз показує [26], що межі стійкості цих фаз збігаються при $\gamma > 0$, звідки випливає, що перехід між ними є фазовим переходом другого роду.

Виправданість розкладання термодинамічного потенціалу до ряду за градієнтними членами зумовлена малістю параметра [26] $\varepsilon = \Delta b/b^* \ll 1$, де Δb − різниця хвильових чисел, що відповідають модульованій та сумірній фазам, b^* − період зворотної решітки. Оскільки $b^2 \sim \gamma$, то вимога малості ε еквівалентна умові $\sqrt{\gamma}/b^* \ll 1$.

У моделі (3.2) для існування рівноважної несумірної фази необхідне виконання умови $\gamma > 0$ [26, 51]. При $\gamma > 0$ конкуренція і компроміс градієнтних доданків (3.2) призводить до виникнення стійких в деякому інтервалі температур просторово-неоднорідних розподілів параметра порядку,

що характеризуються хвильовим вектором $\vec{b}||Ox,\ b^2 \approx \gamma/2$. При цьому модульовані (інші назви: несумірні, довгоперіодичні) структури параметра порядку є енергетично переважними (на відміну від доменних структур) навіть у необмеженому середовищі [90].

Фізичною причиною, що призводить до умови $\gamma > 0$, може бути взаємодія параметра порядку $\varphi(x)$ з іншою нормальною координатою $\xi(x)$, що перетворюється за іншим неприведеним уявленням, ніж основний параметр порядку [55]. Ефективне вилучення $\xi(x)$ з термодинамічного потенціалу перенормує коефіцієнт при інваріанті $(\varphi')^2$ таким чином, що на відміну від стандартного функціоналу Ландау, внесок у ТП інваріанту $\sim(\varphi')^2$ виявляється негативним. Наприклад, для нітриту натрію ($NaNO_2$): $\varphi(x) = P_y$ − спонтанна поляризація, а $\xi(x) = u_{xy} - xy$ -компонента тензора деформації.

Іншою причиною, що призводить до $\gamma > 0$, може бути специфічний вид взаємодії в кристалічній решітці [42].

Задля більшої глобальної стійкості системи (обмеженості потенціалу знизу) необхідно виконання умови $h > 0$, а при $h = 0$ відповідно має бути $p > 0$. Для стійкості щодо нескінченного зростання хвильового числа ПП (тобто нескінченного наростання хвилі модуляції) має виконуватися умова $\sigma > 0$.

Інваріант, пропорційний φ^6, зазвичай враховується у разі, якщо параметр $p < 0$, при цьому фазовий перехід з модульованої фази в сумірний стан є переходом першого роду [50]. У цьому випадку T_0 є температурою так званого "віртуального" фазового переходу з високосиметричної фази у сумірну фазу. Зауважимо, що в системах з двокомпонентним ПП введення двох інваріантів, пропорційних шостому ступені компонент параметра порядку, дозволяє описувати також фазовий перехід першого роду з вихідної в модульовану фазу.

Зміст градієнтних членів у термодинамічному потенціалі (3.2) стає більш наочним, якщо записати їх не в диференційній формі, а в різницевій, як, наприклад, це прийнято в моделях DIFFOUR (discrete frustrated φ^4) [142]. Так,

інваріант $(\varphi')^2 \approx (\varphi_n - \varphi_{n-1})^2$ описує взаємодію між найближчими сусідніми площинами кристала (NN − nearest neighbors), перпендикулярними осі модуляції (у межах такої площини значення параметра порядку незмінно). Інваріант $(\varphi'')^2 \approx (\varphi_{n+1} - 2\varphi_n + \varphi_{n-1})^2$ характеризує взаємодію між наступними за ними сусідами (NNN − next nearest neighbors). Відповідно до знаків матеріальних параметрів, у системі (3.2) NN-взаємодія має характер, подібний до антиферомагнітної взаємодії, а NNN-взаємодія – до феромагнітної.

Доданок $\sim(\varphi\varphi')^2$ вперше було введено в модель (3.1) для пояснення діелектричної аномалії, що спостерігається в сегнетоелектриці $NaNO_2$ [75]. Член $\sim(\varphi\varphi')^2 \approx (\varphi_n - \varphi_{n-1})^2\varphi_n^2$ пов'язує амплітуду ПП a з хвильовим числом b, завдяки чому дає можливість описати спостерігається експериментально залежність характеристик системи, зокрема, періоду модуляції, від зовнішніх впливів (температури, електромагнітних полів, тиску). Він також істотно впливає на нелінійність розподілу параметра порядку, тобто на величину вкладу вищих гармонік поблизу точки переходу в сумірний стан [26]. При $g < 0$ параметрична еволюція системи потенційно може призвести до появи станів, просторовий розподіл ПП яких можна охарактеризувати як ґратки областей сумірності, розділених щодо вузькими межами [49]. Також умова $g < 0$ сприяє збереженню фазового переходу другого роду з вихідної невпорядкованої фази модульовану фазу [49].

3.2. Якісний аналіз допустимих фаз. Сценарій із виникненням bell-солітонних структур

3.2.1. Варіаційне диференційне рівняння (ВДР)

Для знаходження просторового розподілу параметра порядку, що мінімізує функціонал термодинамічного потенціалу (3.2), необхідно розв'язати варіаційну задачу. Рівняння Ейлера — Пуассона для даної моделі набуває вигляду диференціального рівняння четвертого порядку:

$$\varphi^{(IV)} + g(\varphi^2\varphi'' + \varphi\varphi^2) + \gamma\varphi'' + q\varphi + p\varphi^3 + h\varphi^5 = 0, \qquad (3.3)$$

Для спрощення подальшого аналізу скористаємося першим інтегралом рівняння (3.3), який можна подати у наступній формі:

$$(2\varphi'\varphi''' - \varphi''^2) + g(\varphi\varphi')^2 + \gamma(\varphi')^2 + q\varphi^2 + \frac{p}{2}\varphi^4 + \frac{h}{3}\varphi^6 = D, \qquad (3.4)$$

Тут D виступає як константа інтегрування, фізичний зміст якої пов'язаний зі значенням енергії системи.

Для пошуку розв'язку доцільно виконати заміну змінних, що дозволяє знизити порядок диференціального рівняння (3.4). Введемо нові змінні: $w(z) = \varphi'^2(x),\ z = \varphi^2(x)$. Після відповідних перетворень рівняння (3.4) трансформується у вираз:

$$2(ww_z' + 2zww_{zz}'') - zw_z'^2 + (\gamma + gz)w + qz + \frac{p}{2}z^2 + \frac{h}{3}z^3 = D, \qquad (3.5)$$

Оскільки поблизу точок фазових переходів значення ПП φ та його похідних є малими величинами, так само як і мало z, розв'язок рівняння (3.5) будемо шукати у вигляді степеневого ряду:

$$w(z) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n z^n, \text{ тобто } \varphi'^2(x) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \varphi^{2n}. \qquad (3.6)$$

Зауважимо, що рішення (3.6) можна розглядати як розкладання $w(z) = \varphi'^2(x)$ на околиці $z = \varphi^2 \approx 0$.

Підстановка ряду (3.6) у диференціальне рівняння (3.5) приводить до нескінченної системи зчеплених алгебраїчних рівнянь для коефіцієнтів a_n:

$$\begin{gathered}
2a_0a_1 + a_0 = D, \\
12a_0a_2 + a_1[\gamma + a_1] + a_0g + q = 0, \\
30a_0a_3 + a_2[\gamma + 10a_1] + a_1g + p/2 = 0, \\
56a_0a_4 + a_3[\gamma + 26a_1] + a_2[g + 8a_2] + h\backslash 3 = 0, \\
90a_0a_5 + a_4[\gamma + 50a_1] + a_3[g + 30a_2] = 0, \\
132a_0a_6 + a_5[\gamma + 82a_1] + a_4[g + 52a_2] + 21a_3^2 = 0, \cdots \\
2(1+n)(1+2n)a_0a_{n+1} + a_n[\gamma + 2(1 - 2n + 2n^2)a_1] \\
+ a_{n-1}[g + 2(11 - 7n + 2n^2)a_2] + \\
+ \sum_{m=3}^{n-2}(n - m + 1)[2(1 + 2n - 2m) - m]a_m a_{n-m+1} = 0, \text{ при } n \geq 5
\end{gathered} \qquad (3.7)$$

У системі рівнянь (3.7) коефіцієнти $a_n, n \neq 0$, можуть бути виражені через a_0. При цьому a_0 та константа інтегрування D є параметрами, які визначаються шляхом мінімізації термодинамічного потенціалу системи. Варто зауважити, що значення $a_n,\ n \geq 1$ залежать від матеріальних параметрів середовища і змінюються разом із ними (наприклад, при зміні температури).

Знаючи коефіцієнти ряду, ми можемо представити розв'язок (3.6) для самого параметра порядку $\varphi(x)$ в інтегральній формі:

$$\pm x + D_1 = \int_0^{\varphi} \frac{d\varphi}{\sqrt{a_0 + a_1\varphi^2 + a_2\varphi^4 + \ldots}}. \qquad (3.8)$$

Тут D_1 — константа інтегрування, що визначає початкову фазу (зсув) розподілу параметра порядку $\varphi(x)$. Оскільки термодинамічний потенціал (3.2) має властивість трансляційної інваріантності (тобто не залежить від вибору початку координат), значення D_1 не впливає на фізичні властивості системи, тому ми можемо прийняти $D_1 = 0$.

Таким чином, задача знаходження просторового розподілу ПП для нелінійного рівняння четвертого порядку (3.3) зведена до обчислення інтеграла (3.8) із коефіцієнтами, що знаходяться із системи (3.7).

3.2.2. Деякі можливі типи рішень ВДР

Нижче наведено класифікацію основних типів розв'язків, які допускаються рівняннями (3.7) та (3.8). При аналізі ми враховуємо фізичне обмеження на параметр порядку в областях, що становлять інтерес: $\varphi_{min} \leq \varphi \leq \varphi_{max}$.

а) Нехай $a_0 \neq 0$. Зміна параметра порядку φ від φ_{min} до φ_{max} зумовлює зміну координати x від x_1 до x_2 відповідно до інтеграла (3.8). Наступні цикли зміни φ, наприклад, від φ_{max} до φ_{min}, дозволяють отримати подальші значення x. Це свідчить про те, що при $a_0 \neq 0$ параметр порядку $\varphi(x)$ є періодичною функцією при:

б). $a_0 = 0, a_1 \neq 0$:

$$\pm x = \int_0^{\varphi} \frac{d\varphi}{\varphi\sqrt{a_1 + a_2\varphi^2 + \ldots}}. \quad (3.9)$$

В околі значень $\varphi \approx 0$, що відповідає $x \to \pm\infty$ розв'язок демонструє експоненціальне згасання:

$$\varphi(x) \approx F\{exp[-\sqrt{a_1} \cdot x]\}. \quad (3.10)$$

Зокрема, якщо a_i при $i \geq 3$, $a_2 < 0$, то розподіл параметра порядку описується функцією типу bell-солітона:

$$\varphi(x) = \frac{\sqrt{\left|\frac{a_1}{a_2}\right|}}{ch(\sqrt{a_1} \cdot x)}. \quad (3.11)$$

в). $a_0 = 0$, $a_1 = 0$, $a_2 \neq 0$. У ситуації, коли перші два коефіцієнти дорівнюють нулю, рівняння для координати стає таким:

$$\pm x = \int_0^{\varphi} \frac{d\varphi}{\varphi^2\sqrt{a_2 + a_3\varphi^2 + \ldots}}, \quad (3.12)$$

або в околиці $\varphi \approx 0 (x \to \pm\infty)$

$$\varphi(x) \approx F\{x^{-1}\}, \quad (3.13)$$

Варто зауважити, що з другого рівняння системи (3.7) для цього випадку випливає умова $q = 0$.

Ситуації, коли $a_0 = 0$, $a_1 = 0$, $a_2 = 0$ ($a_3 = 0$ та ін), а наступні коефіцієнти (3.6) не дорівнюють нулю, принципово аналогічні третьому випадку, коли параметр порядку має ступеневу асимптотику при $x \to \infty$. Ця обставина дозволяє використовувати принаймні для якісного аналізу усічений ряд (3.6). При цьому система рівнянь (3.7) має ту властивість, що якщо покласти $\forall n > n_0$ $a_n = 0$, де $n \geq 3$, то $\forall m :\ 2 < m \leq n_0$ $a_m = 0$ теж. Тому має сенс обмежити ряд (3.6) тричленом, який можна записати так:

$$\varphi'^2(x) = \bar{C} + \bar{B}\varphi^2 - \bar{A}\varphi^4, \bar{A} > 0. \quad (3.14)$$

Умова, що накладається на $\bar{A}$ необхідною для забезпечення обмеженості значень ПП.

Рівняння (3.14) є рівнянням для еліптичних функцій Якобі [83]. З огляду на вимогу обмеженості, найбільш релевантними є такі функції:

$$\varphi(x) = a_c \cdot cn(b_c x, k_c), \tag{3.15}$$

$$\varphi(x) = a_d \cdot dn(b_d x, k_d). \tag{3.16}$$

Важливо зазначити, що функції (3.15) та (3.16) можуть бути підставлені безпосередньо у вихідне варіаційне рівняння (3.3). Це дозволяє визначити параметри $a_{c,d}$, $b_{c,d}$, $k_{c,d}$ [143], проте в такому разі всі характеристики розв'язку будуть жорстко зафіксовані матеріальними константами. Водночас загальний розв'язок варіаційного рівняння (3.3) повинен містити вільні параметри — константи інтегрування, які зазвичай знаходять шляхом мінімізації термодинамічного потенціалу.

Зазначена обставина наголошує на тому, що функції (3.15), (3.16) є частинними точними рішеннями (3.3). Водночас немає жодної впевненості, що ці частинні рішення є абсолютними екстремалами термодинамічного потенціалу (3.2), що відповідають рівноважним станам системи.

З іншого боку, якщо коефіцієнти a_n знайдені шляхом розв'язання системи рівнянь (3.7) і відповідно $\bar{C} = a_0, \bar{B} = a_1, \bar{A} = -a_2$, то вираз (3.14) (тобто і (3.15), (3.16)) можна розглядати як певне наближення до загального розв'язку рівнянь (3.7), (3.8). Хоча отримана таким чином функція (3.14) не тотожно перетворюватиме на нуль варіаційне рівняння (3.3), однак можна вважати, що вона є ближчою до абсолютної екстремалі функціоналу (3.2), ніж рішення, знайдене безпосередньою підстановкою функцій Якобі (3.15) або (3.16) у рівняння (3.3).

3.2.3. Послідовність фаз з появою bell-солітонних структур

Використовуючи модель (3.14)–(3.16), (3.7), проаналізуємо принципово можливі стани системи, що виникають при фазових переходах із високосиметричної фази в низькосиметричну фазу. Вважатимемо, що у високосиметричній фазі $\varphi(x) \equiv 0$, а для низькосиметричної фази $\varphi(x) = \varphi_0$,

де φ_0 − не залежить від просторової координати . Зазначимо, що цей розгляд має якісний характер. Зауважимо також, що описані переходи можна реалізувати при $g > 0$.

I. Високосиметрична фаза, $\varphi(x) = 0$. Вихідний стан системи характеризується повною трансляційною інваріантністю (інваріантний щодо операції $x \to x + x_0$, де x_0 − довільний зсув в координатному просторі), та симетрією щодо інверсії параметра порядку $\varphi \to -\varphi$ і координати $x \to -x$. Ця ситуація ілюструється Рисунком 3.1.

Рисунок 3.1, як і всі наступні, складаються з двох графіків. На першому зображено залежність φ'^2 від φ. Частина графіка, намальована пунктиром, відповідає значенням параметра порядку, що фізично не реалізуються. На другому графіку показаний параметр порядку φ як функція координати x.

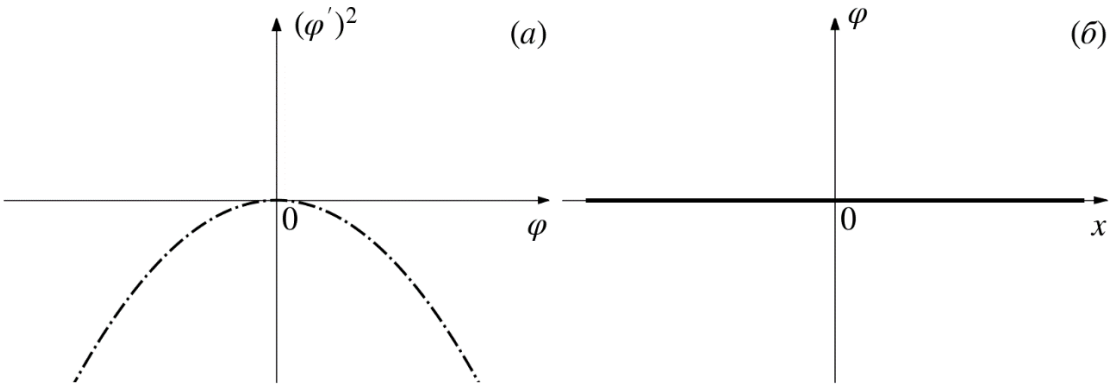


Рисунок 3.1 – Модульовані структури у системі з однокомпонентним ПП. Вихідний стан – високосиметрична немодульована фаза

II. При досягненні критичного значення $q = 1/4$ відбувається фазовий перехід у MS1. Параметр порядку $\varphi(x) \approx 0$, тому просторовий розподіл може бути знайдено лінійному наближенні рівняння (3.3). Розв'язком (3.3) моделі (3.14) є функція (3.15) при $k^2 \approx 0$(Рисунок 3.2):

$$\varphi(x) = a_c \cdot cn(b_c x, k_c) \approx a_1 \cdot \cos cx + a_2 \cdot \cos 3cx + \cdots, \qquad (3.17)$$

де параметри a_1, a_2, c − відомі функції [83] вихідних параметрів a_c, b_c, k_c. Параметр порядку φ є періодичною функцією з періодом $T = 4K(k)/b_c$, де $K(k)$ повний еліптичний інтеграл першого роду.

У фазі MS1 локальна інверсійна симетрія ($\varphi \to -\varphi$) порушена, проте глобально середнє значення ПП за період залишається нульовим $\langle \varphi(x) \rangle_T = 0$, а трансляційна симетрія редукується до дискретної $x \to x + \overline{x_0}$, де $\overline{x_0}$ – величина пропорційна періоду параметра порядку.

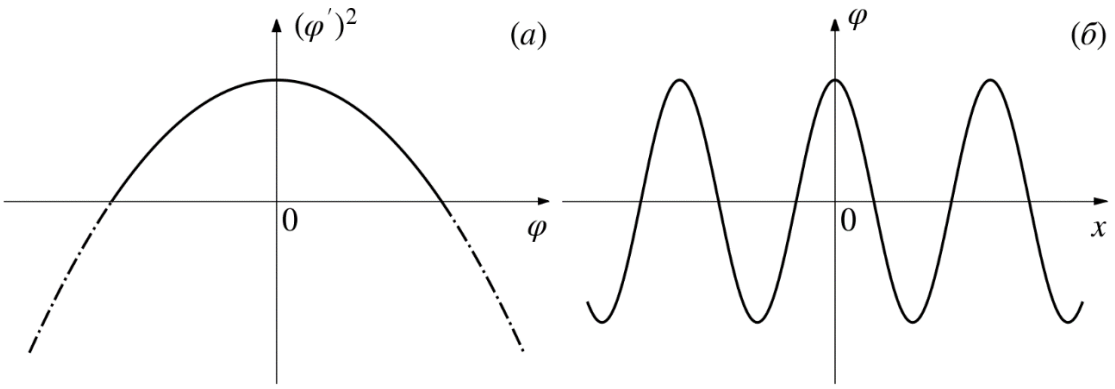


Рисунок 3.3 – Модульовані структури у системі з однокомпонентним ПП. Фаза MS1

Зі зміною зовнішніх параметрів, змінюється знак параметра $\bar{B}$ (3.14), параметр k_c^2 зростає і прямує до 1, і, як наслідок, призводить до формування нових характерних особливостей у функціональній залежності φ'^2 від φ (див. Рисунок 3.3).

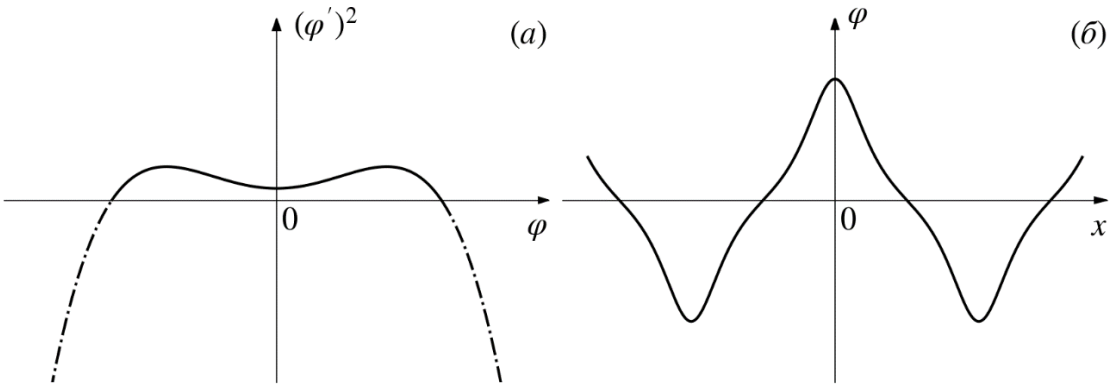


Рисунок 3.3 – Подальший розвиток фази MS1

III. Точка фазового переходу із фази MS1 у фазу MS3. Як видно з Рисунка 3.4, значення $\varphi'^2(x)$ повторно обертається в нуль при $\varphi = 0$. У цій ситуації у формулі (3.14) виконується умова $\bar{C} = 0$ за ненульового $\bar{B} \neq 0$.

Внаслідок цього співвідношення (3.15) та (3.16) описують розв’язок типу bell-солітону:

$$\varphi(x) = a_c \cdot \mathrm{cn}(b_c x, 1) = \frac{\hat{a}}{ch(\mathrm{wx})} = a_d \cdot dn(b_d x, 1), \qquad (3.18)$$

а період параметра порядку $T = \infty$.

В околиці даної точки, тобто при $\bar{C} \approx 0$, термодинамічний потенціал (3.2) може бути представлений у вигляді:

$$\Phi = \Phi_1 + C\Phi_2 + C^2\Phi_3 + C^2 \cdot \ln(|C|) \cdot \Phi_4, \qquad (3.19)$$

де Φ_i $i = 1,2,3,4$ − комбінації $\bar{A}$, $\bar{B}$.

Трансляційна симетрія $\varphi(x)$ тут повністю порушена, $\langle\varphi(x)\rangle_T \neq 0$.

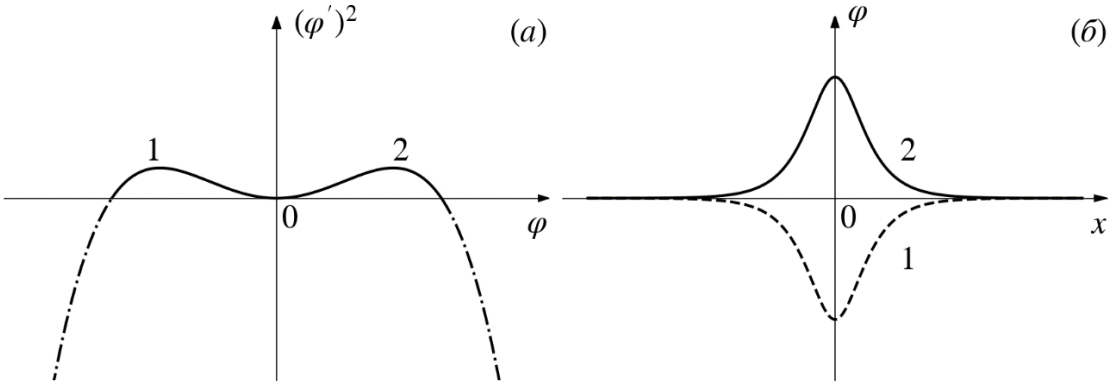


Рисунок 3.4 – Точка переходу фази MS1 фазу MS3

IV. Поява нової фази MS2 (Рисунок 3.5) характеризується зміною просторової симетрії параметра порядку. У цій фазі розподіл $\varphi(x)$ описується вже дельта-амплітудою (3.16):

$$\varphi(x) = a_d \cdot dn(b_d x, k_d),\ 0 < k_d^2 < 1. \qquad (3.20)$$

Особливістю даного стану є те, що середнє по періоду $T = 2K(k)/b_d$ значення параметра порядку відмінне від нуля $\langle\varphi(x)\rangle_T \neq 0$. Розв'язки є інваріантними щодо просторового зсуву $x \to x + \overline{x_0}$. У системах, де структури зі знаками $(-\varphi)$ (на Рисунках 3.4–3.6 позначено цифрою 1) та $(+\varphi)$ (цифра 2) фізично нееквівалентні, реалізуються обидва стани, які можуть співіснувати у вигляді просторово відокремлених доменних областей.

V. Низькосиметрична фаза. Система переходить у стан, ілюстрований на Рисунку 3.6. У цьому стані повністю відновлюється трансляційна

інваріантність розв'язків щодо довільного зсуву $x \to x + x_0$. Параметр порядку стає просторово однорідним: $\varphi(x) = \pm\varphi_0$. При цьому значення φ_0 більше не залежить від координати x, а його рівність нулю (або відмінність від нього) визначається конкретною термодинамічною фазою системи.

Зазначимо низку положень, що випливають із проведеного аналізу. а) У випадках $\varphi \approx 0$ та $\varphi \approx \varphi_0$ параметр порядку має косинусоподібний характер. Зокрема, при $\varphi \approx 0$

$$\varphi(x) = a_c \cdot cn(b_c x, k_c) \approx a_1 \cdot \cos cx + a_2 \cdot \cos 3cx + \cdots, \qquad (3.21)$$

тоді як поблизу $\varphi \approx \varphi_0$

$$\varphi(x) = a_d \cdot cn(b_d x, k_d) \approx \hat{a}_1 \cdot (1 + \hat{a}_2 \cdot \cos 2\hat{c}x + \cdots). \qquad (3.22)$$

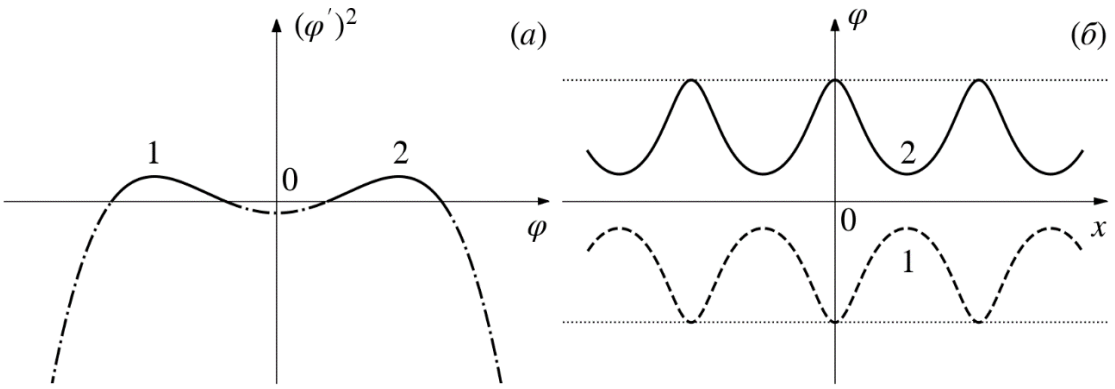


Рисунок 3.5 – Фаза MS2

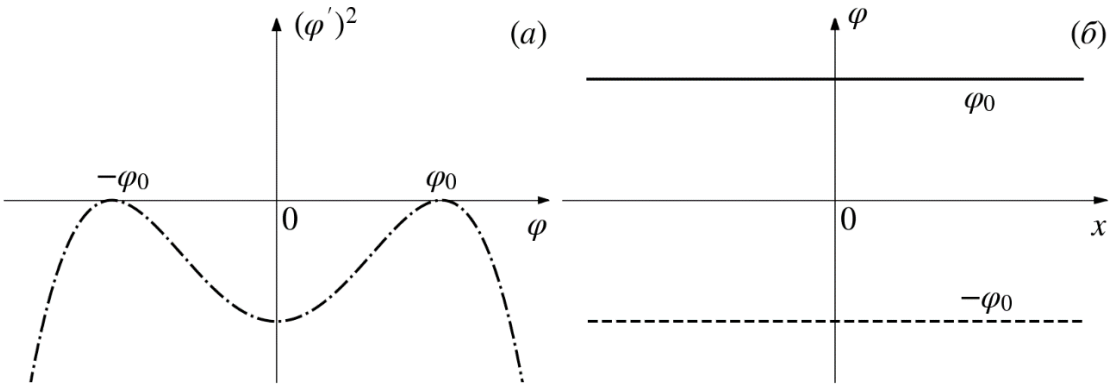


Рисунок 3.6 – Кінцевий стан – немодульована фаза $\varphi = \pm\varphi_0$

У роботі [60] цей ефект було підтверджено шляхом чисельного розв'язання рівняння, аналогічного (3.3). Встановлено, що у вузькому інтервалі, де $k_{c,d}^2 \approx 1$, просторовий розподіл параметра порядку зазнає суттєвої деформації, втрачаючи гармонічний характер. При цьому другі

похідні термодинамічного потенціалу (3.2) можуть набувати сингулярностей типу $ln|C| \to \infty$.

б). Ключовим елементом симетрії, що порушується під час зазначених фазових переходів, є інваріантність відносно операції відображення $\varphi \to -\varphi$. Процес спонтанного порушення парності відбувається поетапно: спочатку локально (у фазі MS1), а згодом — глобально (у фазі MS2 та низькосиметричній впорядкованій фазі). Таким чином, параметрична еволюція системи визначається не лише мінімізацією енергії, а й симетрійним чинником — системі термодинамічно «вигідніше» втрачати симетрію поступово, через низку проміжних станів.

в). Наведені міркування дають підстави для гіпотези, що модульовані структури є фундаментальним елементом фізики фазових переходів другого роду. Це справедливо навіть для тих випадків, коли несумірні фази не зафіксовані експериментально та/або перебувають у метастабільному стані.

3.2.4. Умови стійкості розглянутих фаз

Розглянемо тепер умови, за яких описані вище просторово-неоднорідні стани залишаються стабільними. Аналіз проводиться в межах моделі (3.14), де поведінка системи розглядається як функція температури.

Основним критерієм фізичної реалізованості стану є умова, за якої квадрат похідної параметра порядку за координатою не може бути від’ємним: $\varphi'^2(x) < 0$. Якщо для обраних параметрів $\bar{A},\bar{B},\bar{C}$ вираз (3.14) набуває від’ємних значень, це вказує на неможливість існування модульованої структури. У таких випадках система переходить до тривіальних однорідних розв'язків ($\varphi'^2(x) = 0$), що відповідають або високосиметричній фазі ($\varphi(x) = 0$), або низькосиметричній фазі ($\varphi(x) = \pm\varphi_0$).

Коли система перебуває у високосиметричному стані ($\varphi = 0$), поява модульованої структури (МС) стає енергетично вигідною лише при $q < 1/4$. При $q < 1/4$: вираз (3.14) набуває від'ємних значень для всіх φ, що робить

існування МС неможливим. Геометрично це відповідає ситуації, коли функція $(\varphi')^2$ має максимум при $\varphi = 0$, але знаходиться в області від'ємних значень. Це реалізується при $\bar{B} < 0$ та $\bar{C} < 0$ (при сталій умові $\bar{A} > 0$).

Точка переходу ($q = 1/4$): ця точка є межею між фазами, де вираз (3.14) має дійсний корінь. У цій точці параметри мають значення $\bar{C} = 0$ та $\bar{B} < 0$.

На етапі, що відповідає Рисунку 3.2, поліном (3.14) має два дійсні корені та один локальний максимум, що при $q < 1/4$ зумовлює виконання умов $\bar{B} < 0,\ \bar{C} > 0$. У точці максимального розвитку цього етапу параметри набувають значень $\bar{B} = 0,\ \bar{C} > 0$. При переході до значень $\bar{B} > 0,\ \bar{C} > 0$ реалізується стан, зображений на Рисунку 3.3.

Існування фази MS1 завершується за умов $\bar{B} > 0,\ \bar{C} = 0$ (Рисунок 3.4). Подальша еволюція системи до фази MS2 характеризується співвідношеннями $\bar{B} > 0, \bar{C} < 0$.

Точка фазового переходу з MS2-фази до низькосиметричної впорядкованої фази визначається умовою $\bar{C} < 0,\ \bar{B} > 0,\ \bar{B}^2 + 4\bar{A}\bar{C} = 0$. У випадку, коли $\bar{B}^2 + 4\bar{A}\bar{C} < 0$ (при $\bar{C} < 0,\ \bar{B} > 0$), модульовані структури зникають, і система переходить у гомогенний низькосиметричний стан із параметром порядку $\varphi(x) = \varphi_0$.

3.3. Сценарій фазових переходів, що припускає появу kink-солітонної фази

Окрім описаної раніше послідовності переходів, модель (3.2) передбачає ще один сценарій — виникнення станів типу kink -солітонних ґраток. Цей варіант еволюції системи є критично важливим для аналізу просторово-неоднорідних фаз у сегнетоелектриках [70], модульованих магнітних структур та інших систем, де спостерігається ефект замикання хвильового вектора [17].

У даному контексті член шостого ступеня ($\sim\varphi^6$) не відіграє вирішальної ролі, тому для подальшого аналізу приймемо $h = 0$ і $p > 0$.

У цьому розділі член $\sim\varphi^6$ не є принциповим, тому нижче будемо вважати $h = 0$ і $p > 0$.

При від'ємних значеннях параметра взаємодії ($g < 0$) параметрична еволюція системи (3.2) призводить до появи специфічних станів. Їх можна описати як сукупність доменів (областей сумірності), розділених відносно вузькими перехідними межами (солітонами). Хоча для систем із двокомпонентним параметром порядку (ПП) та інваріантами Ліфшиця такі розв'язки добре вивчені, для однокомпонентного ПП у межах феноменології вони залишаються малодослідженими.

Частина густини термодинамічного потенціалу, що залежить від φ'^2, при $g < 0$ має вигляд:

$$\Phi_1 = (|g|\varphi^2 - \gamma)\varphi'^2. \tag{3.23}$$

При малих значеннях φ^2 з формули (3.23) випливає, що $\Phi_1 \approx -\gamma\varphi'^2$, і за $q < \gamma^2/4$ енергетично вигідним є існування модульованих структур параметра порядку [49]. Але за досить великих φ^2 (що більше , тим за вищої температури настає така можливість) функція Φ_1 стає додатною, і синусоїдальні модуляції втрачають стійкість. При цьому термодинамічний потенціал можна приблизно представити у вигляді:

$$\Phi = \Phi_0 + \int_0^L dx \left\{\delta(\varphi')^2 + q\varphi^2 + \frac{p}{2}\varphi^4\right\}, \delta > 0. \tag{3.24}$$

Одним із розв'язків відповідного (3.24) варіаційного рівняння є kink-солітон виду:

$$\varphi(x) = a \cdot th[b(x - x_0)]. \tag{3.25}$$

Розв'язок типу (3.25) є просторовий розподіл параметра порядку в упорядкованій фазі без флуктуацій [144] і описує доменну стінку між різними областями пропорційної фази $\varphi_1 = \pm\sqrt{-q/p}$. Замінюючи в (3.23) φ^2 значенням φ_1^2, отримуємо наступну оцінку температурної області існування кінкових рішень:

$$|g|\frac{|q|}{p} > \gamma \text{ тобто } |q| > \frac{\gamma p}{|g|}. \qquad (3.26)$$

Зазначимо, що модель без урахування g-члена не допускає існування стабільних кінк-солітонів. Дійсно, нехай $\varphi(x) \xrightarrow[x\to\pm\infty]{} a + \lambda e^{\mp bx}$, де a, b, $\lambda \neq 0$. Підставляючи це рівняння (3.3) при $g = 0$ і залишаючи, як й у асимптотиці $\varphi(x)$, лише члени до $e^{\mp bx}$ порядку малості, отримаємо:

$$a^2 = -q/p, \qquad b^4 + \gamma b^2 - 2q = 0. \qquad (3.27)$$

При $g = 0$ для стійкості модуляцій необхідна виконання умова $\gamma > 0$. Тоді простий аналіз (3.27) показує, що не існує дійсних значень температури q, при яких рівняння давали б речові одночасно ненульові значення для a^2 і b^2.

Навпаки, при $g \neq 0$ (зокрема $g < 0$ та $q < 0$) кінк-солітонний розв'язок стає можливим. Умова його існування має вигляд:

$$a^2 = -q/p, b^2 = \frac{1}{2}\left[-(\gamma - gp^{-1}q) + \sqrt{(\gamma - gp^{-1}q)^2 + 8q}\right] \qquad (3.28)$$

Отримані співвідношення узгоджуються з оцінкою (3.26). Зауважимо, що врахування додатності дискримінанта у виразі для b^2 у (3.28) дає змогу уточнити умову (3.26), проте при аналізі ролі g-члена ця обставина не є суттєвою.

Конкуренція між доданком $-\gamma\varphi'^2$, що сприяє формуванню модульованої структури, та g-членом, який стабілізує сумірну фазу, створює умови для трансформації гармонічних (синусоїдальних) модуляцій параметра порядку в решітку солітонів. Граничним випадком такого параметричного розвитку системи є стан із відокремленими доменами. Для реалізації цього сценарію в межах моделі (3.2) необхідно виконання умов $\gamma > 0$ та $g < 0$.

Слід також зазначити, що у даному випадку роль g-члена (при $g < 0$) аналогічна ролі анізотропного інваріанта, який описує процеси перекидання (umklapp-процеси) в теорії двокомпонентного параметра порядку для систем з інваріантами Ліфшиця [95]. Розв'язки, що виникають при врахуванні g-члена та анізотропного інваріанта відповідно, також виявляють суттєву подібність.

3.3.1. Аналіз фазової діаграми $(\varphi'^2 - \varphi)$

Спираючись на уявлення (3.6), обговоримо можливий сценарій фазових переходів із виникненням кінксолітонних розподілів параметра порядку.

Як було зазначено раніше, ліву частину виразу (3.6) можна розглядати як розклад функції $w(z)$ у ряд Тейлора навколо точки $z = 0$. Це співвідношення встановлює функціональну залежність між φ'^2 та φ (права частина (3.6)), що дозволяє провести попередній аналіз картини фазових переходів, що допускаються моделлю, а також з'ясувати можливість існування розв'язків солітонного типу.

Дійсно, формально криву залежності φ'^2 від φ можна розглядати у всій площині $(\varphi'^2 - \varphi)$, а не тільки при $\varphi'^2 > 0$. У цьому точки фазової діаграми $(\varphi'^2 - \varphi)$, у яких локальні екстремуми функції $\varphi'^2(\varphi)$ перетворюються на нуль, відповідають точкам фазових переходів.

На фазовій площині $(\varphi'^2 - \varphi)$ модульованим структурам параметра порядку відповідають замкнені області, обмежені віссю абсцис та дугою функції $\varphi'^2(\varphi)$, для яких виконується умова $\varphi'^2 > 0$. Проходження екстремуму функції $\varphi'^2(\varphi)$ через нуль (тобто його дотик або перетин з віссю абсцис) призводить або до виникнення нових ізольованих областей, або до зникнення існуючих (дисипації фаз із модульованою структурою). Стан, за якого екстремум набуває нульового значення, є граничним між діаграмами з різною кількістю модульованих станів і відповідає точці фазового переходу.

Екстремуми $\varphi'^2(\varphi)$ можуть набувати нульового значення і в іншому випадку — коли після проходження через нуль крива займає таке положення відносно осі $O\varphi$, за якого замкнені області, що відповідають модульованим структурам, зникають. Така конфігурація відповідає переходу системи у просторово-однорідний стан, а точки відриву графіка $\varphi'^2(\varphi)$ від осі абсцис визначають точки фазового переходу в цей стан.

Математично умова торкання екстремуму $\varphi'^2(\varphi)$ осі абсцис (перетворення на нуль) описується системою рівнянь:

$$\begin{cases} \varphi'^2 = 0 \\ \dfrac{\partial \varphi'^2}{\partial \varphi} = \dfrac{\partial \varphi'^2}{\partial x}\dfrac{1}{\varphi'} = 2\varphi'' = 0 \end{cases} \tag{3.29}$$

У точках φ_0, де виконується умови (3.29), градієнтна частина ТП (3.2) перетворюється на нуль, що призводить до радикальної зміни характеру просторового розподілу ПП від координати x: період структури прямує до нескінченності.

Дійсно, якщо умова $\varphi'(\varphi_0) = 0$ визначає величину φ_0 максимального (мінімального) значення періодичної обмеженої функції $\varphi(x)$. Коли ж виконується також $\varphi''(\varphi_0) = 0$, то у точці φ_0 виникає перегин функції $\varphi(x)$. Для періодичної кінцевої функції це еквівалентно звернення періоду в нескінченність, тобто догляд точки максимуму (мінімуму) по осі OX в $x_0 = \pm\infty$.

На основі аналізу умов (3.29) можна виділити кілька фундаментальних сценаріїв розподілу параметра порядку:

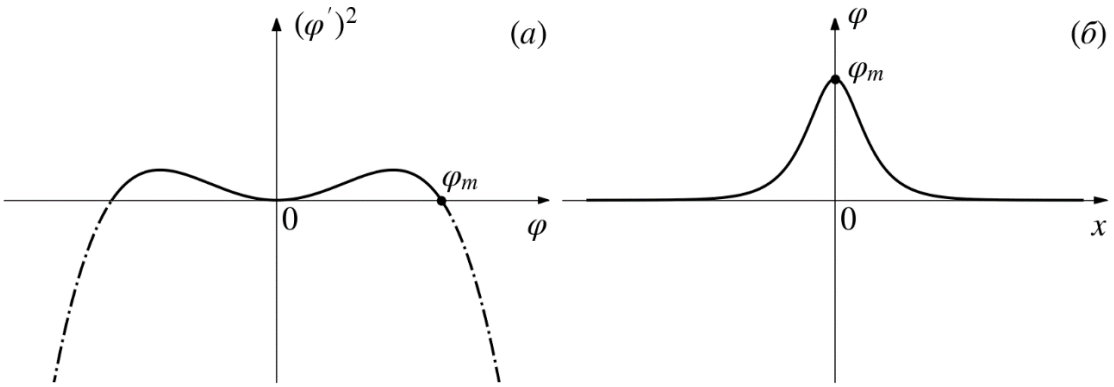


Рисунок 3.7 – Bell-солітонний розподіл параметра порядку $\varphi(x)$

1. Умови (3.29) виконуються лише в одній точці (Рисунок 3.7). Параметр порядку досягає свого максимуму в точці φ_m при скінченному x_m, а при $x = \pm\infty$ φ прямує до нуля. Такий розподіл відповідає розподіл параметру порядку $\varphi(x)$ типу bell-солітон.

3. Системі рівнянь (3.29) задовольняють одночасно дві точки (Рисунок 3.8). Це відповідає переходу між двома еквівалентними сумірними станами через доменну стінку (kink-солітон).

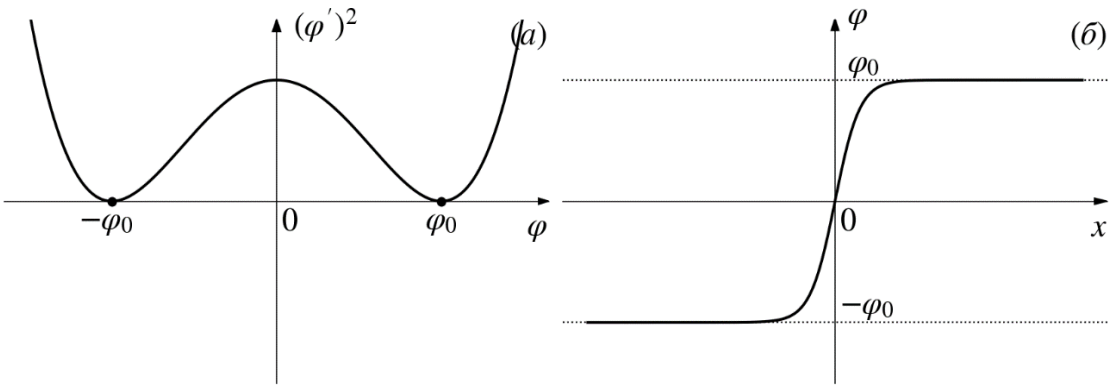


Рисунок 3.8 – Розподіл виду kink-солітон

3. Амплітуда модуляції прямує до нуля. На Рисунку 3.9 продемонстровано ситуацію безпосередньо після проходження екстремумом нульової позначки, коли розподіл ПП починає відхилятися від константи.

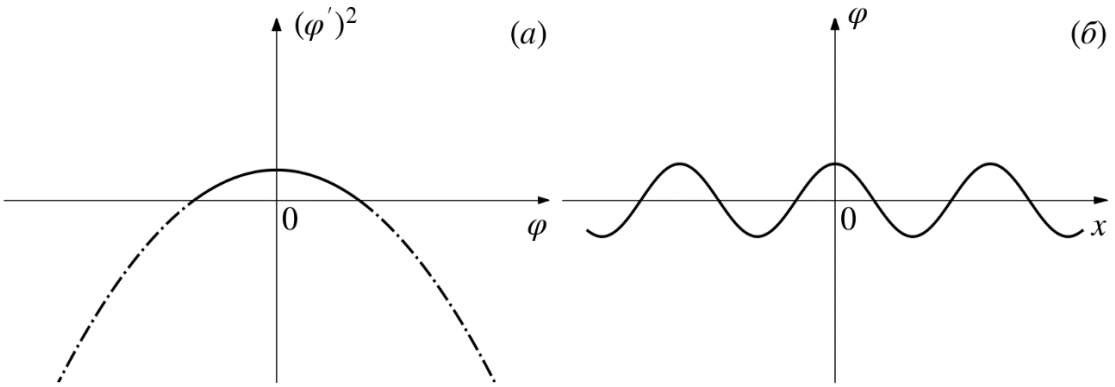


Рисунок 3.9 – Близький до виродженого випадок

4. Складні траєкторії на фазовій площині, що поєднують ознаки кількох типів модуляцій (Рисунок 3.10). Вони виникають при врахуванні вищих інваріантів у термодинамічному потенціалі, що призводить до складнішої топології фазового портрета.

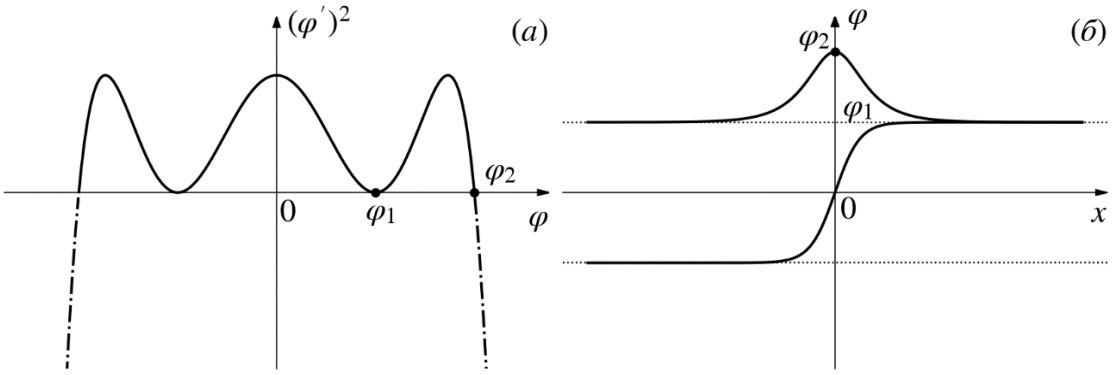


Рисунок 3.10 – Гібридні ситуації

На основі загального розкладу (3.6) розглянемо найпростіші моделі, що описують різні фізичні стани системи:

1. $\varphi'^2 = a_0$. Для отримання фізично обмежених розв'язків необхідно покласти $a_0 = 0$, що означає $\varphi(x) = const$. У такій моделі модульовані структури відсутні, а система завжди перебуває у просторово-однорідному стані.

2. $\varphi'^2 = a_0 + a_1\varphi^2$, стійкі періодичні розв'язки існують лише при $a_1 < 0$. При $a_1 < 0$ диференційне рівняння описує тригонометричні функції, що відповідає замкненим фазовим траєкторіям на діаграмі $(\varphi'^2 - \varphi)$, відповідних модульованої структурі. Оскільки друга похідна $\varphi'' = a_1\varphi = 0$ лише за $\varphi_0 = 0$, модель має лише одну особливу точку (3.29). Відповідно, ця модель здатна описати один фазовий перехід – перехід між невпорядкованою та модульованою фазами. Такі рішення за своєю суттю відповідають розподілам ПП, що використовуються в моделі Міхельсона [97]:

$$\varphi(x) = a_0 \cdot cos[b(x - x_0)] + a_1 \cdot cos[3b(x - x_0)] + \cdots, \qquad (3.30)$$

де внесок вищих гармонік є малим $a_{n+1} \ll a_n$.

Зазначимо, що при зміні параметрів амплітуда $\varphi'^2(\varphi)$ модуляції змінюється лише кількісно, але не якісно (Рисунок 3.9), що робить модульовану структуру стійкою (хоч і метастабільною) аж до температури $T = 0$.

Зауважимо також, що при зміні параметрів a_0 та a_1 вид залежності $\varphi'^2(\varphi)$ змінюється лише кількісно (більше або менше амплітуда модуляцій

параметра порядку). Це, зокрема, відбитком відомого факту, що модульована структура у такій моделі стійка (хоч і метастабільна) до температури $T = 0$.

3. Модель

$$\varphi'^2 = a_0 + a_1\varphi^2 + a_2\varphi^4. \qquad (3.31)$$

Як зазначалося вище, вираз виду (3.31) є диференціальне рівняння для еліптичних функцій Якобі [83]. Крім розглянутих у попередньому розділі функцій $cn(x)$ і $dn(x)$, обмеженим на речовинної осі є також еліптичний синус Якобі $sn(x)$.

Вперше на той факт, що одне з точних рішень рівняння (3.3) пропорційно до функції $sn(x)$, було зазначено в [54], а дещо раніше ця обставина була використана без акцентування на цьому уваги тими ж авторами та ще однією групою (див. посилання в [54]).

Еліптичні функції є точними окремими рішеннями рівняння (3.3). Можна показати, замінюючи градієнтні члени в (3.3) їх ступеневим уявленням (3.31), що тільки ця модель (серед наближень $\varphi'^2 = \sum_{n=0}^{m} a_n\varphi^{2n}$) призводить до точним рішенням рівняння (3.3). При цьому коефіцієнти a_0, a_1, a_2 виражаються через параметри термодинамічного потенціалу (3.2). Зазначимо, що це висновок вірний навіть при врахуванні в ТП (3.2) складового, пропорційного φ^6 ($h \neq 0$).

Модель (3.31) є мінімальною (за кількістю членів у усіченому варіанті розкладання (3.6)) наближенням для опису послідовності фазових переходів невпорядкована → модульована → впорядкована фази.

Справді, у разі (3.31) друге рівняння системи (3.29) має дві групи рішень: $\varphi'' = \varphi(a_1 + 2a_2\varphi^2) = 0$, яке відповідає переходу в невпорядковану фазу, і $\varphi_1^2 = -a_1/2a_2$ – перехід у впорядковану фазу стану з модульованою структурою параметра порядку. При цьому моделі (3.31) можуть реалізовуватися стану як з однією точкою типу (3.29) (при $a_2 < 0$), так і з двома точками (3.29) (при $a_2 > 0$), тобто можуть існувати рішення і типу bell-солітону [80, 140, 144], і типу кінку (Рисунки 3.7 і 3.8).

4. $\varphi'^2 = \sum_{n=0}^{3} a_n \varphi^{2n}$. У цьому випадку розподіл параметра порядку від координати описується гіпереліптичними функціями [83, 145, 146]. При цьому $\varphi'' = \varphi(a_1 + 2a_2\varphi^2 + 3a_3\varphi^4) = 0$ виконується при $\varphi = 0$ та при

$$\varphi_1^2 = \frac{1}{3a_3}\left[-a_2 \pm \sqrt{a_2^2 - 3a_1a_3}\right]. \qquad (3.32)$$

При $a_3 < 0$, $a_2 > 0$ і $a_1 < 0$ то розв'язок (3.32) має чотири дійсні корені, тобто це дозволяє описувати складні гібридні сценарії та фазові діаграми (Рисунок 3.10) з трьома і більше областями модульованих станів, що було підтверджено чисельними розрахунками при розглянутій моделі ($m = 3$) за $p < 0$ в роботі [146].

Зазначимо, що врахування (3.6) ступенів φ^{2n}, $n \geq 3$, фактично означає, що величина параметра порядку стає досить великою, або має деяке спеціальне співвідношення коефіцієнтів a_n. У теорії Ландау фазових переходів така ситуація потребує додаткового обґрунтування та детального вивчення. З цієї причини спочатку докладніше зупинимося на моделі (3.31) - простіший, ніж $\varphi'^2 = \sum_{n=0}^{m} a_n \varphi^{2n}$ з $m \geq 3$, але при цьому помітно більш змістовною в плані одержуваних фізичних результатів, ніж модель (3.30), яка враховує лише кілька перших гармонік розподілу параметра порядку.

3.4. Роль інваріанту $g \cdot (\varphi'\varphi)^2$

Вираз (3.2) відрізняється від виразів, які використовувалися у ранніх роботах з теорії модульованих структур однокомпонентного параметра порядку [42]:

$$\Phi = \frac{\Phi_0}{L} \cdot \int_0^L dx \left\{(\varphi'')^2 - \gamma(\varphi')^2 + q\varphi^2 + \frac{p}{2}\varphi^4\right\}. \qquad (3.33)$$

У такій постановці задачі використання одногармонічного наближення (3.30) дає задовільні результати лише поблизу точки переходу.

Врахування членів φ^4 (як і φ^6) у моделі (3.33) слабко впливає на просторову форму розв'язку. Щоб отримати суттєво нелінійні залежності ПП

від просторової координати в ряді (3.30) (наприклад, солітонні ґратки), необхідно враховувати величезну кількість гармонік у ряді Фур'є. Таким чином, оперування нескінченною кількістю параметрів у ряді (3.30) ускладнює як аналітичний розгляд, так і чисельне моделювання.

Ця обставина породила деякі сумніви [26] щодо здатності моделі (3.33) в принципі описувати послідовність фазових переходів нормальна → модульована → сумірна фази, які спостерігається експериментально, наприклад, у ряді сегнетоелектриків та магнетиків [19].

3.4.1. Аналогії з теорією невідповідних фаз у системах у двокомпонентному ПП

Разом з тим, аналогічна послідовність фазових переходів успішно описується в теорії систем, що характеризуються двокомпонентним параметром порядку та симетрія яких допускає існування інваріантів Ліфшиця [141].

Як відомо, в теорії [141] стану типу солітонних грат є наслідком конкуренції та компромісу інваріанта Ліфшиця [17] та інваріантів Дзялошинського $w_a\rho^m(1+\cos m\phi)$.

Інваріант Ліфшиця у разі параметра порядку з двома компонентами $\eta(x)$ і $\xi(x)$, що залежать від однієї просторової координати x, має вигляд $\eta\frac{\partial\xi}{\partial x}-\xi\frac{\partial\eta}{\partial x}$ і прагне перевести систему в несумірний стан. Зі свого боку, інваріанти Дзялошинського характеризують анізотропію високого порядку та описують енергію сумірності [143]. З фізичної точки зору це означає, що врахування інваріантів Дзялошинського відкриває канал перерозподілу енергії через процеси перекидання (umklapp-процеси), стабілізуючи однорідні стани [92].

У моделі (3.33) доданки, аналогічні інваріантам Дзялошинського, відсутні, хоча сама формулювання моделі, а саме виділення деякого напрямку OX і аналогічність властивостей системи в площинах, перпендикулярних цьому напрямку (можна вважати, що у формулі (3) виконано інтегрування по

координатах y, z, від яких параметр порядку $\varphi(x)$ не залежить). Але в моделі (3.33) відсутній механізм, що дозволяє виникаючому в результаті фазового переходу другого роду просторово неоднорідного стану трансформуватися в фазу, в якій є домени з $\langle\varphi(x)\rangle_T \neq 0$ ($\langle\varphi(x)\rangle_T$ – середнє по періоду значення параметру порядку), розділене порівняно вузькими доменними стінками. Дійсно, в одногармонійному наближенні моделі (3.33) в сумірній фазі роль ділянок, де параметр порядку швидко змінюється (φ' максимально), і ділянок, де максимальний модуль $\varphi(x)$ і $\varphi' \approx 0$ (тобто області, які можуть розглядатися як можливі "кандидати" на роль доменів), однакова $\varphi'(x)$, рівні:

$$\int_0^T \varphi^2 dx \approx \int_0^T \cos^2(bx)\,\varphi^2 dx = \int_0^T sin^2(bx)\,dx \approx \int_0^T (\nabla\varphi)^2 dx. \qquad (3.34)$$

При цьому членів, які могли б призвести до перерозподілу енергії та формування просторово неоднорідних структур із новими властивостями, немає.

Разом з тим, необхідний механізм може бути забезпечений з введенням інваріантів типу $g(\varphi\varphi')^2$. Формально цей доданок можна зіставити з інваріантом Дзялошинського четвертого порядку ($m = 4$): якщо представити ПП у полярних координатах $\varphi(x) = \rho\cos\phi$, то тоді отримуємо співвідношення $g(\varphi\varphi')^2 = g\rho^4\cos^2\phi\sin^2\phi = g\rho^4(1-\cos 4\phi)/8$. Отже, врахування доданку $g(\varphi\varphi')^2$ дозволяє покращити модель (3.33). Справді, як було зазначено раніше, збільшення вкладу g-члену в термодинамічний потенціал (зростання $|g|$) зменшує температурний інтервал існування модульованої фази і стабілізує пропорційний стан. Проте, наведена аналогія лише часткова, оскільки на відміну від інваріантів Дзялошинського внесок g-члену відсутній у сумірній фазі.

Можна спробувати провести паралель g-члену також з інваріантом Ліфшиця. Так, такі типові представники систем з невідповідними структурами однокомпонентного ПП, як нітрит натрію $NaNO_2$ і тіокарбамід $SC(NH_2)_2$ допускають можливість взаємодії параметра порядку (спонтанної поляризації

P_y) з іншими ступенями свободи (наприклад, деформацією u), і саме g-член може ефективно відображати взаємодію подібного роду [147].

Однак у задачі з однокомпонентним ПП і залежністю параметра порядку тільки від однієї просторової координати, інваріант Ліфшиця у своєму вихідному формулюванні зводиться до повного диференціала і далі до адитивної поверхневої поправки до термодинамічного потенціалу, не істотної при мінімізації останнього за параметром порядку $\varphi(x)$.

Таким чином, g-член у моделі (3.2) є унікальним інструментом, незважаючи на деяку формальну схожість з інваріантами Дзялошинського і Ліфшиця, його властивості не є простим проектуванням теорії двокомпонентного ПП. Він виступає специфічним нелінійним регулятором, що забезпечує фазову еволюцію від синусоїдальних модуляцій до солітонних ґраток в одновимірних системах.

Дія механізму, що описується g-членом, у випадках конкретних рішень обговорювалося в [26]. Розглянемо деякі зв'язки рівняння (3.33) із більш простими нелінійними рівняннями.

Для аналізу властивостей системи використаємо наступну побудову. Рівняння для еліптичних функцій Якобі:

$$\varphi'^2(x) = C + B\varphi^2 - A\varphi^4 \tag{3.35}$$

є першим інтегралом для ВДР для функціонала Гінзбурга-Ландау (у цьому випадку C – константа інтегрування):

$$\Phi = \frac{\Phi_0}{L} \cdot \int d^d r\{(\nabla\varphi)^2 + A\varphi^2 + B\varphi^4\}. \tag{3.36}$$

Рівняння (3.35), його перша та третя похідні за просторовою координатою можуть бути скомбіновані в наступну систему рівнянь:

$$\begin{cases} \varphi^{(IV)} + 6A\left(\varphi^2\varphi'' + \varphi\varphi'^2\right) - B\varphi'' + 6AC\varphi + 6AB\varphi^3 + 6A^2\varphi^5 = 0 \\ \left[\varphi^2\varphi'' + \varphi\varphi'^2\right] - C\varphi - 2B\varphi^3 + 3A\varphi^5 = 0 \\ \varphi'' - B\varphi + 2A\varphi^3 = 0 \end{cases} . \tag{3.37}$$

Система рівнянь (3.37), що включає рівняння (3.35) та його похідні вищих порядків, дозволяє шляхом лінійної комбінації з довільними константами α та β отримати узагальнене рівняння четвертого порядку:

$$\varphi^{(IV)} + (\alpha + 6A)\left[\varphi^2\varphi'' + \varphi\varphi'^2\right] + (\beta - B)\varphi'' + (6AC - \beta B - \alpha C)\varphi + (6AB + 2\beta A - 2\alpha B)\varphi^3 + (6A^2 + 3\alpha A)\varphi^5 = 0. \quad (3.38)$$

Порівняння останнього з вихідним рівнянням стану (3.3) та (3.38) дає систему співвідношень для модельних параметрів:

$$\begin{cases} \alpha = g + 6A, \quad \beta = \gamma + B \\ 24A^2 - 3gA + h = 0 \\ 2B(-10A + g) - 2\gamma A + p = 0 \\ C(-12A + g) + B^2 + \gamma B + q = 0 \end{cases}. \quad (3.39)$$

Варто зауважити, що друга похідна рівняння (3.35) еквівалентна модифікованому рівнянню Кортевега-де-Вріза (mKdV) для стаціонарних розв'язків [83]:

$$\varphi''' + 6A\varphi^2\varphi' + B\varphi' = 0. \quad (3.40)$$

Використовуючи рівняння (3.40) і дотримуючись схеми, подібної до викладеної вище, можна також отримати рівняння (3.38) [143].

Як видно, у рівнянні (3.38) g-член генерується єдиним нелінійним складником у рівнянні (3.35) (або (3.40)), який у свою чергу описує процеси взаємодії в системі та забезпечує існування характерних періодичних та солітонних рішень.

Поданий розгляд має характер корисної аналогії, що допомагає шукати частинні розв’язки рівняння (3.3) та вивчати властивості g-члена. Разом про те, слід пам'ятати, що виникнення розв’язків типу модульованих структур, можливо пов'язані з наявністю у системі далекодійних взаємодій [148]. Виключаючи доданки, що описують внесок дальнодіючих полів (наприклад, як [149]), отримуємо нелокальні члени, що залежать тільки від параметра порядку. У нехтуванні конкретними механізмами реалізації далекодії в системі, відповідні нелінійні доданки мають вигляд [149]:

$$\iint d^d r d^d r' \varphi^2(\vec{r}) Q(\vec{r}-\vec{r}') \varphi^2(\vec{r}'). \qquad (3.41)$$

Як видно, у припущенні небагато градієнтів ПП і найпростішого виду $Q(\vec{r}-\vec{r}')=1$, інваріанти типу g-члена становлять основний нелокальний внесок (3.41).

Таким чином, у моделі (3.2) інваріант $g(\varphi\varphi')^2$ описує складний нелінійний і нелокальний характер взаємодій в системах з однокомпонентним параметром порядку, пов'язаний з особливостями міжатомних взаємодій в таких системах [150]. При цьому сукупність доданків $\gamma(\varphi')^2$ і $g(\varphi\varphi')^2 \equiv g(\varphi)^2(\varphi')^2$ у термодинамічному потенціалі (3.2) можна розглядати як перші два члени розкладання $\Gamma(\varphi)\cdot(\varphi')^2$ $\Gamma(\varphi)=\sum_{n=0}\gamma_n\varphi^{2n}\approx\gamma_0+\gamma_1\varphi^2+\cdots\equiv\gamma+g\varphi^2+\cdots$. Іншими словами, взаємодія $\sim(\varphi')^2$, відповідальна за виникнення в системі (3.2) стійких несумірних розподілів параметру порядку, має складну структуру, без урахування якої в системах з однокомпонентним ПП неможливо описати послідовність фазових переходів нормальна→модульована→сумірна фази, а також властивості модульованого стану.

3.4.2. Граничні значення параметра g

Розглянемо деякі властивості g-члена більш детально. Для існування стійких локалізованих розв’язків необхідно, щоб деякий параметр, що зв'язує амплітуду солітону з шириною області локалізації (і визначає в динамічному випадку відношення ступеня нелінійності до величини дисперсії), повинен бути більшим за деяке граничне значення (див. [87]). Роль такого параметра рівняння (3.3) грає g-член. Справді, третє рівняння системи (3.39) має дійсне рішення

$$A=\frac{g}{16}\left[1\pm\sqrt{1-\frac{32h}{3g^2}}\right] \qquad (3.42)$$

лише за умови

$$|g| \geq g_c = \sqrt{\frac{32h}{3}} \approx 3.26\sqrt{h}. \tag{3.43}$$

Хоча розв'язок (3.35) є наближеним, не слід розглядати величину $g_c = \sqrt{32/3\,h}$ як точний результат, чисельне моделювання рівняння (3.3) підтверджує існування такої нижньої межі для g, нижче якої солітонні розв'язки втрачають стабільність або взагалі не реалізуються [53].

Якщо параметр $g < 0$ у виразі (3.2), роль інваріанта $\sim\varphi^6$ можна опустити, тобто покласти $h = 0$, при цьому третє рівняння (3.39) має наступне нетривіальне рішення: $A = g/8$. що знімає жорсткі обмеження на мінімальну величину g.

3.4.3. Залежність $g^2(q)$

Використовуючи систему рівнянь (3.39), знайдемо залежність параметра g та ефективної температури q. Для спрощення приймемо модельні значення $h = 1, \gamma = 1, p = 0, C = 0$ ця система набуває вигляду:

$$\begin{cases} 24A^2 - 3gA + 1 = 0 \\ 2B(-10A + g) - 2A = 0. \\ B^2 + B + q = 0 \end{cases} \tag{3.44}$$

При цьому, якщо $A > 0$ і $B < 0$ рівняння (3.35) описує стан типу bell-солітонного типу [15,16]. Третє та друге рівняння системи (3.44) дають

$$A = \frac{2gB}{1 + 10B}, \qquad B = -\frac{1}{2} + \sqrt{\frac{1}{4} - q}, \qquad q < 0. \tag{3.45}$$

Підставляючи співвідношення для параметра першого рівняння системи (3.44), отримаємо:

$$g^2 = \frac{(1 + 10B)^2}{6B(1 - 6B)} \tag{3.46}$$

де B визначається формулою (3.45). З (3.46) видно, що якщо $q \to -\infty$, то $g^2 \to 50/3$. Зазначимо, що залежність (3.46) має мінімум, що дорівнює $g^2(q) = 32/3$, при $q = -7/36$.

Межу стабільності сумірної фази $\varphi(x) = const \neq 0$ можна знайти наступним чином. Рівняння (3.3) при $p = 0$, $h = 1$ має наступний однорідний розв'язок

$$\varphi^4 = -q, \qquad q < 0. \tag{3.47}$$

Друга варіація функціоналу (3.2) стосовно рішення (3.47) призводить до такої умови стабільності

$$g^2 \leq \left(4 - \frac{1}{\sqrt{-q}}\right)^2. \tag{3.48}$$

При цьому якщо $q \to -\infty$, то $g^2 \leq 16$.

3.4.4. Стабільність термодинамічного потенціалу при $g > 0$

Якщо $g < 0$, то внесок члена $g(\varphi\varphi')^2$ в термодинамічний потенціал завжди позитивний і не може порушити глобальну стійкість системи (3.2).

Але це не так, якщо параметр g позитивний [37]. Тим не менш, у присутності в ТП (3.2) інваріанту $\sim\varphi^6$, $h > 0$, існує інтервал значень параметра $g > 0$, при яких глобальна стійкість (3.2) зберігається, принаймні по відношенню до розподілу параметра порядку, що розглядається.

Для підтвердження цього твердження розглянемо спочатку одногармонійне наближення.

Математично порушення глобальної стійкості системи означає, що ТП необмежений знизу при деяких значеннях амплітуди ПП a та/або хвильового числа b. Для одногармонічного наближення вираз для потенціалу (3.2) має вигляд:

$$\Phi[a\,sin(bx)] = \frac{1}{48}\left(5ha^6 + (9p - 6gb^2)a^4 + 24(b^4 - \gamma b^2 + q)\right). \tag{3.49}$$

Для потенціалу (3.49) точками глобальної нестійкості є відповідно $a = \infty$ і $b = \infty$ (розглядаємо фізично значущі рішення, так що припускаємо $a \geq 0$ і $b \geq 0$). Коли лише з параметрів a чи b стає нескінченним, ТП (3.49) позитивний, оскільки коефіцієнти при старших ступенях a і b позитивні. Але

коли $g > 0$ і a, b одного порядку і прагнуть до нескінченності, то термодинамічний потенціал може ставати негативним. Оскільки при цьому a і b повинні змінюватися одночасно, можна припустити, що b є функцією a: $b = f(a)$ і, крім того, що $b = \sum_{n=0}^{\infty} c_n a^n$. Легко побачити, що коефіцієнт при старшому ступені a може бути негативним тільки у разі $b = c \cdot a$. Дійсно, коли $b \sim a^m$, $m \geq 2$, отримуємо, що коефіцієнт при $a^2 b^4 \sim a^{2+4m}$, де $2 + 4m > 6$ є старшим і завжди позитивним. У разі зв'язку виду $b = c \cdot a$ вираз термодинамічного потенціалу перетворюється на вид:

$$\Phi = Za^6 + \left(\frac{3}{16}p - \frac{1}{2}\gamma c^2\right) \cdot a^4 + \frac{1}{2}qa^2, Z = \frac{1}{2}c^4 - \frac{1}{8}gc^2 + \frac{5}{48}h. \qquad (3.50)$$

Якщо для деякого значення g при деяких речових значеннях с коефіцієнт може ставати негативним, то ТП системи є глобально нестійким. Іншими словами, для забезпечення глобальної стійкості термодинамічного потенціалу функція $Z(c)$ повинна бути завжди невід'ємною і може перетворюватися на нуль в ізольованих точках. Ця вимога призводить до нерівності

$$g \leq \sqrt{40h/3} \approx 3.65\sqrt{h}. \qquad (3.51)$$

Коли $g = \sqrt{40h/3}$, отримуємо $Z = 0$. У цьому випадку через те, що значення q може бути негативним, коефіцієнт при a^4 (3.50) повинен бути обов’язково більше нуля.

Для наближення параметра порядку $\varphi(x)$ за допомогою еліптичних функцій і при $k^2 > 0$ умова (3.51) стає менш суворою. На межі $k^2 = 1$ обмеження зверху значення параметра $g > 0$ для глобальної стійкості системи знімаються взагалі.

3.5. Релаксація параметру порядку в органічних середовищах

Розглядаючи явище кіральності в живих системах, як можливий прояв порушення симетрії під дією природніх чинників переваги, в ключових дослідників брались до уваги в тому числі ядерно-фізичні та радіаційні процеси, для яких притаманне порушення парності. Це слабкі нейтральні

струми що характеризуються переважаючим спіном у Z бозона та явище порушення парності в слабких взаємодіях елементарних частинок, коли бета частинка мала статистично переважаючий власний спін, орієнтований проти спіну ядра. Слід зазначити, що польові процеси, які розглядаються як локальний чинник впливу містять властивість поляризованості: циркуляційно-поляризоване світло, лінійно-поляризоване світло, циркуляційно-поляризоване електромагнітне впромінювання, яке генерується спалахами на Сонці [151]. При цьому механізм порушення рацемічності на думку авторів полягає або в дії продуктів радіолізу або в переважаючій дії зовнішніх чинників яким властива поляризованість. На нашу думку в таких підходах залишається осторонь здатність високомолекулярної системи під дією первинних зовнішніх чинників згенерувати власне вторинне випромінювання (а не довільні фізико-хімічні процеси) на довжинах хвиль узгоджених з коливаннями молекул (див. Рисунок 3.11).

Рисунок 3.11. Розвиток кіральності

Схема такого сценарію застосовувалась в роботі [152] для аналізу механізмів досягнення заданого радіаційного ефекту в опромінюваному органічному середовищі. Більш тонкі біохімічні ефекти, які перегукуються і з притаманною чинникам переваги «поляризованістю» і з пропонованою нами схемою генерації вторинного дерацемізуючого чинника описана в роботі

[153]. В ній автор, узагальнюючи результати інших дослідників [154, 155] та проводячи власні експерименти наводить тезу, що природній радіаційний фон є неодмінним чинником, який необхідний для підтримки реакцій поділу та розвитку живих клітин.

Тригером цього виступають первинні низько енергетичні частинки (з енергією що не здатна призвести до руйнування біологічних структур). Подальший перебіг подій полягає у збудження високомолекулярних біологічних структур з утворенням «поляронів», які при переході в основний стан, генерують когерентне ультрафіолетове (УФ) випромінювання, здатне активізувати процеси, відповідальні за підтримку життєдіяльності. Тобто йдеться про вторинний радіаційний чинник, що утворюється в «біологічному конверторі». Ефекти позитивної активуючої біологічної дії, наприклад, на пророщування насіннєвого матеріалу при обробці його іонізуючим випромінюванням відзначались, наприклад, в роботах [156, 157], причому серед технологічних недоліків УФ випромінювання відзначалась лише невелика проникаюча здатність. Тоді як більш високоенергетичні частинки , хоча і проникають на більшу глибину, все рівно в одному акті взаємодії віддають лише декілька еВ своєї енергії, що є співвимірним з енергією кванта УФ випромінювання. З оглязу на це можна зробити припущення, що саме вторинні чинники переваги можуть описуватися похідними більш високих порядків.

Для опису таких станів використовується формалізм теорії фазових переходів Ландау, де параметром порядку виступає кіральна поляризація φ[158]:

$$\varphi = \frac{x_L - x_D}{x_L + x_D}, \tag{3.52}$$

де x_L та x_D — концентрації лівих та правих енантіомерів відповідно. Значення $|\varphi| = 1$ відповідає гранично впорядкованому (кірально чистому) стану, тоді як $\varphi = 0$ характеризує рацемічне середовище.

Динаміка системи поблизу стану рівноваги φ_0 описується через швидкість зміни параметра порядку, пропорційну термодинамічній силі:

$$\dot{\varphi} = -\Gamma \frac{\delta F}{\delta \varphi}. \tag{3.53}$$

Аналіз лінеаризованої форми цього рівняння в компонентах Фур'є дозволяє визначити час релаксації τ_k для різних мод флуктуацій.

$$\frac{1}{\tau_k} = \Gamma(q + 3p{\varphi_0}^2 + 5h{\varphi_0}^4) + \Gamma k^4 - (\gamma + g{\varphi_0}^2)k^2 \tag{3.54}$$

Спонтанне порушення дзеркальної симетрії (СПС) виникає внаслідок нестійкості рацемічного стану. Навіть мінімальні стохастичні флуктуації, автокаталітично посилюючись, призводять до біфуркації системи в один із двох енергетично еквівалентних, але дзеркально-антиподових станів.

Важливо зазначити, що згідно з дослідженнями [159], вплив слабких нейтральних струмів (ефектів незбереження парності у слабких взаємодіях) є недостатнім для подолання дифузійних процесів у масштабах пребіосфери. Таким чином, вибір конкретного знака кіральності (наприклад, L-амінокислот у земній біосфері), ймовірно, має стохастичну природу, зафіксовану механізмом позитивного зворотного зв'язку в ході хімічної самоорганізації.

Аналогічні за своєю природою релаксаційні процеси спостерігаються при взаємодії іонізуючого випромінювання з полімерними середовищами. В основі сепарації видів пластику, опроміненого пучком електронів, лежить явище відмінності часу релаксації накопиченого електричного заряду, який залежить від власних електрофізичних характеристик діелектрика. Час релаксації визначається з рівняння безперервності, згідно з яким густина заряду q зменшується за експоненціальним законом:

$$\frac{\partial q}{\partial t} = -\nabla\left(\sigma\vec{E}\right) \Rightarrow q = q_0 \exp\left(-\frac{\sigma}{\varepsilon\varepsilon_0}t\right). \tag{3.55}$$

Разом з тим, зважаючи на складний характер перебігу фізичних процесів («ефект чорної скриньки»), що супроводжують перехід діелектрика в рівноважний стан, класичний експоненціальний вираз доцільно замінити моделлю нелінійної релаксації [160]:

$$q = q_0 \exp\left[-\left(\frac{t}{\tau}\right)^{\beta}\right], \quad 0 \le \beta \le 1. \tag{3.56}$$

Експериментальні дані [161] підтверджують нелінійний характер цієї динаміки. Зокрема, після опромінення поліетилену та поліпропілену дозою 7,5 кГр та витримки протягом доби, значення накопиченого заряду в поліпропілені виявляється більш ніж на порядок вищим. Це свідчить про суттєву відмінність у матеріальних параметрах, відповідальних за енергетичну еволюцію системи.

Для візуалізації та прогнозування просторового накопичення заряду нами були використані модельні зразки опроміненого поліметилметакрилату. Дослідження траєкторій імпульсного струму електричного пробою в цих прозорих полімерах дозволяє зрозуміти особливості локалізації заряду в об'ємі. Таким чином, для моделювання динаміки релаксації як кірального параметра порядку, так і електричного заряду в полімерах, пропонується єдиний підхід на основі теорії фазових переходів другого роду з використанням відповідного термодинамічного потенціалу.

Висновки до розділу 3

1. Феноменологічна модель (3.1) є мінімально необхідною і достатньою за включеними до неї інваріантами для якісного та кількісного опису послідовності фазових переходів нормальна→модульована→сумірна фази та властивостей модульованого стану в системах з однокомпонентним параметром порядку. Особлива роль, яку відіграють у моделі (3.1) інваріанти виду $\sim(\varphi\varphi')^2$, обумовлена складним нелінійним і нелокальним характером взаємодій в системах, що розглядаються.

2. Запропоновано метод (3.3)-(3.7) якісного та кількісного аналізу нелінійних варіаційних диференціальних рівнянь вищих порядків, що описують просторово неоднорідні структури параметра порядку. Метод дозволяє виявити чотири основні типи розв’язків, що допускаються, і

проаналізувати потенційно можливі сценарії фазових переходів, у тому числі з появою солітонних станів типу bell-солітону і kink-солітону.

3. Мінімальна модель розподілу параметра порядку, що дозволяє описати послідовність фазових переходів, що спостерігається експериментально, має вигляд:

$$\varphi'^2(x) = a_0 + a_1\varphi^2 + a_2\varphi^4,$$

де $\varphi(x)$ - Параметр порядку, що залежить від однієї просторової координати; a_0, a_1, a_2 – деякі константи, що залежать від матеріальних параметрів системи. Дана модель дозволяє побудувати наближені розв'язки варіаційного диференціального рівняння для систем з однокомпонентним параметром порядку, при цьому визначення модельних параметрів потрібно використовувати варіаційну процедуру.

4. Знайдено залежності для загального вигляду диференційного рівняння еліптичних функцій Якобі для термодинамічного потенціалу (3.3).

5. Запропонована математична модель дозволяє аналізувати стабільність кіральних систем через варіаційні рівняння вищих порядків, враховуючи просторову неоднорідність середовища.

6. Розглянуто релаксаційні процеси у полімерних середовищах.

РОЗДІЛ 4. ЧАСТИННІ ТОЧНІ ТА НАБЛИЖЕНІ РОЗВ'ЯЗКИ ВАРІАЦІЙНОГО РІВНЯННЯ ДЛЯ СИСТЕМ З НЕСПІВМІРНИМИ СТАНАМИ

На даний час відомо кілька просторово неоднорідних точних розв'язків рівняння (3.3) [52, 53, 87, 143, 148, 162, 163].

У [87] знайдено три частинні розв'язки, що виражаються через функції Якобі: еліптичні синус – $sn(x,k)$, косинус – $cn(x,k)$ і та дельта-амплітуди – $dn(x,k)$. При цьому отримано, що ці розв'язки можуть мати фізичний сенс тільки при певних, досить специфічних значеннях параметрів середовища. Розглянемо детальніше ці три часткові розв'язки. Вперше на існування точного розв'язки рівняння (3.3), вираженого через еліптичний синус Якобі, було вказано в [162]. Більш докладно властивості цього рішення обговорювалися в [143, 163].

4.1. Розподіли ПП, що виражаються через еліптичний синус Якобі

Варто зауважити, що точні фізичні розв'язки рівняння (3.3) можуть і не належати до класу еліптичних функцій у строгому математичному сенсі, оскільки вони не утворюють повного набору для опису будь-якої координатної залежності. Проте, за відсутності загальної процедури точного розв'язання нелінійної варіаційної задачі (3.2)-(3.3), використання функцій Якобі як наближень n-го порядку є важливим та виправданим кроком. При цьому отримані результати можуть вимагати оцінки точності і прийнятності розроблених наближень.

Припустимо, що просторовий розподіл ПП описується виразом:

$$\varphi(x) = a \cdot sn[b(x - x_0), k]. \qquad (4.1)$$

Підставивши цей вираз у функціонал термодинамічного потенціалу (3.2) (при $h = 1$), після інтегрування по періоду $T_s = 4K(k)/b$ отримуємо вираз:

$$\frac{\Phi}{L} = a^2\{-\gamma b^2 + I_2 \cdot [q + \gamma b^2(1+k^2) + b^4(1+k^2)^2] - I_4 \cdot [\gamma b^2 k^2 + 4b^4 k^2(1+k^2)] + I_6 \cdot 4b^4 k^4\} + a^4\left\{-I_2 \cdot gb^2 + I_4 \cdot \left[\frac{p}{2} + gb^2(1+k^2)\right] - I_6 \cdot gb^2 k^2\right\}, \quad (4.2)$$

де $I_n = \frac{1}{T_s}\int_0^{T_s} sn^n(bx,k)dx$ є усередненими значеннями ступенів еліптичного синуса, що виражаються через повні еліптичні інтеграли першого ($K(k)$) та другого ($E(k)$) роду[12]:

$$I_2 = k^{-2}\left[1 - \frac{E(k)}{K(k)}\right], I_4 = (3k^4)^{-1}\left[(2+k^2) - 2(1+k^2)\frac{E(k)}{K(k)}\right], \quad I_6 = (15k^6)^{-1}\left[(4k^4 + 3k^2 + 8) - (8k^4 + 7k^2 + 8)\frac{E(k)}{K(k)}\right]. \quad (4.3)$$

При зміні параметра модуля k^2 від 0 до 1 відбувається якісна трансформація системи. Плавна гармонічна хвиля поступово деформується: області, де ПП близький до сумірного значення, розширюються, а переходи між ними звужуються. У граничному випадку ($k^2 \to 1$) структура перетворюється на решітку доменних стінок (солітонів), що розділяють області однорідного впорядкування (Рисунок 3.7). Таким чином, модель на основі функції sn дозволяє наочно описати процес "солітонізації" модульованої фази.

Пряма підстановка функції (4.1) у варіаційне рівняння (3.3) приводить до системи трьох алгебраїчних рівнянь відносно амплітуди a, зворотного періоду b та модуля еліптичності k:

$$\begin{cases} a^4 + 3ga^2k^2b^2 + 24k^4b^4 = 0 \\ -2(1+k^2)[ga^2b^2 + 10k^2b^4] + 2\gamma k^2 b^2 + pa^2 = 0. \\ b^4(k^4 + 14k^2 + 1) + ga^2b^2 - \gamma(1+k^2)b^2 + q = 0 \end{cases} \quad (4.4)$$

Розв'язуючи систему (3.36), ми отримуємо аналітичні вирази для основних характеристик модульованої фази:

$$a^2 = \acute{a}_{\pm}{}^2 k^2 b^2, \quad (4.5)$$

$$b^2 = \frac{\xi\sigma}{2(1+k^2)}, \quad (4.6)$$

$$k^2 = \frac{-\beta \pm \sqrt{\beta^2 - 4\alpha^2}}{2\alpha}, \tag{4.7}$$

де

$$\acute{a}_{\pm}{}^2 = \frac{3}{2}\left(-g \pm \sqrt{g^2 - \frac{32}{3}}\right), \tag{4.8}$$

$$\xi = 2\gamma + p\acute{a}_{\pm}{}^2, \tag{4.9}$$

$$\frac{1}{\sigma} = g\acute{a}_{\pm}{}^2 + 10, \tag{4.10}$$

$$\alpha = 4q - 2\gamma\xi\sigma + \xi^2\sigma^2, \tag{4.11}$$

$$\beta = 8q - 4\gamma\xi\sigma + \xi^2(4\sigma^2 + \sigma). \tag{4.12}$$

Для $0 \le k^2 \le 1$ необхідно $\alpha \le 0$, $\beta > 0$, вибір знаку у формулі для k^2 в (3.37) обумовлений тим самим обмеженням на величину k^2.

Термодинамічний потенціал залежить від константи інтегрування x_0 (початкової фази рішення). Тому для простоти можна покласти $x_0 = 0$.

Умові $k^2 = 0$ відповідає значення $\alpha = 0$, що визначає критичну точку

$$q_0 = \gamma\xi\sigma/2 - \xi^2\sigma^2/4. \tag{4.13}$$

Ця точка є межею фазового переходу з невпорядкованої фази у модульовану. Перехід з модульованої структури у впорядковану (сумірну) фазу відбувається при $k^2 = 1$, що відповідає умові $2\alpha + \beta = 0$ або значенню параметра

$$q_1 = \gamma\xi\sigma/2 - \xi^2(6\sigma^2 + \sigma)/16. \tag{4.14}$$

Відповідно, температурний інтервал існування модульованого стану визначається як $\Delta q = \xi^2(2\sigma^2 + \sigma)/16$.

Для глибшого розуміння фізичних процесів, що відбуваються в системі, доцільно перейти від загального вигляду розв’язку для еліптичного модуля (4.7) до форми, яка залежить від значень критичних ефективних температур (4.13) та (4.14):

$$k^2 = \frac{2q_1 - q - q_0 \pm 2\sqrt{(q_1 - q)(q_1 - q_0)}}{(q - q_0)}. \tag{4.15}$$

Поблизу точки переходу з високосиметричної фази ($k^2 \approx 0$) термодинамічний потенціал (3.34) спрощується до вигляду:

$$\begin{aligned}\frac{\Phi}{L} = a^2\left\{\frac{1}{2}[b^4 - \gamma b^2 + q] + \frac{1}{16}k^2[-7b^4 + 3\gamma b^2 + q]\right.\\ \left. + \frac{1}{32}k^4[5b^4 + \gamma b^2 + q]\right\}\\ + a^4\left\{\frac{1}{8}\left[-gb^2 + \frac{3}{2}p\right] + \frac{1}{16}k^2\left[gb^2 + \frac{1}{2}p\right]\right\}\\ + \frac{a^6}{3}\left\{\frac{5}{16} + \frac{15}{256}k^2\right\},\end{aligned} \tag{4.16}$$

а параметри розв'язку (4.5)–(4.7) в цьому наближенні набувають вигляду:

$$a^2 = \acute{a}^2\frac{2\gamma\xi\sigma - \xi^2\sigma^2 - 4q}{2\xi(2\sigma + 1)} \qquad b^2 = \frac{\xi\sigma}{2}$$
$$k^2 = \frac{2\gamma\xi\sigma - \xi^2\sigma^2 - 4q}{\xi^2(2\sigma^2 + \sigma)} \tag{4.17}$$

4.1.1. Апроксимація параметра порядку за допомогою еліптичного синуса

Вивчимо можливість використання наближеного розподілу (4.1) для опису рівноважних станів у таких системах з однокомпонентним параметром порядку, як одновісні сегнетоелектрики та магнетики [3, 19, 25]. Вибір еліптичного синуса (а не інших обмежених на дійсній осі функцій Якобі, таких як еліптичний косинус або дельта амплітуди), обумовлений тим, що сценарій фазових переходів, який допускається рішенням виду (4.1), відповідає експериментально спостережуваній послідовності фазових переходів у розглянутих системах [19, 25].

Параметри $a,\ b,\ k$ розв’язку (4.1) залежать від матеріальних констант. Серед матеріальних параметрів наведеного ТП (3.2) можуть змінюватися тільки $g,\ q,\ p$. Параметр p визначає властивості сумірної фази, тому для врахування потенціалу інваріантом, пропорційним φ^6, треба для стабільності ТП приймати його меншим нуля. Нехай $p = -1$.

Параметр g , якщо не обумовлено протилежне, будемо вважати меншим за нуль:$g < 0$. Причини такого вибору наступні.

а) Коректна зміна періоду модуляції при зміні температури в розглянутих системах, а саме, збільшення періоду при зниженні T, забезпечується тільки при $g < 0$ [49].

б) При досить великих $g > 0$ термодинамічний потенціал (3.2) втрачає глобальну стійкість (див. 3.3.4).

в) Потенційна можливість існування кінкоподібних розподілів параметра порядку, що мають вигляд набору доменних стінок, допускається тільки при $g < 0$ (див. розділ 4.4.2 нижче).

г) Крім того, точні розв'язки, що виражаються через еліптичний синус, також допустимі тільки при $g < 0$.

Єдиним матеріальним параметром, який залежить від температури, є q. Таким чином, необхідно розглянути залежність властивостей рівноважних розподілів параметра порядку $\varphi(x)$ від двох параметрів: g і q.

За умови $0 \le k^2 \le 1$ вираз (4.6) має бути дійсним, тому маємо два випадки:

$$\begin{matrix} \xi < 0,\ \sigma < 0 \\ \xi > 0,\ \sigma > 0 \end{matrix} \qquad (4.18)$$

При $\acute{a}_+$ (4.8) σ приймає значення від $-1/6$ до 0, а при $\acute{a}_-$ σ приймає значення $(-\infty, -1/6]$ та $(1/2, +\infty)$. Відповідно до (4.18) для значень $\acute{a}_+$ $\xi < 0$, а для $\acute{a}_-$ буде два випадки: 1) $32/3 < g^2 < 12$ $(\sigma < 0)$; 2) $g^2 > 12 (\sigma > 0)$.

Відповідно до отриманих аналітичних розв'язків, амплітуди базових мод $\acute{a}_{\pm}^2$ (4.8) визначаються виключно параметром нелінійної взаємодії g. Формула (4.8) зумовлює існування критичної межі $g = -\sqrt{32/3}$. На Рисунках 4.1–4.3 показані результати розрахунків рівноважних значень a^2, b^2, k^2, як функцій параметра q представлений випадок $g = -\sqrt{32/3}$, що відповідає точці злиття двох гілок розв'язків.

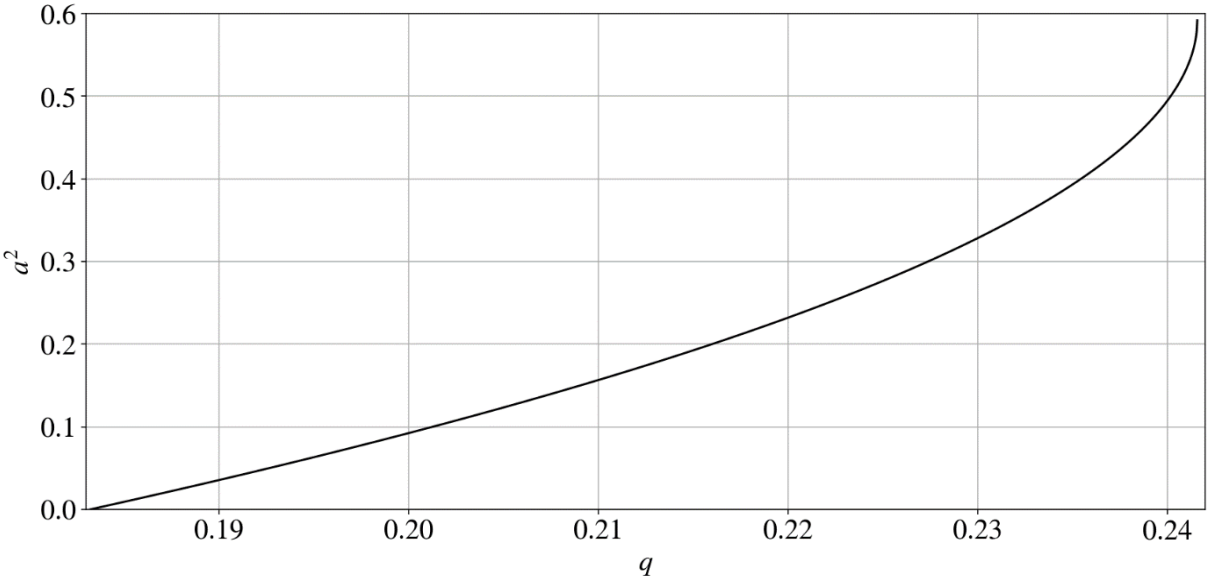


Рисунок 4.1 – Залежність амплітуди параметра порядку a від ефективної температури q. Параметр $g = -\sqrt{32/3}$

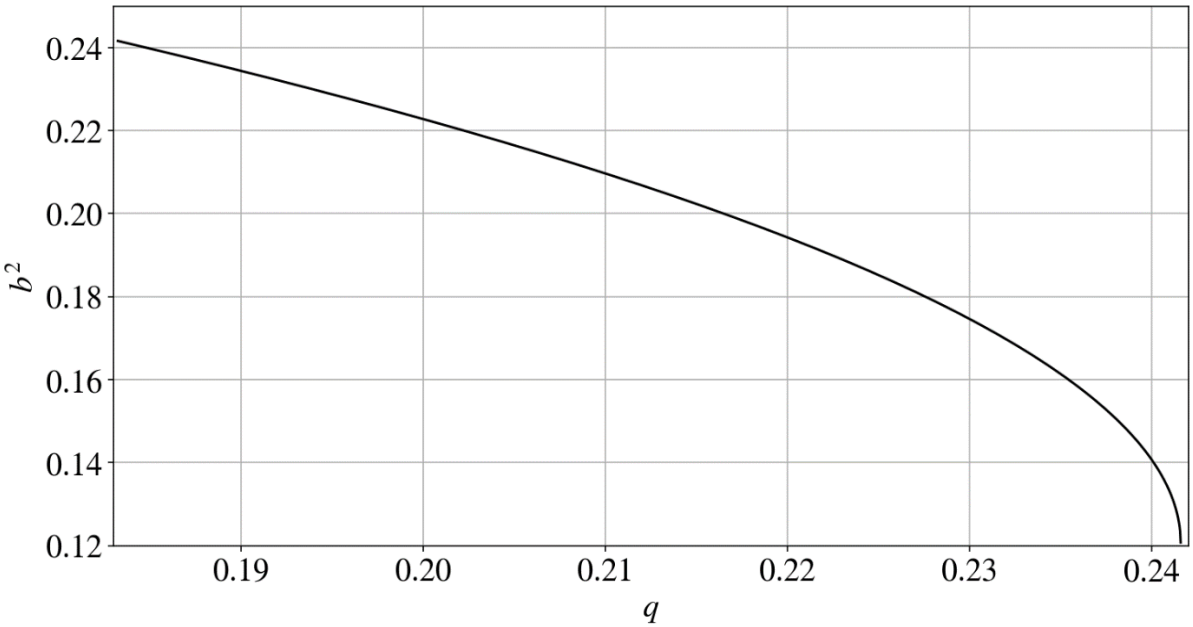


Рисунок 4.2 – Залежність параметра b від ефективної температури q. Параметр $g = -\sqrt{32/3}$

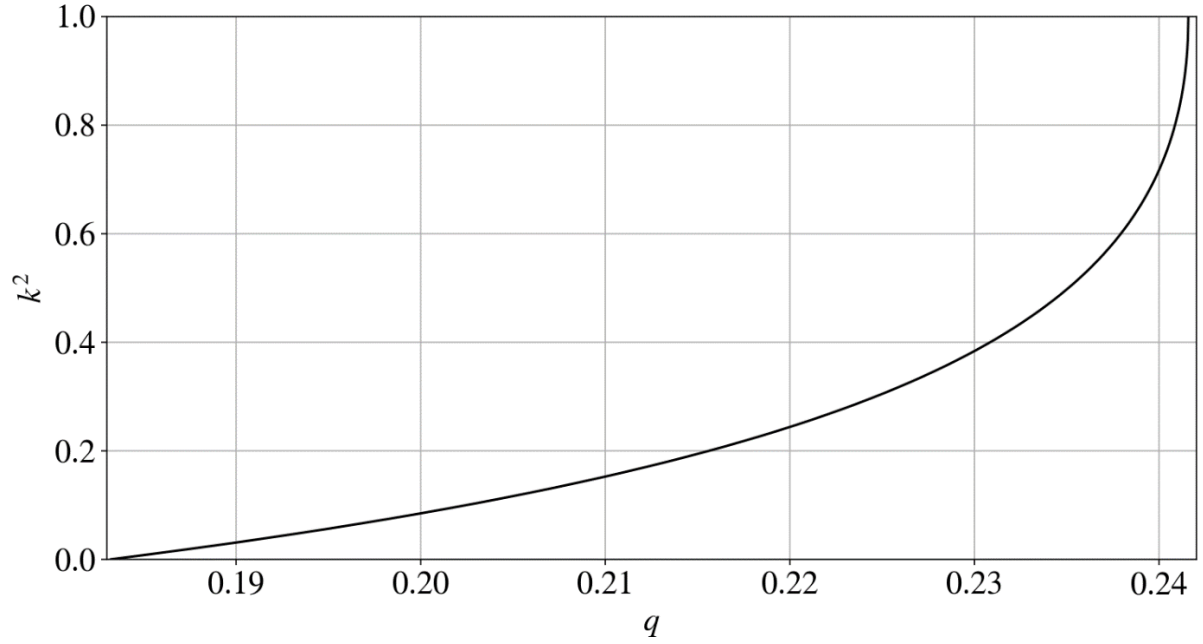


Рисунок 4.3 – Залежність еліптичного модуля k від ефективної температури q. Параметр $g = -\sqrt{32/3}$

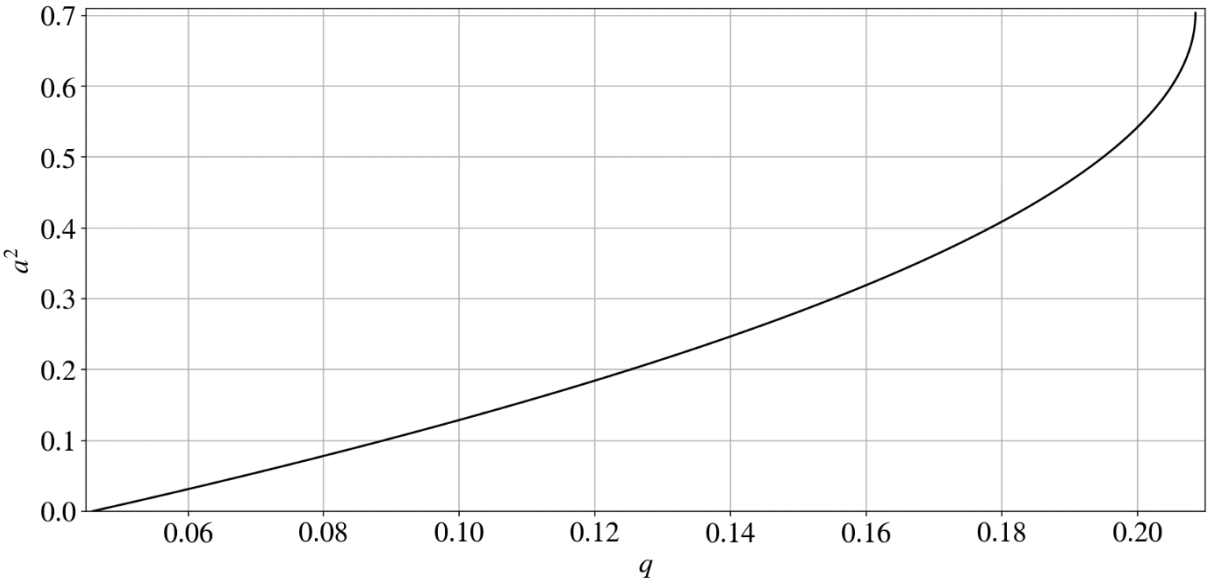


Рисунок 4.4 – Залежність амплітуди параметра порядку a від ефективної температури q для $\acute{a}_+$. Параметр $g = -10$

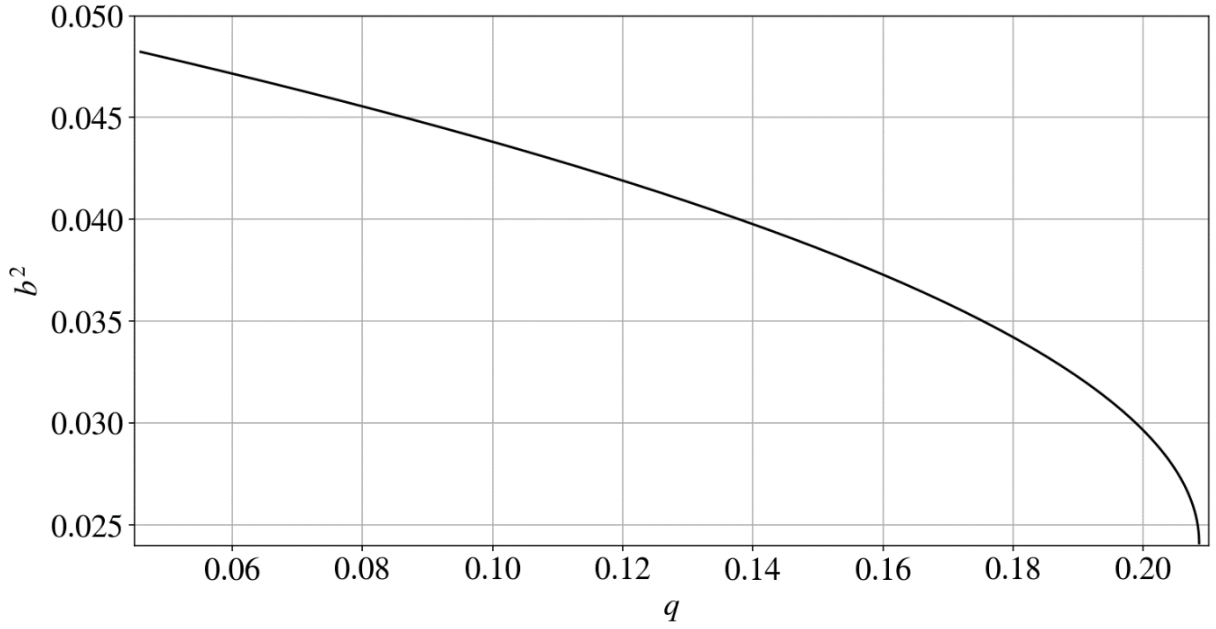


Рисунок 4.5 – Залежність параметра b від ефективної температури q для $\acute{a}_+$. Параметр $g = -10$

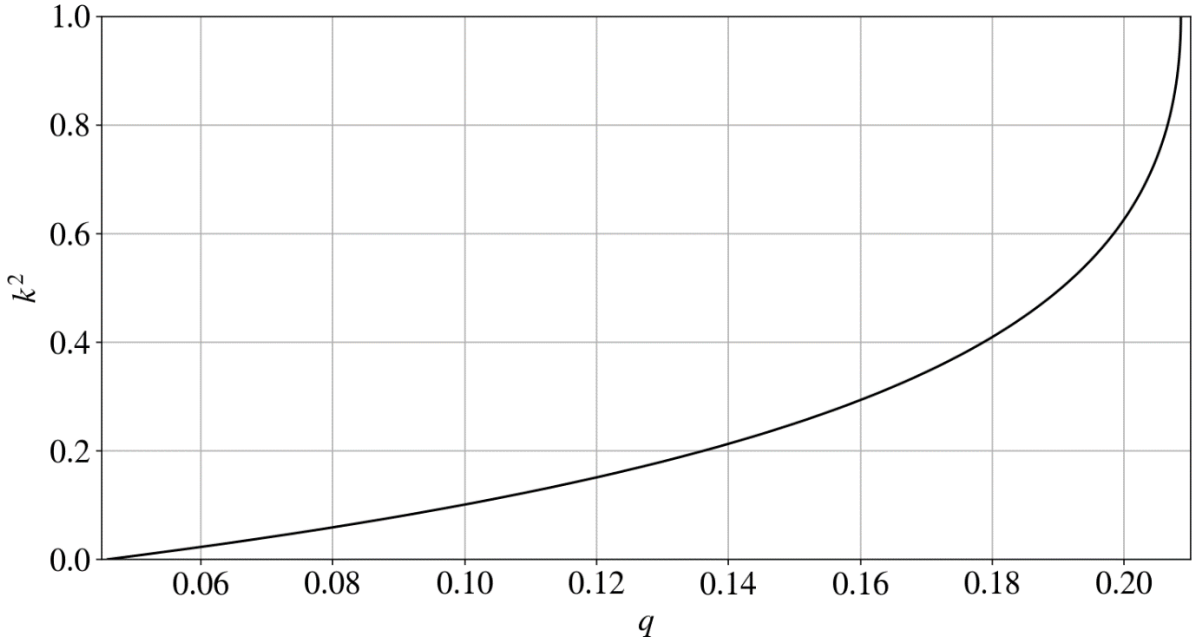


Рисунок 4.6 – Залежність еліптичного модуля k від ефективної температури q для $\acute{a}_+$. Параметр $g = -10$

На Рисунках 4.4–4.6 показані результати розрахунків рівноважних значень a^2, b^2, k^2 для гілки розв'язків $\acute{a}_+$ для $g = -10$. Детальніший розгляд цієї гілки розв'язків показує, що параметр a^2 у цьому режимі зростає приблизно від 0,6 до 0,75, у той час як максимальне значення параметра b^2 фактично нівелюється, наближаючись до нуля, а температурний інтервал

існування фази розширюється і зміщується від 0 до 3/16.

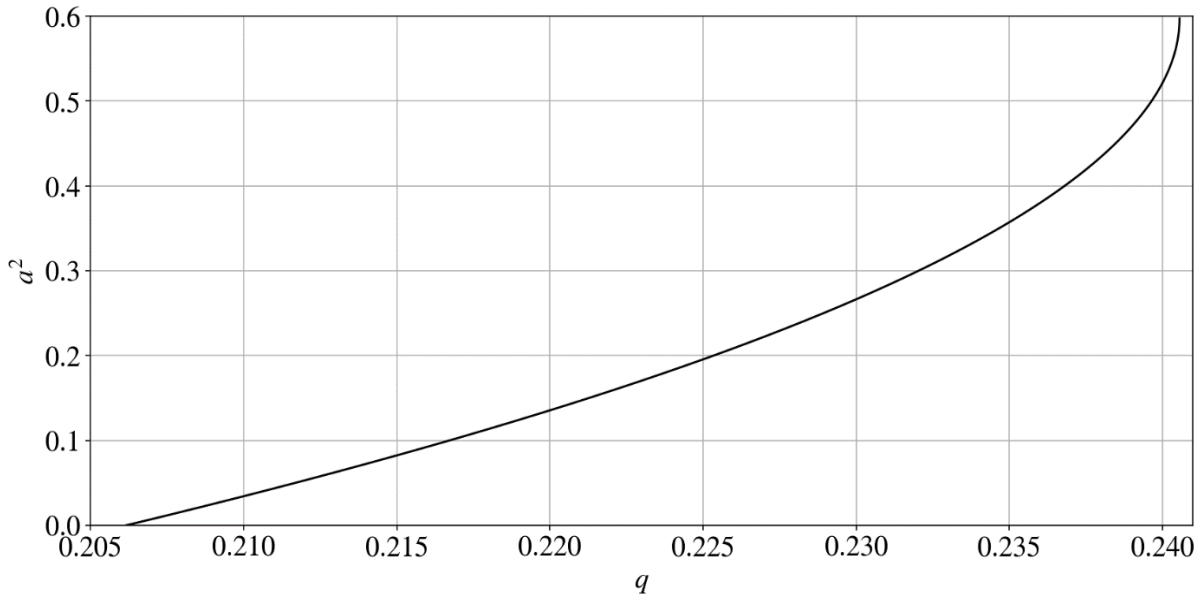


Рисунок 4.7 – Залежність амплітуди параметра порядку a від ефективної температури q для $\acute{a}_{-}$. Параметр $g = -\sqrt{11}$

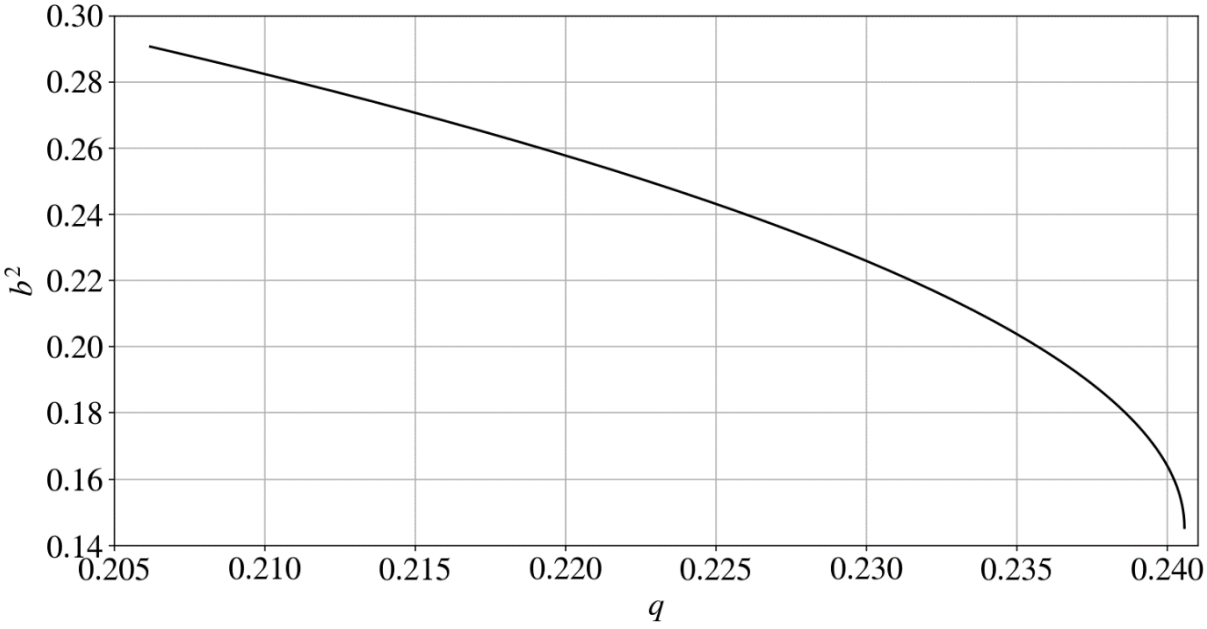


Рисунок 4.8 – Залежність параметра b від ефективної температури q для $\acute{a}_{-}$. Параметр $g = -\sqrt{11}$

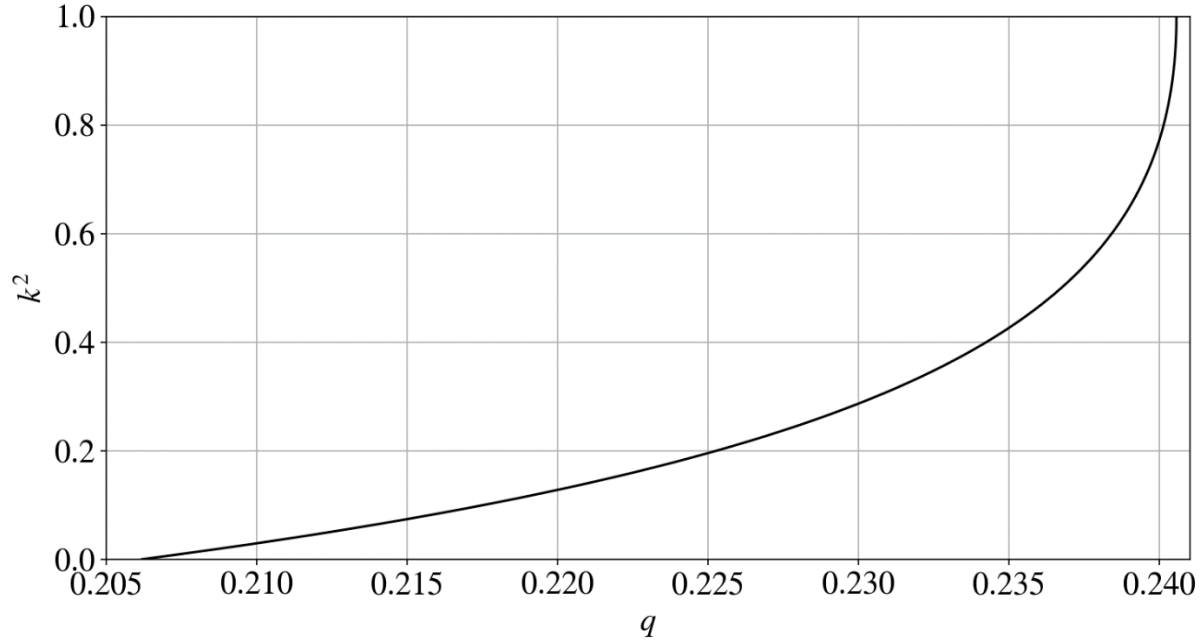


Рисунок 4.9 – Залежність еліптичного модуля k від ефективної температури q для $\acute{a}_-$. Параметр $g = -\sqrt{11}$

У специфічному діапазоні значень $32/3 < g^2 < 12$ для гілки розв'язків $\acute{a}_-$ (Рисунки 4.7–4.9) система входить у режим відносної амплітудної стабільності, де значення a^2 та b^2 практично не зазнають суттєвих змін, проте різниця між критичними температурами q_1 та q_0 стрімко зменшується до нуля, що вказує на виродження температурного вікна стійкості періодичних розв'язків.

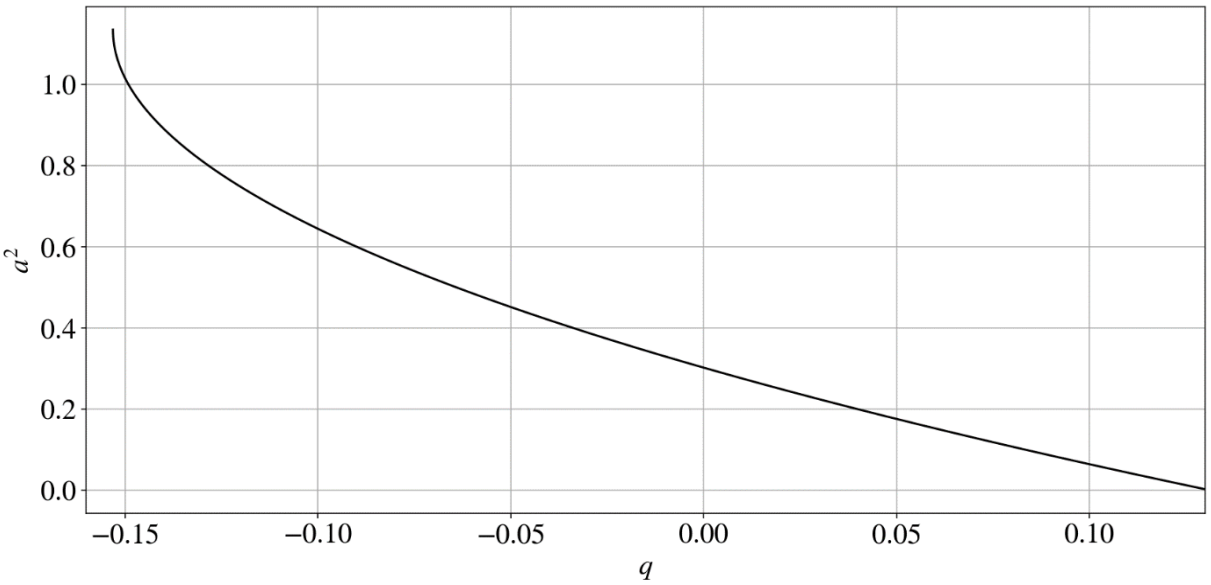


Рисунок 4.10. Залежність амплітуди параметра порядку a від ефективної температури q для $\acute{a}_-$. Параметр $g = -\sqrt{15}$.

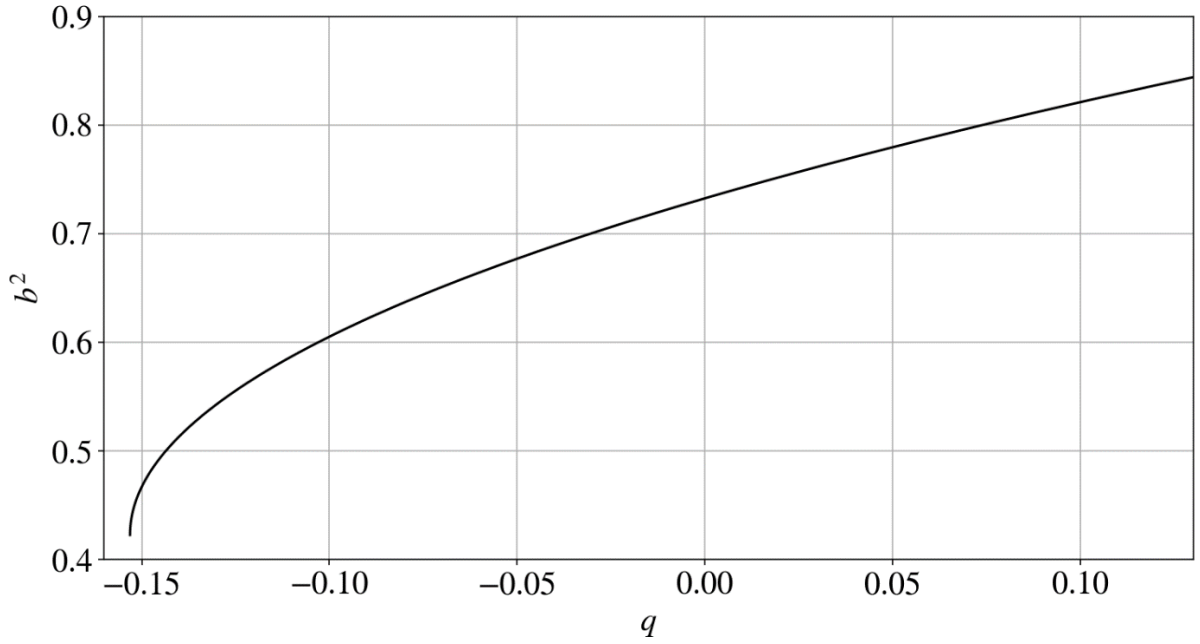


Рисунок 4.11 – Залежність параметра b від ефективної температури q для $\acute{a}_{-}$. Параметр $g = -\sqrt{15}$

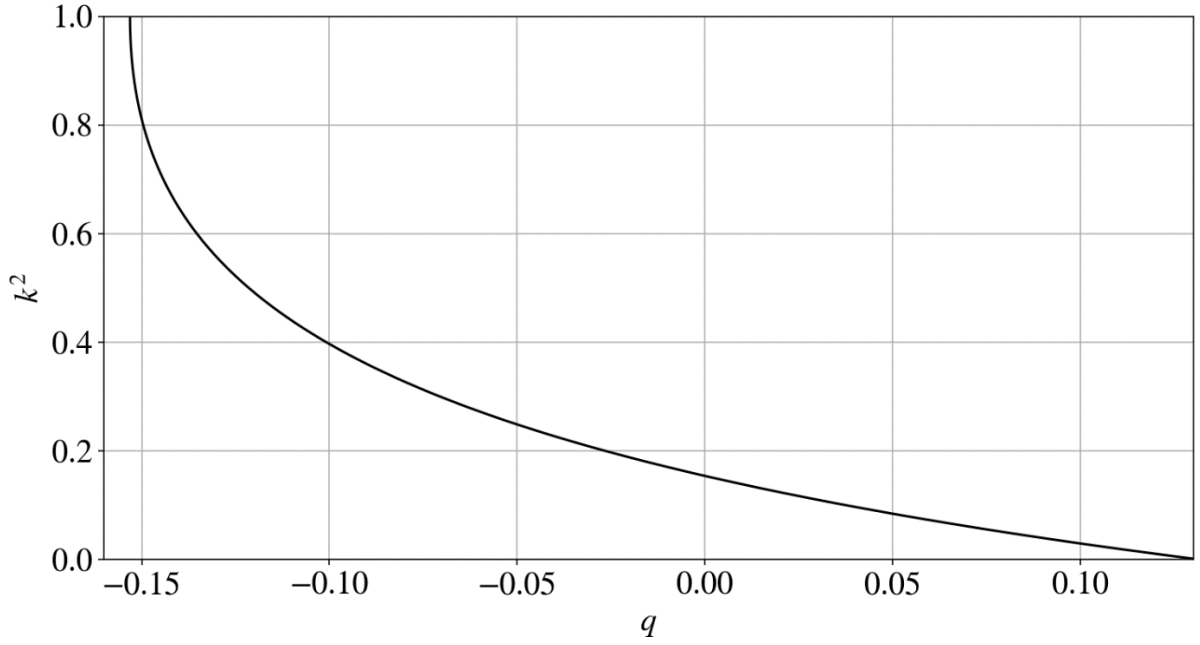


Рисунок 4.12 – Залежність еліптичного модуля k від ефективної температури q для $\acute{a}_{-}$. Параметр $g = -\sqrt{15}$

Фізична межа застосовності поточної моделі чітко простежується при наближенні квадрата параметра нелінійності g до значення 50/3 (Рисунки 4.10–4.12), де спостерігається критична поведінка: амплітуди a^2 та b^2 прямують до нескінченності, а відповідні характерні температури зміщуються

у бік від’ємної нескінченності, що свідчить про колапс системи під час конкуренції мод.

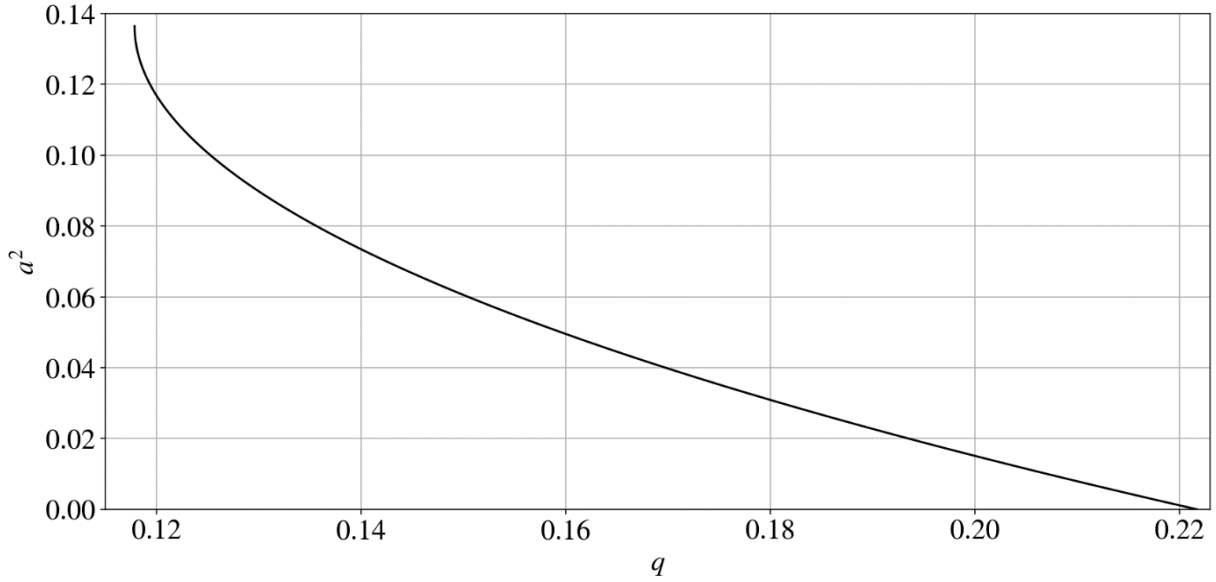


Рисунок 4.13 – Залежність амплітуди параметра порядку a від ефективної температури q для $\acute{a}_$. Параметр $g = -10$

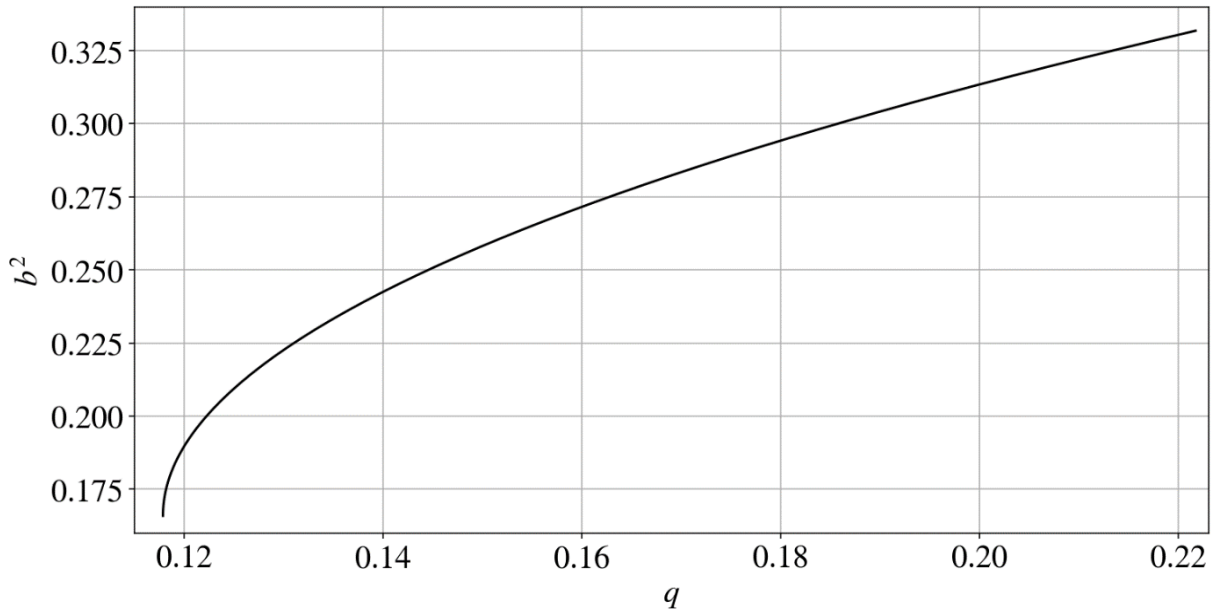


Рисунок 4.14 – Залежність параметра b від ефективної температури q для $\acute{a}_$. Параметр $g = -10$

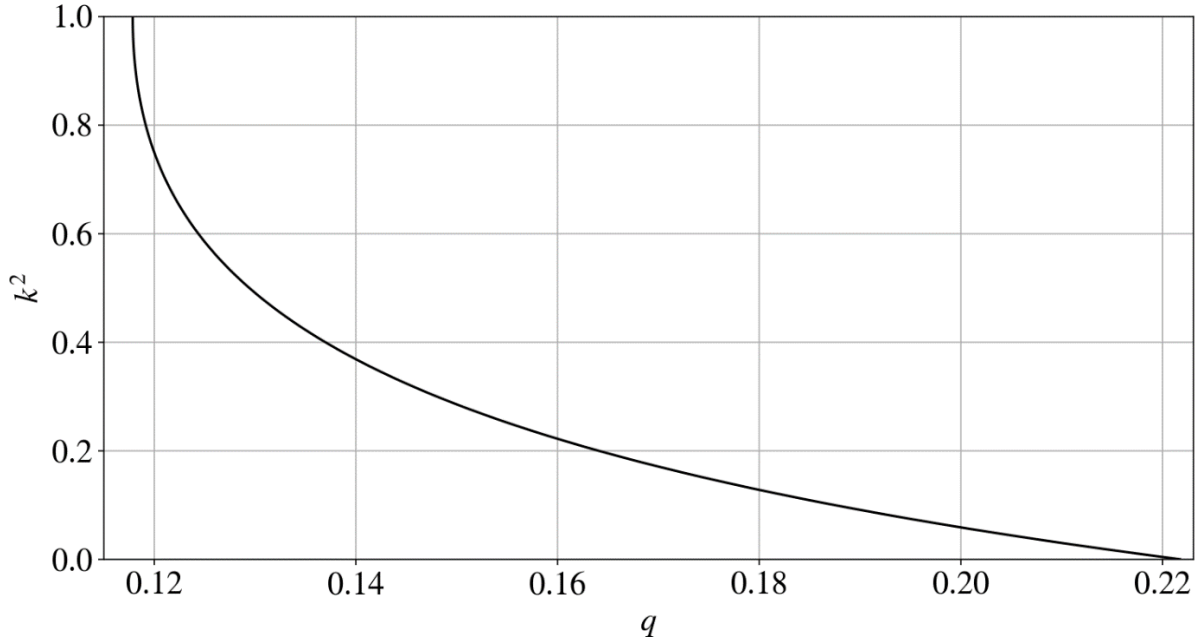


Рисунок 4.15 – Залежність еліптичного модуля k від ефективної температури q для $\acute{a}_-$. Параметр $g = -10$

На противагу цьому, у граничному випадку $\acute{a}_-$, коли параметр g прямує до мінус-нескінченності (Рисунки 4.13–4.15), система повертається до передбачуваного режиму, але на відміну від гілки $\acute{a}_+$, де параметр b^2 прямував до нуля, а максимум параметра a^2 приймає постійне значення 0.75, тут навпаки амплітуда параметру порядку a^2 поступово прямує до нуля, а значення параметра b^2 стабілізується у діапазоні від 1/4 до 1/2. При цьому температурний інтервал існування модульованого стану розширюється, займаючи проміжок від 0 до 1/4, що забезпечує максимальну термічну витривалість структури.

Також необхідно зазначити, що На початкових етапах аналізу, що охоплюють Рисунки 4.1–4.9, спостерігається класична монотонна (на початку майже лінійна) еволюція, де при зростанні ефективної температури q параметри a^2 та k^2 демонструють стабільне збільшення, тоді як базова мода b^2 монотонно згасає. Однак при переході до результатів, представлених на Рисунках 4.10–4.15, характер відгуку системи якісно змінюється на протилежний, де параметри a^2 та k^2 монотонно зростають уже при зменшенні температури, що супроводжується аналогічним падінням параметра b^2.

Таким чином, уся сукупність представлених графіків показує, що варіація константи g дозволяє ефективно маніпулювати як амплітудним профілем розв'язків, так і напрямком їхньої температурної еволюції.

Збільшення параметра $p > 0$ якісно еквівалентно зменшенню $|g|$, при цьому дійсні розв'язки будуть тільки для гілки $\acute{a}_-$ при $g^2 > 50/3$.

Виконані розрахунки показують, що якщо таки покласти $g > 0$ (при цьому необхідно врахувати φ^6 -член, тобто $h = 1$, для обмеженості термодинамічного потенціалу знизу) період модуляції одержуваних варіюваних розв'язків (4.1) зменшується зі зниженням ефективної температури q , що суперечить експериментально спостережуваній картині. Іншими словами, область $g > 0,\ h = 1$ не відповідає випадку періодичних просторово неоднорідних станів у, наприклад, сегнетоелектриках.

Обговоримо фізичні аспекти отриманих результатів.

Проведені розрахунки підтверджують висновки якісного аналізу властивостей розподілу (4.1) [49]. Результати обчислень узгоджуються також з основними висновками, зробленими в рамках одногармонічного підходу $\varphi(x) = a \cdot sin(bx)$ [87, 164].

Разом з тим, варіюване розподілення (4.1) дає більш глибокий мінімум термодинамічного потенціалу, ніж одногармонічне наближення і точне sn-розв'язку. При цьому воно також повніше і коректніше описує нелінійні властивості систем зі скалярним параметром порядку. Так, експериментальні дані [48] і гармонійний аналіз [87] показують, що в таких системах сильно пригнічені вищі гармоніки ПП. Цей висновок безпосередньо випливає з властивостей розподілу (4.32).

Далі, фазовий перехід у сумірну фазу в розглянутих системах є переходом першого роду [19, 25, 42]. Зростання $|g|$ робить цей перехід все більш схожим на перехід другого роду [87]. У моделі (4.32) це означає наступне. Збільшення $|g|$ призводить до зменшенню $b^2 \to 0$ (гілка $\acute{a}_+$). При цьому поблизу точки переходу q_1 період модуляції різко зростає. Залежність параметра порядку від координати набуває вигляду областей сумірності $\varphi =$

$\pm\varphi_0 \approx const$, розділених відносно вузькими межами. У межі $k^2 = 1$ перехід у сумірну фазу може відбуватися фактично безперервно. Така поведінка аналогічна властивостям відомих рішень теорії систем з двокомпонентним параметром порядку [141].

Для гілки ж $\acute{a}_-$ збільшення $|g|$ призводить до зменшення амплітуди параметру порядку $a^2 \to 0$. Це значить, що даний стан дуже сильно пригнічується.

Зі сказаного випливає також, що модель (4.32) при досить великому відносному внеску нелокальної нелінійної взаємодії $g(\varphi\varphi')^2$ принципово дозволяє описувати мультисолітонні стани в системах, симетрія яких не допускає існування інваріантів Ліфшиця. Разом з тим, навіть при $k^2 \approx 1$ істотно нелінійна поведінка розподілу (4.32) проявляється лише у відносно вузькій околиці точки переходу q_1 . Відзначимо також, що в проведеному дослідженні не було виявлено петлеподібної (зворотної) поведінки термодинамічного потенціалу для варіюваного рішення (4.32) поблизу точки переходу в сумірну фазу, як це має місце для систем з двокомпонентним параметром порядку [19]. Можливо, така поведінка проявляється в околиці q_1 меншій, ніж точність виконаних розрахунків.

Особливістю моделі (4.32) є інший, порівняно з одногармонічним підходом, механізм зміни періоду модуляції. Рівноважний період модуляції для розподілу (4.32) визначається не тільки величиною параметра b , але й значенням модуля k. При цьому в одногармонічному наближенні температурна залежність хвильового числа b має місце тільки при наявності ненульового g-члена: $g \neq 0$. Навпаки, істотно нелінійний характер моделі (4.32) дозволяє врахувати залежність періоду модуляції параметра порядку від температури і при відсутності даного інваріанта, тобто при $g = 0$. В результаті, обмеження, що накладаються на величину параметра g, в моделі (4.32) є слабшими, ніж в рамках одногармонічного підходу, що відповідно розширює можливості теорії в плані опису властивостей просторово неоднорідних станів в системах з однокомпонентним параметром порядку.

4.1.2. Умови існування кінк-солітонних рішень

Розглянемо умови, за яких ВДР (3.3) допускає існування кінк-подібних солітонних рішень виду:

$$\varphi(x) \xrightarrow[x\to\pm\infty]{} \pm a + b\exp(\mp\lambda x), \tag{4.19}$$

де a, b, λ є дійсними параметрами. При $a \neq 0$ отримуємо кінк-подібну асимптотику.

Підставляючи (4.19) у ВДР (3.3) і залишаючи члени того ж порядку малості, що і в (4.19), отримуємо:

$$a^4 + pa^2 + q = 0, \lambda^4 + (\gamma + ga^2)\lambda^2 + q + 3pa^2 + 5a^4 = 0. \tag{4.20}$$

Вважаючи, що значення параметра a відповідає стабільному стану, тобто дорівнює амплітуді параметра порядку в сумірній фазі, отримуємо:

$$a^2 = \frac{1}{2}\left[\sqrt{p^2 - 4q} - p\right],$$

$$\lambda^2 = \frac{1}{2}\left[-(\gamma + ga^2) \pm \sqrt{(\gamma + ga^2)^2 - 4(q + 3pa^2 + 5a^4)}\right], \tag{4.21}$$

$$q + 3pa^2 + 5a^4 \geq 0\,,$$

де нерівність забезпечує стабільність сумірної фази.

Умова дійсності для $\lambda,\ a$ дає:

$$\gamma + ga^2 < 0, (\gamma + ga^2)^2 - 4(q + 3pa^2 + 5a^4) \geq 0. \tag{4.22}$$

Таким чином, при $g < 0$ можуть існувати кінк-солітонних рішення ВДР даної задачі.

У простішій ситуації, коли $p > 0$ і інваріантом $\sim\varphi^6$ можна знехтувати, вираз для a^2 має форму $a^2 = -q/p$. Тоді перша нерівність в (4.22) набуває вигляду:

$$\gamma - |g|\frac{|q|}{p} < 0 \quad \Rightarrow \quad |q| > \frac{\gamma p}{|g|}. \tag{4.23}$$

Іншими словами, чим більше $|g|$, тим менше стає граничне значення $|q_k| = \gamma p/|g|$.

4.2. Розподіли ПП, що виражаються через еліптичний косинус Якобі

Перспективним підходом до дослідження просторової неоднорідності системи є пошук часткових точних розв'язків відповідного варіаційного рівняння у класі функцій Якобі. Зокрема, для опису періодичних структур доцільно представити просторову залежність параметра порядку через еліптичний косинус Якобі [83]:

$$\varphi = a * cn(bx, k), \tag{4.24}$$

еліптичний косинус та дельта-амплітуда дозволяє описувати послідовну еволюцію параметру порядку від $\varphi = 0$ до $\varphi = const$. Також просторовий розподіл дозволяє розглядати розподіл в широкому діапазоні — від чистих гармонічних коливань ($k \to 0$) до періодичної послідовності локалізованих белл-солітонів ($k \to 1$).

Шляхом підстановки передбачуваного розв'язку (4.24) у вихідне диференціальне рівняння (3.3) та проведення відповідних алгебраїчних перетворень, отримуємо замкнену систему нелінійних алгебраїчних рівнянь відносно амплітуди a, хвильового вектора b та модуля k:

$$\begin{cases} a^4 - 3ga^2b^2k^2 + 24b^4k^4 = 0 \\ b^4(20k^2 - 40k^4) + 2ga^2b^2(2k^2 - 1) - 2\gamma b^2k^2 + pa^2 = 0 \\ b^4(16k^4 - 16k^2 + 1) + ga^2b^2(1 - k^2) + \gamma b^2(2k^2 - 1) + q = 0 \end{cases} \tag{4.25}$$

Аналітичні розв'язки отриманої системи (4.25) для ключових параметрів структури набувають такого вигляду:

$$a^2 = \acute{a}_{\pm}{}^2 k^2 b^2, \tag{4.26}$$

$$b^2 = \frac{\xi\sigma}{2(2k^2 - 1)}, \tag{4.27}$$

$$k^2 = \frac{1 \pm \sqrt{D}}{2}, \tag{4.28}$$

де введено такі допоміжні параметри:

$$\acute{a}_{\pm}{}^2 = \frac{3}{2}\left(g \pm \sqrt{g^2 - \frac{32}{3}}\right), \tag{4.29}$$

$$\xi = 2\gamma - p\acute{a}_{\pm}{}^{2}, \tag{4.30}$$

$$\frac{1}{\sigma} = g\acute{a}_{\pm}{}^{2} - 10, \tag{4.31}$$

$$D = \frac{(2\sigma^2 - \sigma)\xi^2}{(6\sigma^2 - \sigma)\xi^2 + 8\gamma\sigma\xi + 16q}. \tag{4.32}$$

Слід зауважити, що функціональна залежність квадрата амплітуди (4.26) формально подібна до отриманої раніше для розв’язку еліптичного синуса (4.5), проте суттєва відмінність полягає у структурі коефіцієнта $\acute{a}_{\pm}^{2}$. З аналізу виразу (4.29) випливає, що дійсні значення амплітуди існують лише за умови при додатньої нелінійної взаємодії в системі, а саме при виконанні критерію:

$$g \geq \sqrt{\frac{32}{3}}. \tag{4.33}$$

Розглянемо граничний випадок слабкої нелінійності, коли модуль $k = 0$, що відповідає переходу до квазігармонічного режиму. За цієї умови третє рівняння системи (4.25) спрощується до вигляду:

$$b^4 - \gamma b^2 + q = 0 \tag{4.34}$$

з відповідним розв'язком для хвильового числа:

$$b^2 = \frac{\gamma \pm \sqrt{\gamma^2 - 4q}}{2} \tag{4.35}$$

Аналіз даної залежності вказує на існування критичної точки $q_c = \gamma^2/4$, у якій відбувається втрата стійкості високосиметричної фази та формування модульованої структури.

Особливий інтерес викликає топологічна стійкість розв’язків (4.28). Математична структура виразу для модуля k^2 обмежує його значення інтервалами [0, 1/2] або [1/2, 1]. Для того, щоб параметр k^2 міг неперервно приймати всі фізично допустимі значення в повному діапазоні [0, 1], необхідною є наявність точок, у яких дискримінант (4.32) звертається в нуль. Однак, як показує аналіз виразу (4.32), при довільних значеннях ефективної температури q величина $D \neq 0$. Єдиним винятком є випадок $\xi = 0$ (що відповідає значенню параметра $p = 2\gamma/\acute{a}^2$), за якого дискримінант стає рівним

нулю. Це свідчить про те, що зміна стану системи зазвичай супроводжується стрибкоподібною зміною параметру p (ξ), що є ознакою фазових переходів першого роду.

Особливістю досліджуваної системи є можливість реалізації фазового переходу першого роду, що протікає при сталій ефективній температурі. У цьому випадку зміна розв'язку відбувається шляхом неперервної варіації модуля в повному фізичному діапазоні $0 \le k^2 \le 1$. Для визначення температури такого переходу q_0 скористаємося умовою звернення в нуль дискримінанта (4.32), що призводить до наступного співвідношення:

$$\frac{\sigma^2 {\xi_0}^2 + 2\gamma\sigma\xi_0 + 4q_0}{(6\sigma^2 - \sigma){\xi_0}^2 + 8\gamma\sigma\xi_0 + 16q_0} = 0, \tag{4.36}$$

де ξ_0 позначає початкове значення параметра ξ, що відповідає зовнішньому впливу p_0. Шляхом алгебраїчних перетворень виразу (4.36) отримуємо аналітичну залежність для температури переходу:

$$q_0 = -\frac{\gamma\sigma\xi_0}{2} - \frac{\sigma^2 {\xi_0}^2}{4}. \tag{4.37}$$

Підстановка отриманого значення q_0 у вираз для дискримінанта (4.32) дозволяє переписати його у спрощеному вигляді, зручному для подальшого аналізу:

$$D = \frac{(2\sigma - 1)\xi^2}{(6\sigma - 1)\xi^2 + 8\gamma(\xi - \xi_0) - 4\sigma{\xi_0}^2}. \tag{4.38}$$

З урахуванням (4.37) та (4.38), вираз для хвильового вектора b^2, що визначає просторовий період структури, набуває вигляду:

$$b^2 = \frac{|\sigma|}{2}\sqrt{\frac{(6\sigma - 1)\xi^2 + 8\gamma(\xi - \xi_0) - 4\sigma{\xi_0}^2}{2\sigma - 1}}. \tag{4.39}$$

Фізично допустимі розв'язки існують лише у тому діапазоні значень ξ, де дискримінант D змінюється в межах [0, 1]. Виходячи з граничних умов $D(\xi_0) = D(\xi_{max}) = 1$ (4.40), встановлено інтервал значень керуючого параметра:

$$\xi \in \left[\xi_0, -\xi_0 - \frac{2\gamma}{\sigma}\right]. \tag{4.41}$$

Для забезпечення дійсності виразу (4.39) необхідно враховувати знаки структурних констант системи. Аналіз виявляє два фізично реалізованих випадки:

$$\begin{matrix} \xi_0 > 0,\ \sigma < 0 \\ \xi_0 < 0,\ \sigma > 0 \end{matrix}. \tag{4.42}$$

Детальніший розгляд ситуації при $\sigma > 0$ дозволяє виділити два випадки розвитку впорядкування залежно від величини параметра p_0:

$$\begin{matrix} p_0 > \frac{2\gamma}{á^2}\left(1 + \frac{1}{\sigma}\right) \Rightarrow 0 \le k^2 \le 1 \\ \frac{2\gamma}{á^2} \le p_0 \le \frac{2\gamma}{á^2}\left(1 + \frac{1}{\sigma}\right) \Rightarrow 0 \le k^2 \le k_{max}^2 < \frac{1}{2} \end{matrix}. \tag{4.43}$$

У першому випадку (4.43) реалізується повна топологічна трансформація розв’язку. У другому випадку область існування модульованої фази обмежена зверху значенням k_{max}^2, яке визначається з умови екстремуму дискримінанта (4.38). Точка екстремуму за параметром ξ набуває вигляду:

$$\xi_e = 2\xi_0 + \frac{\sigma\xi_0^2}{\gamma}. \tag{4.44}$$

Слід підкреслити критичну межу існування неоднорідних станів: за умови $\xi_0 = -\gamma/\sigma$ (що еквівалентно $-\xi_0 - 2\gamma/\sigma = \xi_0$), значення k_{max}^2 звертається в нуль. Це означає, що за таких параметрів системи модульована фаза не має області термодинамічної стійкості та не реалізується, а система переходить безпосередньо до однорідного стану.

Далі перейдемо до детального аналізу результатів чисельного моделювання залежностей основних характеристик досліджуваної системи. Для забезпечення репрезентативності розрахунків у всьому діапазоні значень покладемо параметр $\gamma = 1$. Особливу увагу приділимо критичному режиму, що відповідає значенню нелінійної взаємодії $g^2 = 32/3$ (або, відповідно до $\sigma = 1/6$). Вибір даної точки обумовлений тим, що вона є точкою злиття амплітудних гілок $á_+^2$ та $á_-^2$.

Нижче наведено результати розрахунків для випадку відносно слабкого зовнішнього впливу p_0 (Рисунки 4.16–4.18). Аналіз даних залежностей дозволяє простежити характер відгуку системи на зміну параметру p.

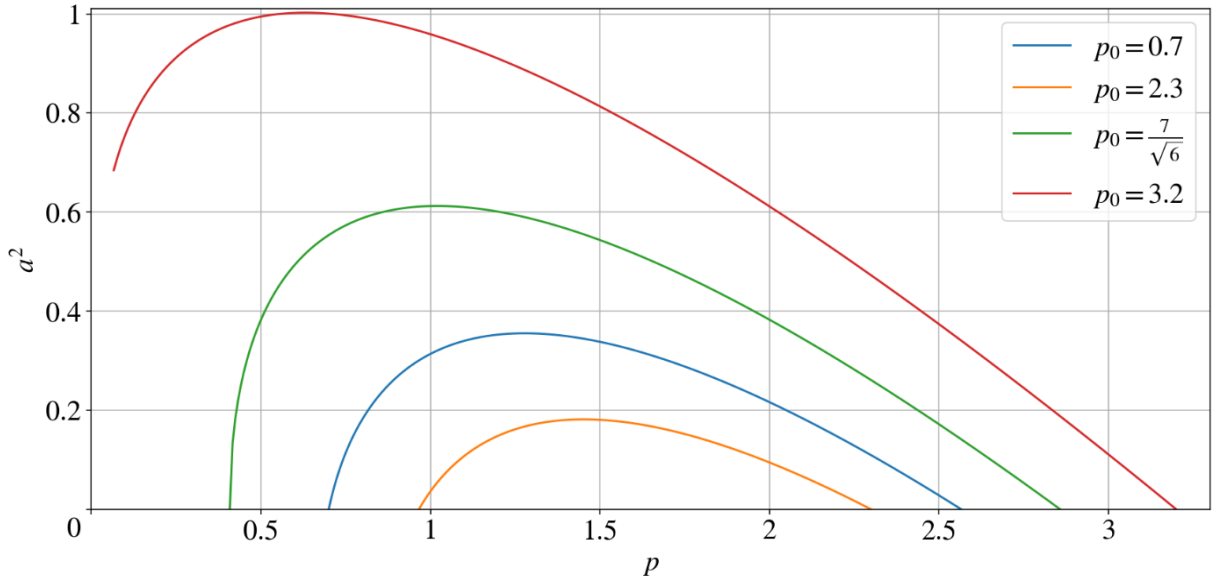


Рисунок 4.16 – Залежність амплітуди параметра порядку a за різних початкових значень p_0. Параметр $g = \sqrt{32/3}$

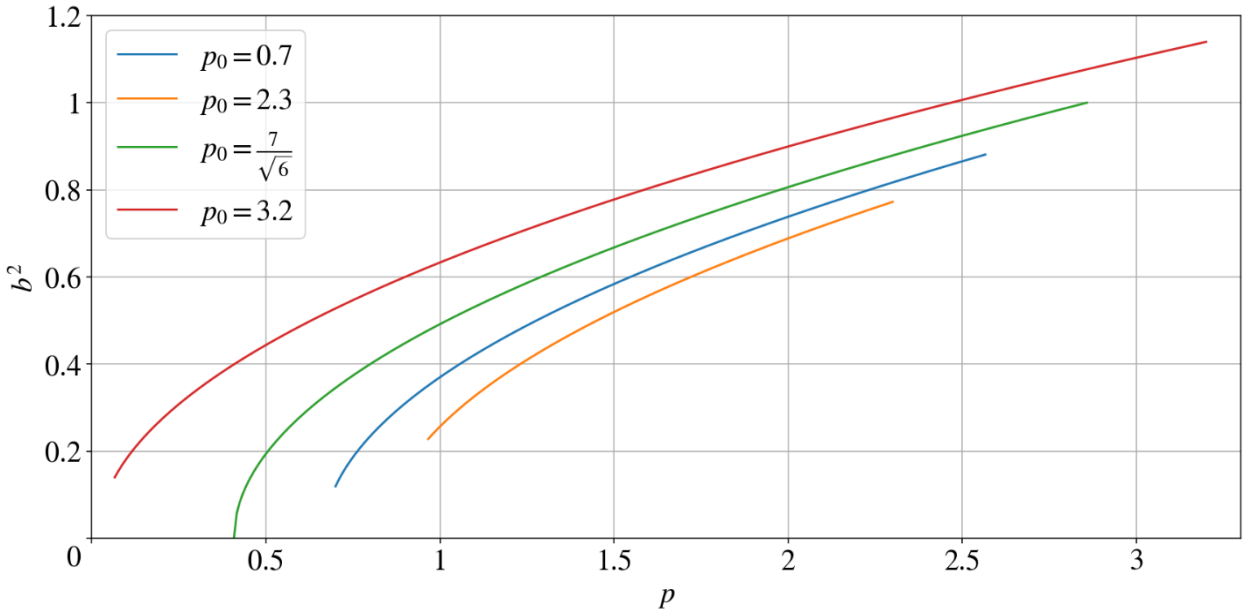


Рисунок 4.17 – Залежність параметра b за різних початкових значень p_0. Параметр $g = \sqrt{32/3}$

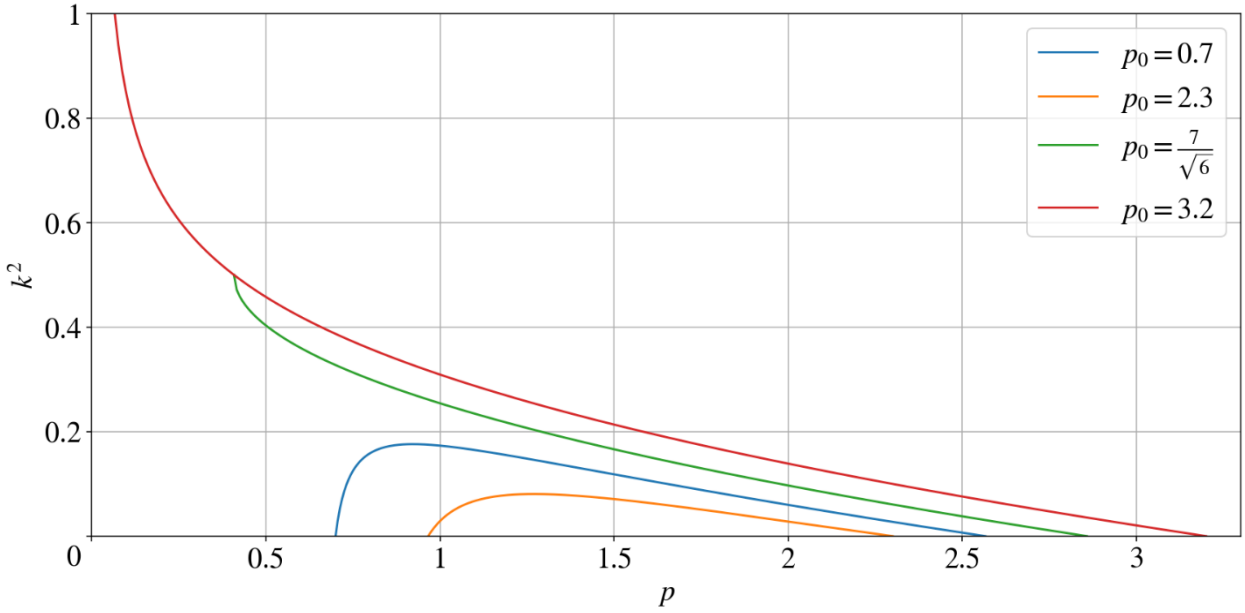


Рисунок 4.18 – Залежність еліптичного модуля k за різних початкових значень p_0. Параметр $g = \sqrt{32/3}$

У результаті чисельного дослідження встановлено, що динаміка просторових розподілів у для параметру $\sigma = 1/6$ суттєво залежить від того, у який інтервал значень потрапляє початковий параметр p_0:

- $\frac{1}{\sqrt{6}} < p_0 < \frac{4}{\sqrt{6}}$ – даний тип розв'язків характеризується тим, що при відхиленні параметра p від p_0 у бік збільшення, система демонструє стійкість періодичної структури. Незважаючи на варіацію параметру, кінцевий стан фази залишається модульованим. На графіках (синя крива) це відображається через плавне повернення модуля k^2 до гармонічного вигляду.
- $\frac{4}{\sqrt{6}} < p_0 \leq \frac{7}{\sqrt{6}}$ – для даного діапазону спостерігається зміна кінетики: стабільність модульованої фази забезпечується при зменшенні керуючого параметра p. Як видно з Рисунка 4.21 (зелена крива), система утворює граничний варіант умови (4.43).
- $p_0 > \frac{7}{\sqrt{6}}$ – у випадку високих значень початкового поля система переходить у критичний режим. При зменшенні параметра p модульована фаза втрачає свою періодичну стабільність і зазнає якісної трансформації. На Рисунку 4.21 (червона крива) чітко видно стрімке наближення еліптичного

модуля k^2 до одиниці. Це свідчить про те, що періодичні структури трансформуються у послідовність слабко пов'язаних солітонів.

Подальше розширення області чисельного аналізу для значень початкового поля p_0 дозволяє виявити нові закономірності у динаміці параметрів модуляції системи, що відображено на рисунках 4.19–4.20.

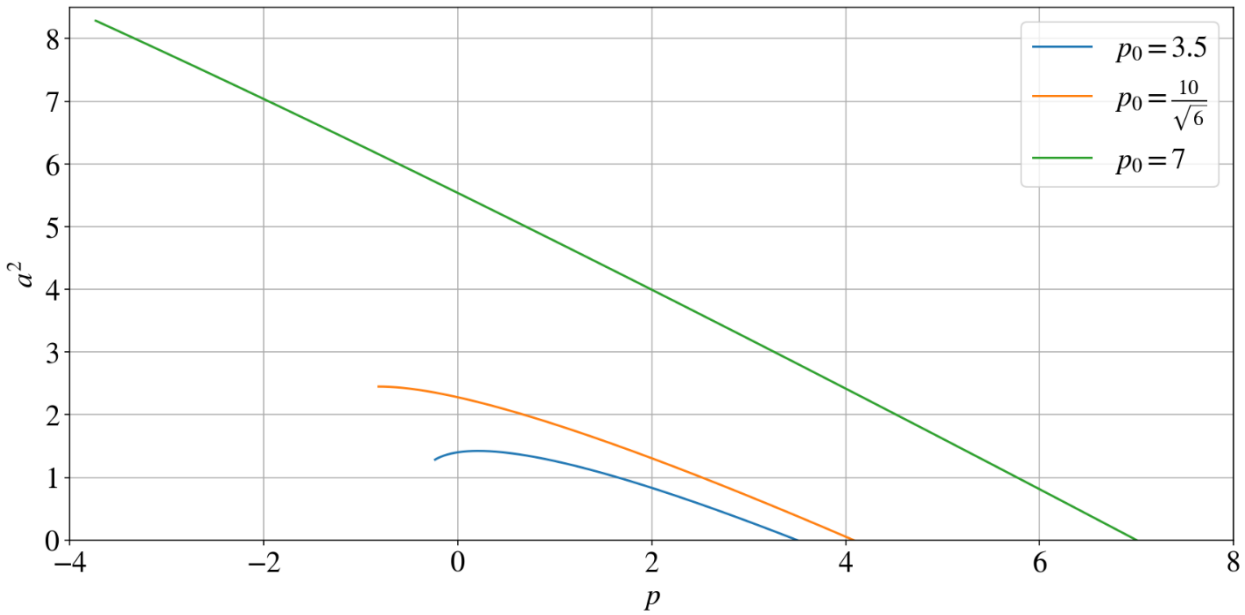


Рисунок 4.19 – Залежність амплітуди параметра порядку a за різних початкових значень p_0. Параметр $g = \sqrt{32/3}$

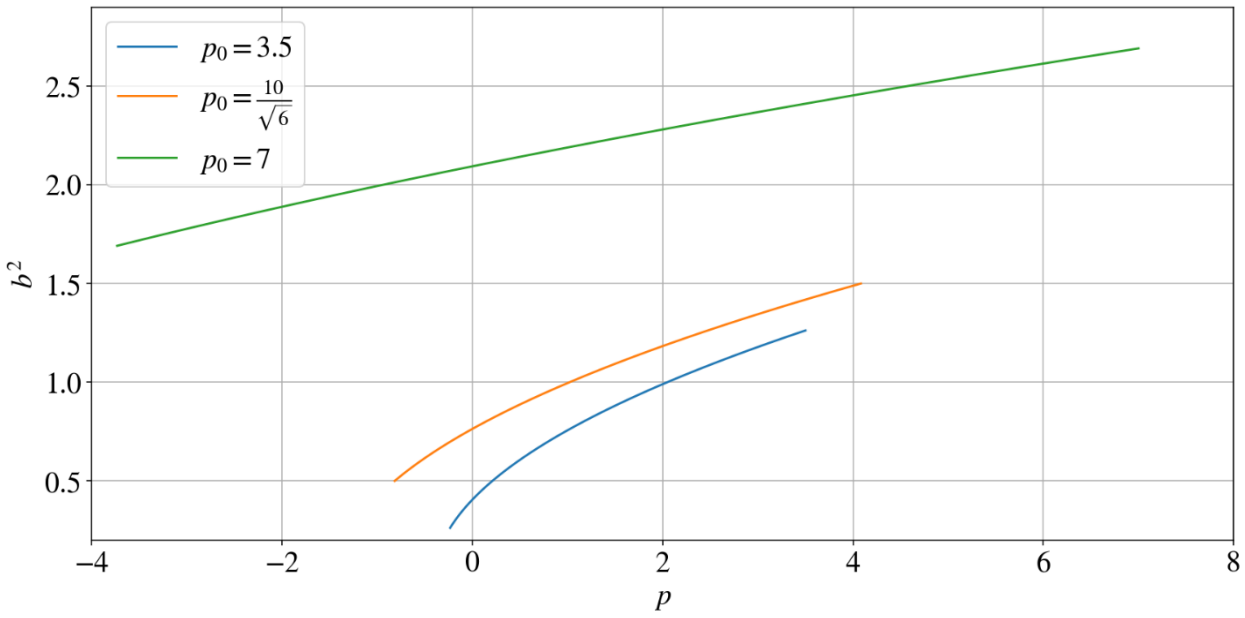


Рисунок 4.20 – Залежність параметра b за різних початкових значень p_0. Параметр $g = \sqrt{32/3}$

Ключовим спостереженням у цьому контексті є зміна положення точки екстремуму амплітуди a залежно від величини зовнішнього впливу. Встановлено, що при значеннях початкового параметра $p_0 < 10/\sqrt{6}$ максимальне значення амплітуди a досягається у внутрішній точці допустимого інтервалу варіації параметра p, тобто при $\xi < \xi_{max}$. Однак при $p_0 \geq 10/\sqrt{6}$ проявляється майже лінійне зростання квадрату амплітуди a^2 при відповідній зміні параметра p. Одночасно з цим параметр b^2, який відповідає за хвильове число структури, демонструє симетричне лінійне спадання. Такий характер еволюції свідчить про поступове розмивання нелінійних ефектів: незважаючи на високі значення амплітуди, система переходить у режим, де її структурні характеристики змінюються пропорційно інтенсивності зовнішнього впливу без різких топологічних стрибків. Фактично, за великих значень p_0 відбувається певна "лінеаризація" нелінійних розв'язків, при якій складні взаємодії між модами стають більш передбачуваними, а просторовий розподіл параметра порядку плавно деформується під дією поля.

Для завершення цілісної картини аналізу розглянемо випадок, коли система еволюціонує вздовж амплітудної гілки a'_+. У цьому режимі параметр σ набуває значень у діапазоні (0, 1/6). Проведене дослідження показує, що характер відгуку системи суттєво залежить від інтенсивності початкового значення p_0, причому при малих значеннях цього параметра поведінка кривих якісно повторює закономірності, виявлені для Рисунків 4.16–4.18. Однак при посиленні зовнішнього впливу виникає принципово нова фізична особливість, яка найбільш яскраво проявляється при відході від точки злиття гілок, наприклад, при $g^2 = 11$.

Ключовою відмінністю цього режиму є немонотонна поведінка гармонічної компоненти. Як демонструє Рисунок 4.22, при великих значеннях p_0 квадрат хвильового вектора ${b_+}^2$ перестає бути монотонною функцією і набуває вираженого мінімуму у внутрішній точці фазового інтервалу, тобто при $\xi < \xi_{max}$. Математично це пояснюється складною

залежністю в рівнянні (4.39), де за певної комбінації параметрів σ та g вплив знаменника починає домінувати над зростанням чисельника. З фізичної точки зору поява мінімуму на графіку b^2 (Рисунок 4.22) означає, що в процесі польової еволюції існує стан з максимально "розтягнутим" просторовим періодом, після подолання якого структура знову починає ущільнюватися.

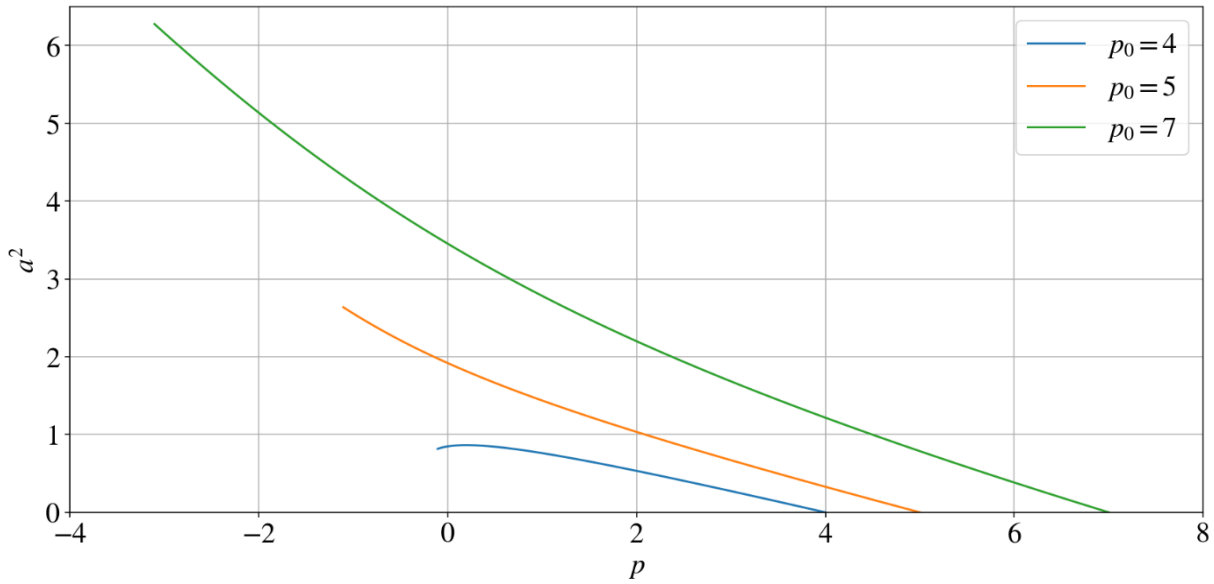


Рисунок 4.21 – Залежність амплітуди параметра порядку a за різних початкових значень p_0. Параметр $g = \sqrt{11}$, гілка $\acute{a}_+$

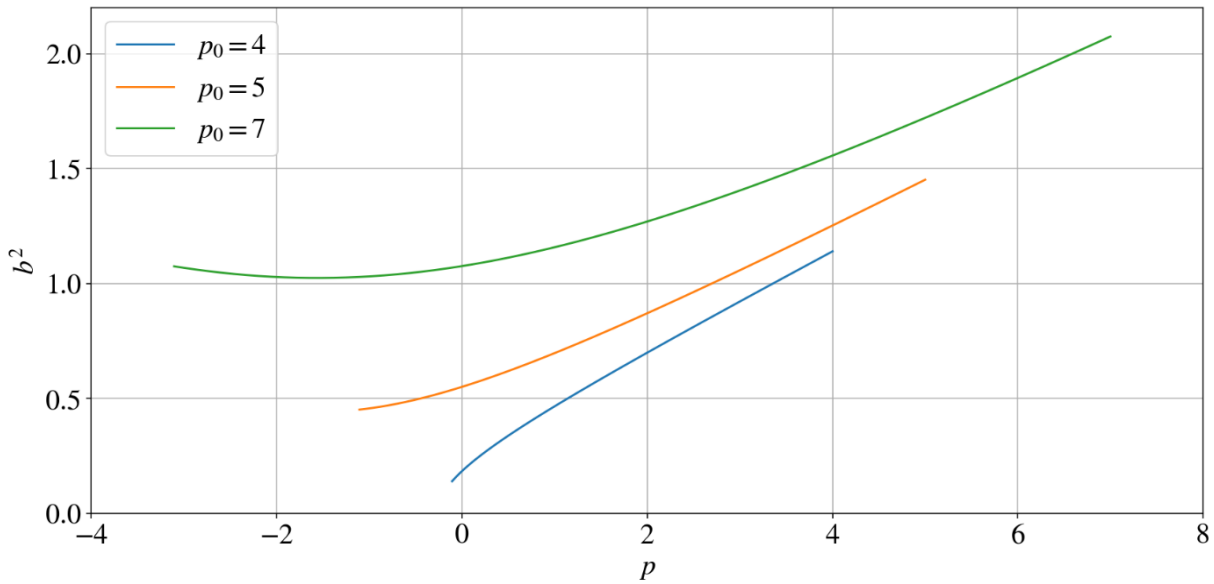


Рисунок 4.22 – Залежність параметра b за різних початкових значень p_0. Параметр $g = \sqrt{11}$, гілка $\acute{a}_+$

На відміну від критичного режиму $g^2 = 32/3$, де домінувала лінеаризація, тут ми спостерігаємо ефект "дихання" модульованої фази, коли

під дією поля p просторова решітка спочатку розширюється до певного межі, а потім знову стискається, зберігаючи при цьому свою нелінійну солітонну природу.

Аналіз гілки розв'язків a'_- дозволяє виявити інші режими просторової самоорганізації системи, оскільки у цьому випадку структурний параметр σ охоплює одразу три критичні діапазони: (1/6, 1/2), (1/2, $+\infty$) та ($-\infty$, $-1/2$).

Дослідження залежностей для випадку $g^2 = 11$ (Рисунки 4.23–4.24) демонструє принципову відмінність гілки a'_- від раніше розглянутої гілки a'_+. Ключовою особливістю тут є наявність чітко виражених внутрішніх максимумів для обох основних параметрів порядку. Зокрема, на Рисунку 4.24 видно, що квадрат b_-^2 досягає свого пікового значення у внутрішній точці допустимого діапазону $\xi < \xi_{max}$. Це свідчить про те, що при еволюції вздовж цієї гілки система проходить через стан з найменшим періодом, після чого подальша зміна параметру p призводить до зростання структури.

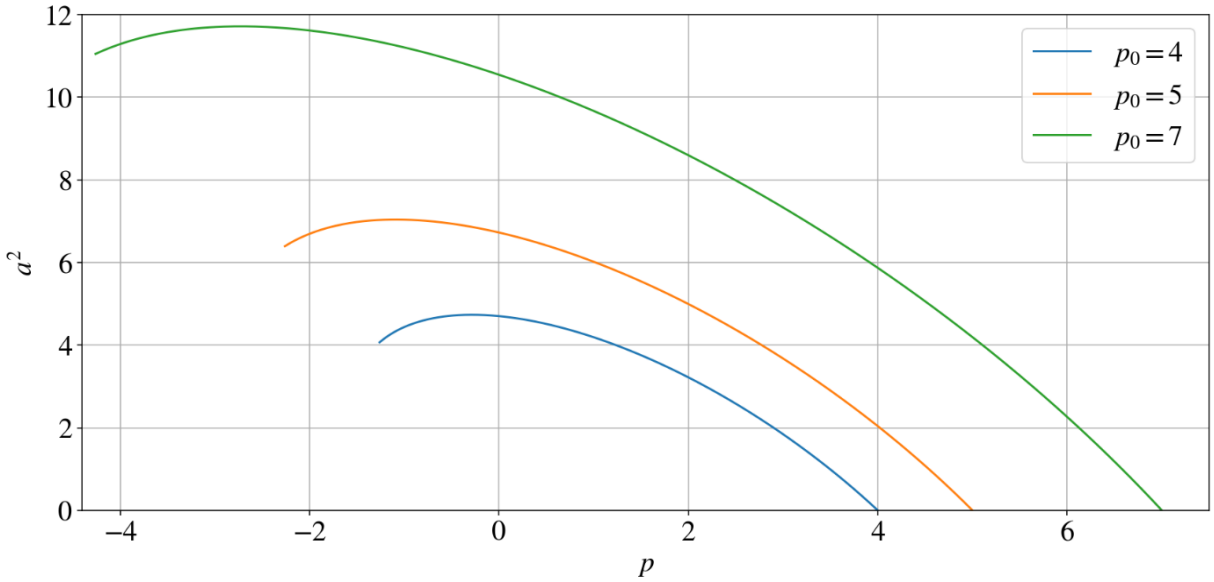


Рисунок 4.23 – Залежність амплітуди параметра порядку a за різних початкових значень p_0. Параметр $g = \sqrt{11}$, гілка a'_-

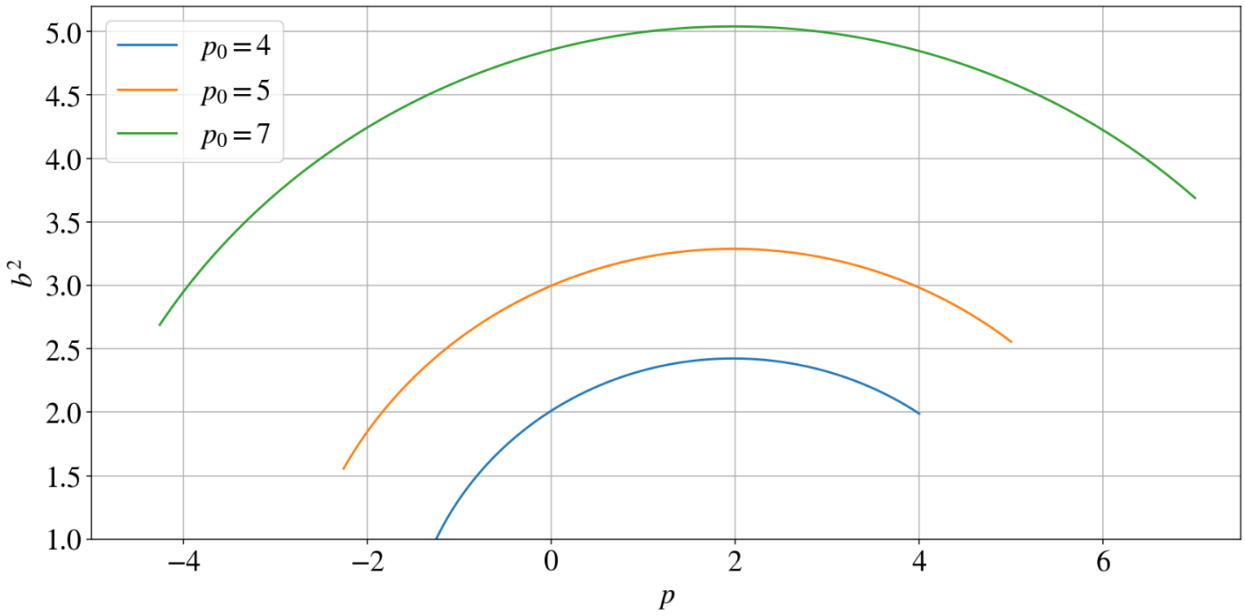


Рисунок 4.24 – Залежність параметра b за різних початкових значень p_0.

Параметр $g = \sqrt{11}$, гілка a'_-

Аналогічна немонотонна поведінка характерна і для амплітудного параметра a_-^2 (Рисунок 4.23). На відміну від випадків лінійного зростання, тут максимум амплітуди також локалізований при $\xi < \xi_{max}$. Це вказує на існування певного "оптимального" значення зовнішнього поля, за якого нелінійна відповідь системи є максимальною. Фізично це можна інтерпретувати як резонансне підсилення модульованої фази, де нелінійність g та параметр p створюють умови у яких термодинамічний потенціал (3.2) втрачає свою стабільність.

Дослідження гілки розв'язків a'_- у режимі сильної нелінійної взаємодії ($g^2 > 12$) дозволяє виявити фундаментальне обмеження на топологічну трансформацію системи. Встановлено, що за таких умов у фазовому просторі відсутні значення початкового значення p_0, які б дозволяли еліптичному модулю k^2 приймати повний спектр значень від 0 до 1. Це означає, що система фізично не може досягти чисто солітонної межі або повернутися до чисто гармонійного стану.

Аналіз динаміки системи при подальшому збільшенні константи взаємодії (наприклад, для $g = 4$ при зростанні параметру p згідно з Рисунки 4.25–4.27 та для $g = 5$ при зменшенні параметру p згідно з Рисунками

4.28–4.30) показує, що еліптичний модуль асимптотично прямує до фіксованого граничного значення. Математично ця межа визначається виключно структурним параметром σ і не залежить від амплітудних характеристик поля:

$$k^2 \to \left(1 - \sqrt{\frac{(2\sigma - 1)}{(6\sigma - 1)}}\right) \Big/ 2. \tag{4.45}$$

Це граничне значення (4.45) виступає в ролі «насичення» нелінійності. Фізично це означає, що при дуже великих значеннях g система стає настільки жорсткою, що параметр p вже не здатен радикально змінити профіль параметра порядку. Замість повної перебудови структури відбувається її стабілізація на певному рівні нелінійної модуляції, що робить такі розв'язки надзвичайно стійкими до зовнішніх збурень, але водночас обмеженими у можливостях фазової трансформації.

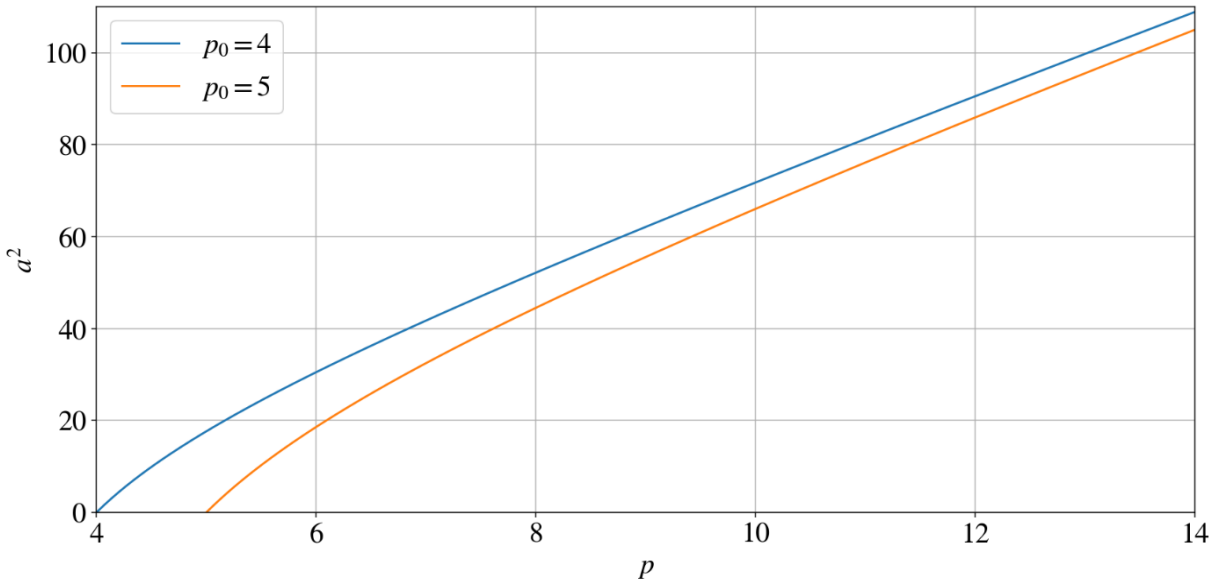


Рисунок 4.25 – Залежність амплітуди параметра порядку a за різних початкових значень p_0. Параметр $g = 4$, гілка a'_-

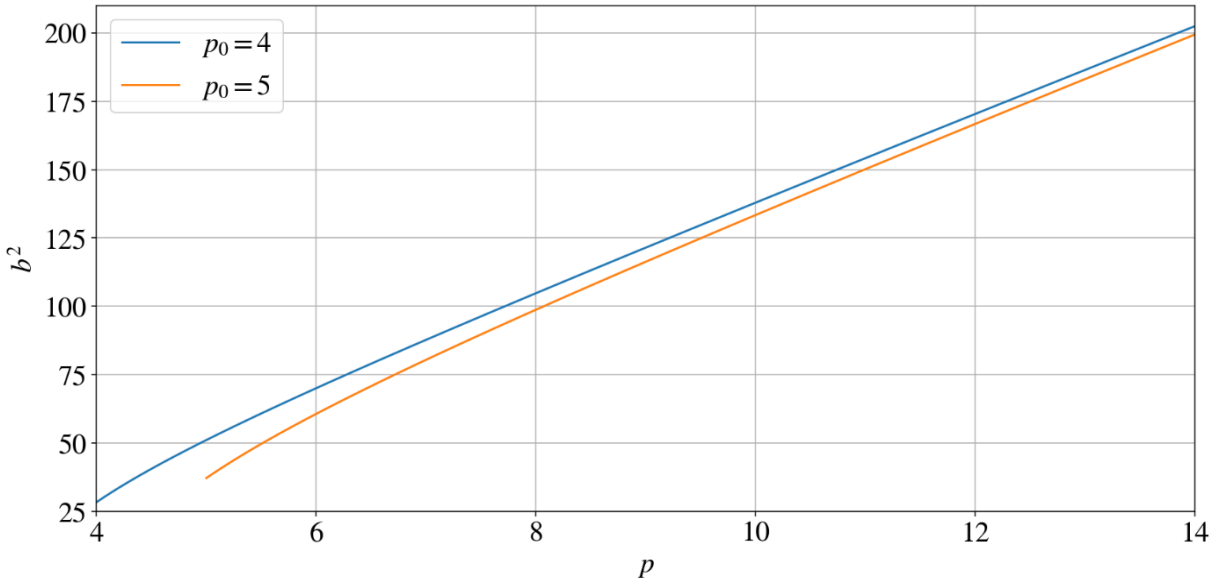


Рисунок 4.26 – Залежність параметра b за різних початкових значень p_0. Параметр $g = 4$, гілка $\acute{a}_-$

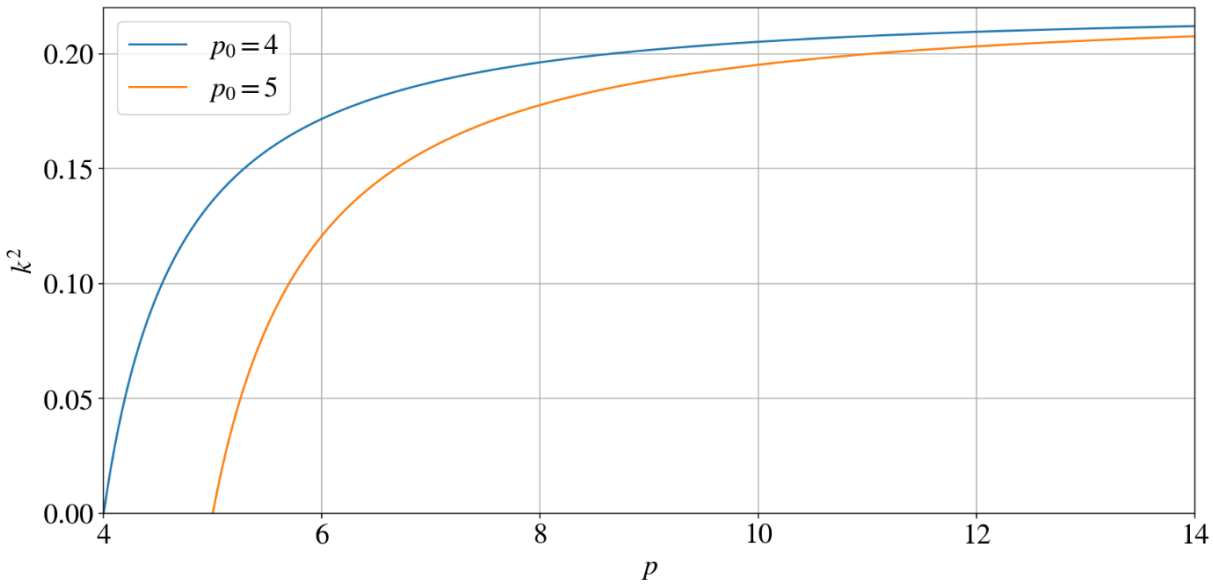


Рисунок 4.27 – Залежність еліптичного модуля k за різних початкових значень p_0. Параметр $g = 4$, гілка $\acute{a}_-$

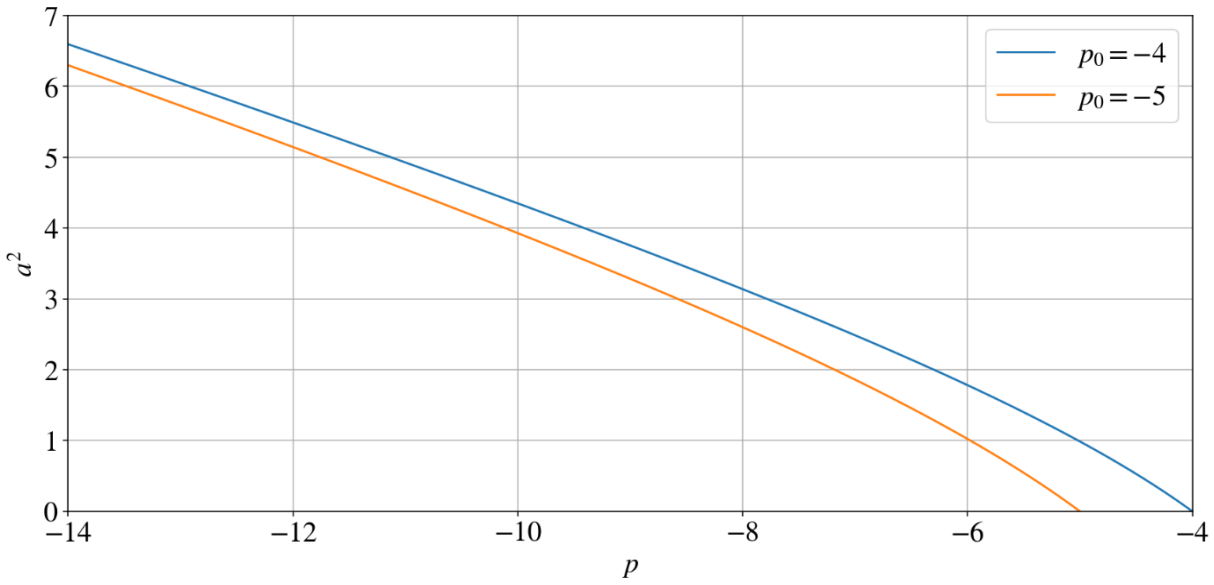


Рисунок 4.28 – Залежність амплітуди параметра порядку a за різних початкових значень p_0. Параметр $g = 5$, гілка $\acute{a}_-$

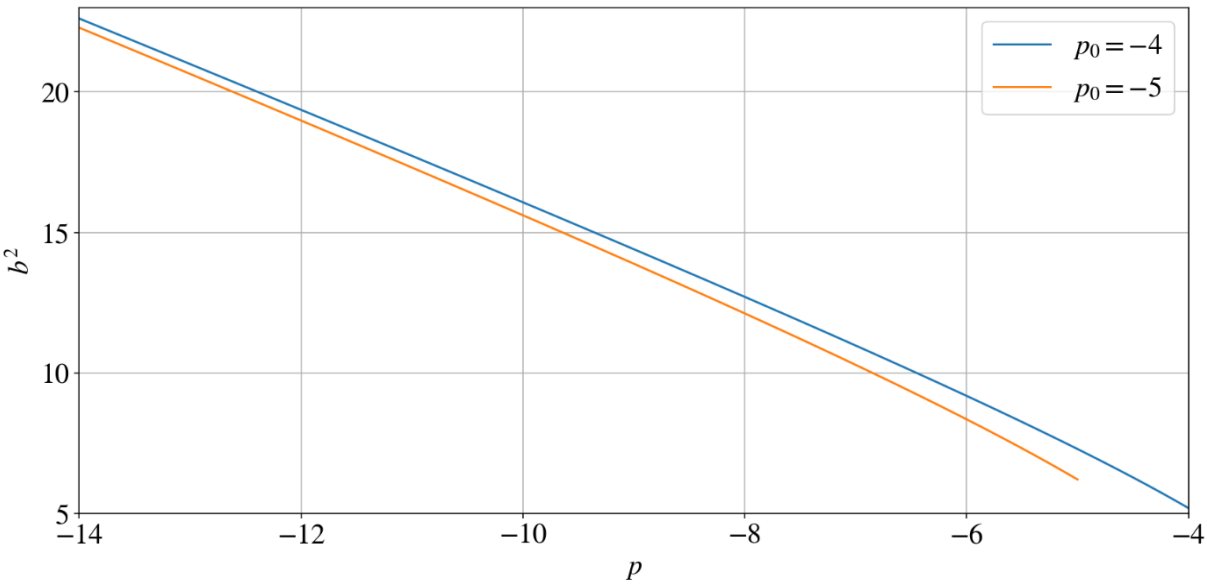


Рисунок 4.29 – Залежність параметра b за різних початкових значень p_0. Параметр $g = 5$, гілка $\acute{a}_-$

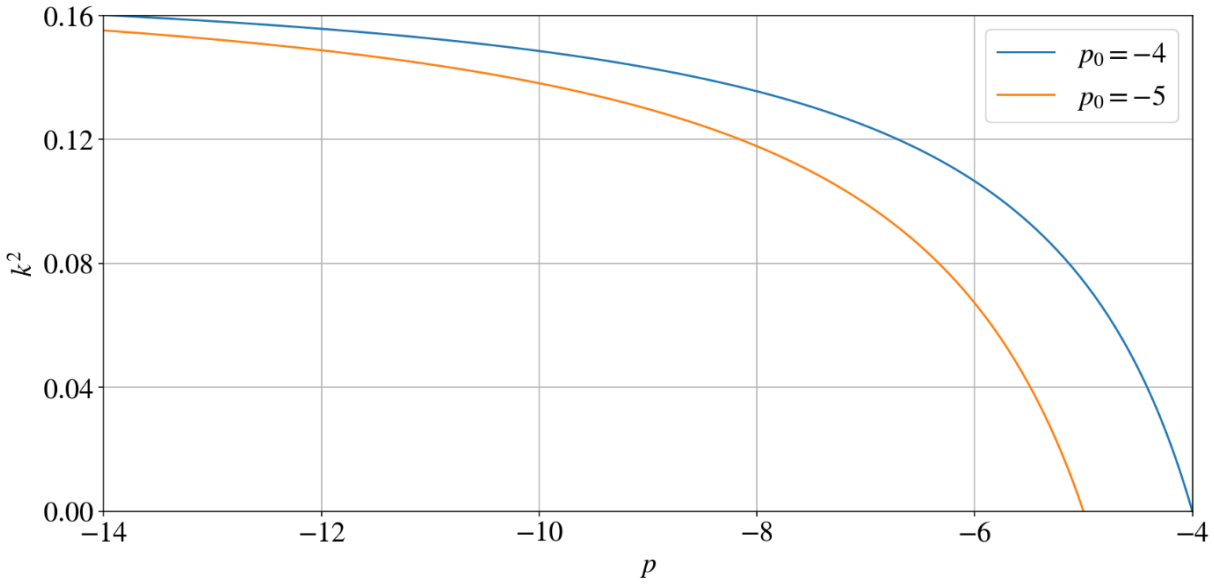


Рисунок 4.30 – Залежність еліптичного модуля k за різних початкових значень p_0. Параметр $g = 4$, гілка $\acute{a}_-$

4.3. Розподіли ПП, що виражаються через дельта-амплітуду Якобі

Наявність у системі (3.2) конкуруючих взаємодій зумовлює виникнення рівноважних просторово-модульованих станів. Традиційно несумірна фаза розглядається як просторово-збурений невпорядкований стан, де середнє за періодом значення параметра порядку дорівнює нулю:$< \phi(x) >_T = 0$. Проте особливістю даної моделі є можливість існування специфічного «rippled» [101] стану — полярної несумірної фази, для якої $< \phi(x) >_T \neq 0$

Для аналітичного опису такої фази доцільно використовувати розподіл параметра порядку у вигляді еліптичної функції Якобі dn (дельта-амплітуда) [148]:

$$(x) = a \cdot dn(bx, k). \qquad (4.46)$$

Ця функція дозволяє моделювати структури, що мають ненульову постійну складову, яка плавно деформується під впливом зовнішніх параметрів. Підстановка розподілу (4.46) у диференціальне рівняння для термодинамічного потенціалу (3.3) призводить до системи нелінійних алгебраїчних рівнянь:

$$\begin{cases} a^4 - 3ga^2b^2 + 24b^4 = 0 \\ b^4(20k^2 - 40) + 2ga^2b^2(2 - k^2) - 2\gamma b^2 + pa^2 = 0 \\ b^4(k^4 - 16k^2 + 16) + ga^2b^2(k^2 - 1) + \gamma b^2(2 - k^2) + q = 0 \end{cases}. \quad (4.47)$$

Аналітичні розв'язки отриманої системи (4.47) для ключових параметрів структури набувають такого вигляду:

$$a^2 = \acute{a}_{\pm}{}^2 b^2, \quad (4.48)$$

$$b^2 = \frac{\xi\sigma}{2(2 - k^2)}, \quad (4.49)$$

$$k^2 = \frac{\beta \pm \sqrt{\beta^2 - 4\alpha^2}}{2\alpha}, \quad (4.50)$$

де

$$\alpha = \sigma^2\xi^2 + 2\gamma\sigma\xi + 4q, \quad (4.51)$$

$$\beta = (6\sigma^2 - \sigma)\xi^2 + 8\gamma\sigma\xi + 16q. \quad (4.52)$$

а допоміжні параметри $\acute{a}_{\pm}{}^2$, ξ, σ можна знайти (4.29)-(4.31).

Граничний аналіз параметра нелінійності k^2 дозволяє визначити критичні точки фазових перетворень. У випадку $k^2 = 0$ (перехід до квазірівномірного стану) з рівняння (4.50) випливає умова $\beta = 0$, що дає критичну температуру:

$$q_0 = -\frac{\gamma\sigma\xi}{2} - \frac{(6\sigma^2 - \sigma)\xi^2}{16}. \quad (4.53)$$

Точка q_0 відповідає фазовому переходу другого роду у модульовану фазу. Інша границя, $k^2 = 1$, відповідає трансформації періодичної структури у послідовність белл-солітонів. Цей стан реалізується при $\alpha = 0$, що визначає температуру солітонної границі:

$$q_1 = -\frac{\gamma\sigma\xi}{2} - \frac{\sigma^2\xi^2}{4}. \quad (4.54)$$

Важливою структурною особливістю моделі є залежність термічного інтервалу існування фази від параметра σ. Встановлено, що характер температурної еволюції визначається знаком різниці між q_0 та q_1:

- Якщо $\sigma \in [0,1/2]$, то $q_0 > q_1$, що відповідає класичному сценарію охолодження.

- Для значень σ поза цим діапазоном спостерігається інверсія ($q_0 < q_1$), що вказує на можливість існування модульованої фази у специфічних режимах нагріву або при аномальних значеннях констант взаємодії.

Розгляд поступової еволюції системи за сценарієм високосиметрична — модульована — сумірна фаза (згідно з підрозділом 3.3.1) вимагає суворого узгодження топологічних характеристик на кожному етапі трансформації. Оскільки такий перехід передбачає неперервну зміну профілю параметра порядку — від еліптичного косинуса $cn(bx,k)$ до дельта-амплітуди $dn(bx,k)$, — критичні умови, встановлені для еліптичного синуса та косинуса, автоматично поширюються і на опис «rippled» стану.

Ключовим аспектом такої неперервної еволюції є вибір амплітудної гілки. Аналіз показує, що для забезпечення фізичної коректності та математичної неперервності переходу необхідно розглядати виключно гілку a'_+. Це зумовлено декількома чинниками:

- Тільки на гілці a'_+ структурний параметр σ набуває значень, що забезпечують стабільність модуля k^2 при переході між різними типами еліптичних розв'язків. Це дозволяє уникнути розривів у параметрі порядку при зміні симетрії решітки.
- Як було показано раніше, для гілки a'_+ виконується умова $q_0 > q_1$ (при $\sigma \in [0,1/2]$), що відповідає природному термічному сценарію виникнення модульованої структури з високосиметричного стану з її подальшою солітонною трансформацією.
- Гілка a'_+ описує стани, які плавно інтерполюють між гармонічним режимом ($k \to 0$) та режимом локалізованих збуджень, що є необхідною умовою для опису фаз, де середнє значення параметра порядку $< \phi(x) >_T$ починає відхилятися від нуля.

Таким чином, перехід до опису через дельта-амплітуду (4.46) не є ізольованим математичним актом, а виступає логічним продовженням еволюції системи, що розпочалася в рамках моделі еліптичного косинуса. Вибір гілки a'_+ гарантує, що умови існування розв'язків (4.33) та термічні

репери (4.52–4.54) утворюють єдину самоузгоджену схему фазових перетворень, що дозволяє детально описати виникнення несумірної фази як проміжного етапу перед повним впорядкуванням у сумірний стан.

Для опису безперервного процесу трансформації системи необхідно розглядати Рисунки 4.31–4.33 як логічне завершення фазової еволюції, початкові етапи якої були представлені на Рисунках 4.19–4.20. Якщо на попередніх етапах досліджувався відгук системи на зміну параметру p, то Рисунки 4.31–4.33 ілюструє термічну еволюцію вже сформованого впорядкування. Відповідно Рисунки 4.34–4.36 демонструє продовження Рисунків 4.21–4.22.

Головною відмінністю даного етапу є трансформація амплітуди: якщо в попередніх режимах параметр a демонстрував тенденцію до зростання, то на Рисунку 4.31 або Рисунку 4.34 спостерігається його монотонне спадання. Важливою особливістю є те, що при наближенні до критичної температурної межі амплітуда прямує не до нульового значення, а стабілізується на певному скінченному рівні, відмінному від нуля. Це безпосередньо вказує на збереження ненульового середнього значення параметра порядку $\langle \varphi(x) \rangle_T \neq 0$, що є фундаментальною ознакою несумірної фази.

Одночасно з цим, параметр b, що визначає просторову періодичність структури, продовжує свою монотонну спадну динаміку, розпочату на попередніх етапах еволюції. Таке узгоджене зменшення обох параметрів — амплітуди a та хвильового числа b — свідчить про поступове "розмивання" модульованої структури. Система плавно трансформується від щільно упакованої періодичної решітки до стану з великим просторовим періодом.

Як видно з Рисунків 4.31–4.36 при збільшенні модуля параметра g температурна область існування фази (4.46) звужується.

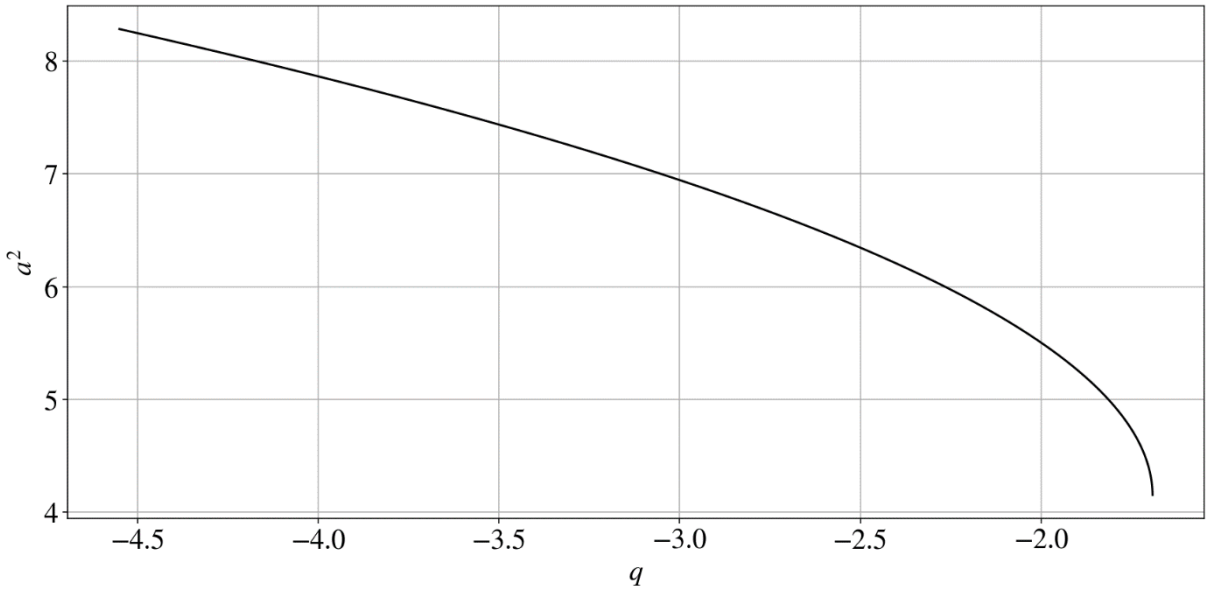


Рисунок 4.31 – Залежність амплітуди параметра порядку a від ефективної температури q при початковому значенні $p_0 = 7$. Параметр $g = \sqrt{32/3}$

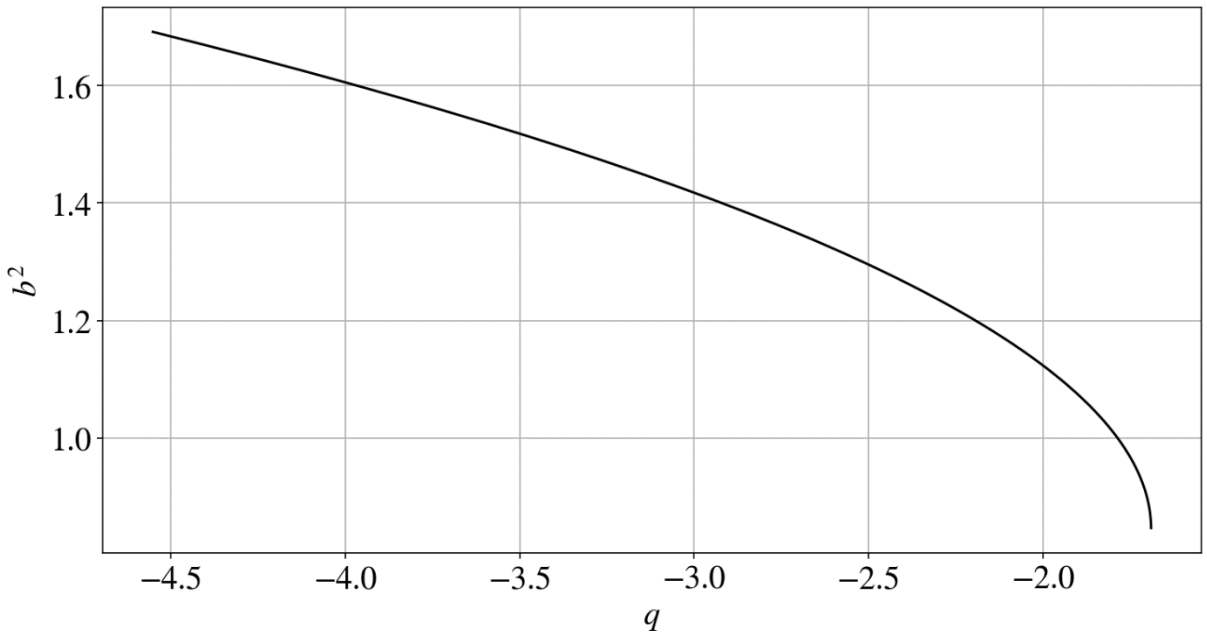


Рисунок 4.32 – Залежність параметру b від ефективної температури q при початковому значенні $p_0 = 7$. Параметр $g = \sqrt{32/3}$

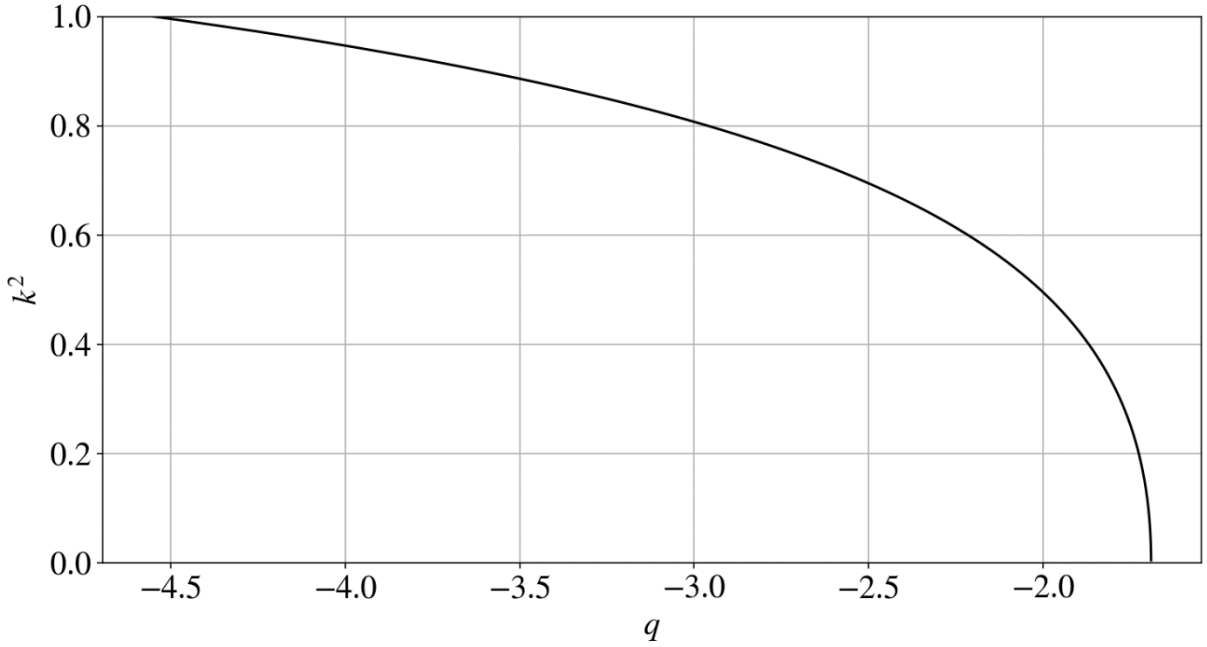


Рисунок 4.33 – Залежність еліптичного модуля k від ефективної температури q при початковому значенні $p_0 = 7$. Параметр $g = \sqrt{32/3}$

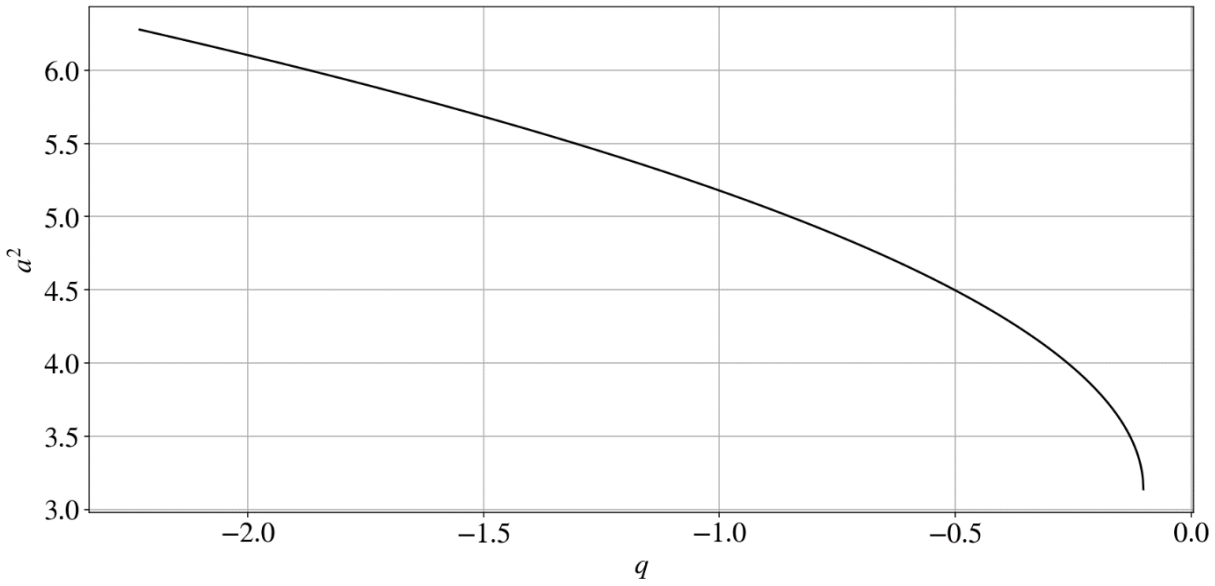


Рисунок 4.34 – Залежність амплітуди параметра порядку a від ефективної температури q при початковому значенні $p_0 = 7$. Параметр $g = \sqrt{11}$

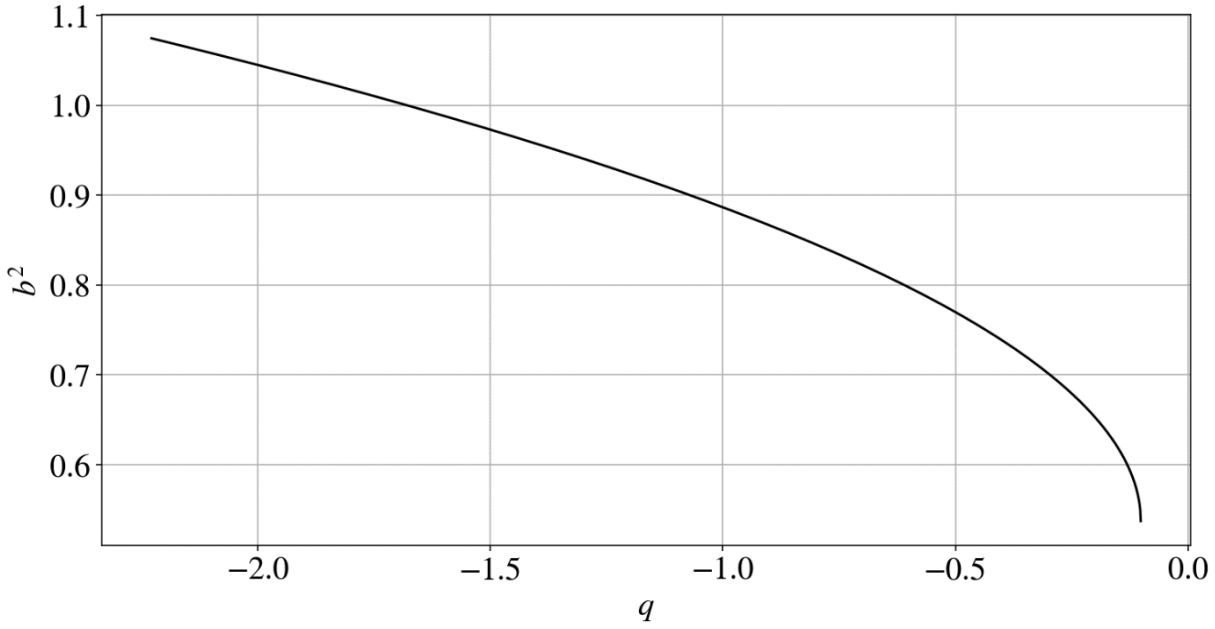


Рисунок 4.35 – Залежність параметру b від ефективної температури q при початковому значенні $p_0 = 7$. Параметр $g = \sqrt{11}$

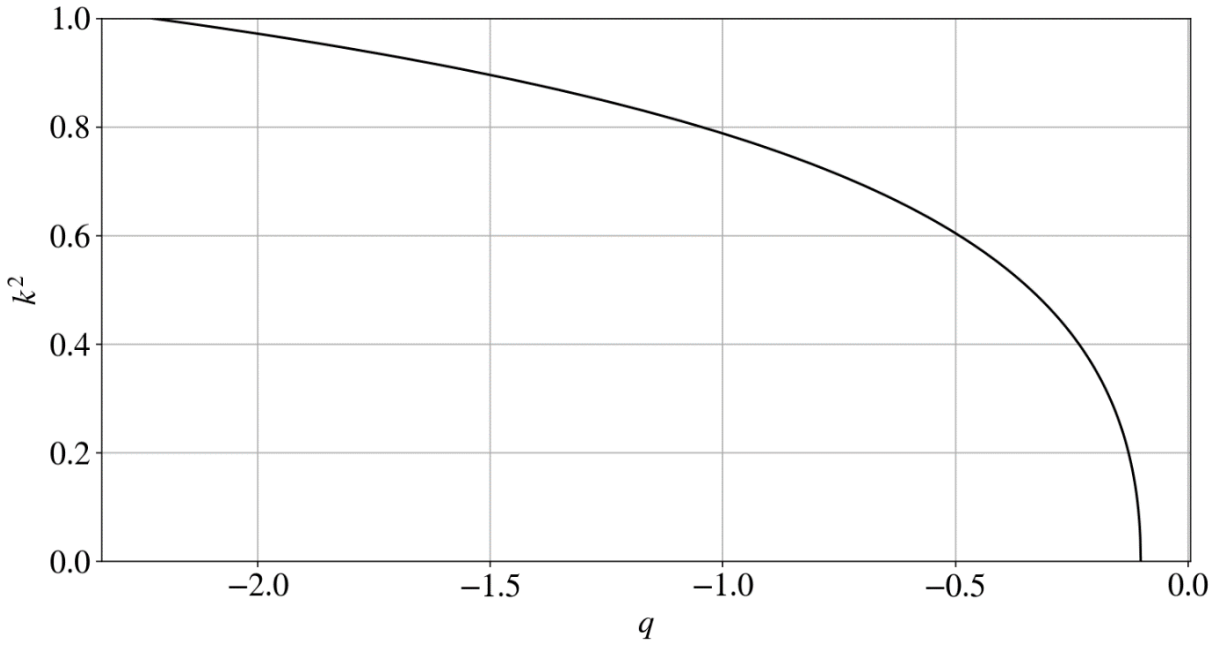


Рисунок 4.36 – Залежність еліптичного модуля k від ефективної температури q при початковому значенні $p_0 = 7$. Параметр $g = \sqrt{11}$

Таким чином, у сумірній фазі в області її метастабільності потенційно може існувати попередник − модульована фаза з постійною складовою параметра порядку (4.41).

Слід зазначити, що rippled стани в системах, що характеризуються термодинамічним потенціалом виду (3.2), описані також у працях [101], [165].

Однак у цих роботах у термодинамічному потенціалі враховувався додатковий інваріант$f \cdot (\varphi')^4$,$f > 0$. У наведеному вище аналізі подібний додатковий інваріант (і відповідно ще один параметр моделі) не вводився.

Висновки до розділу 4

1. Вивчено можливість опису рівноважних розподілів параметра порядку в несумірній фазі системи (3.2) для трьох видів розв'язків: еліптичного синуса $\varphi(x) = a \cdot sn(bx, k)$, еліптичного косинуса $\varphi(x) = a \cdot cn(bx, k)$ та дельта-амплітуди $\varphi(x) = a \cdot dn(bx, k)$, для яких коефіцієнти a, b, k визначаються шляхом мінімізації термодинамічного потенціалу (3.2).

2. Ключовим результатом дослідження є виявлення визначальної ролі амплітудних гілок $a'_{\pm}$ у формуванні сценарію фазової еволюції. Доведено, що гілка a'_{+} є фізично виділеною для опису неперервної трансформації структури, оскільки саме на ній структурний параметр σ набуває значень, що гарантують термодинамічну стабільність розв'язків. На цій гілці перехід від еліптичного косинуса до дельта-амплітуди відбувається без розриву параметрів порядку, що дозволяє системі плавно адаптувати свою просторову періодичність.

РОЗДІЛ 5. ФАЗОВІ ПЕРЕТВОРЕННЯ ТА ЕФЕКТИ ПОРУШЕННЯ СИМЕТРІЇ У МОЛІБДЕНОВОЇ МІШЕНІ ПІД ДІЄЮ КОНЦЕНТРОВАНИХ ПОТОКІВ ІОНІЗУЮЧОГО ВИПРОМІНЮВАННЯ

5.1. Фізична природа опромінюваної молібденової мішені

Опромінювані об’єкти є типовим прикладом відкритих систем, в яких при певній інтенсивності одержання ззовні енергетичного потоку можуть виникати дисипативні структури, що є проявом порушення симетрії. Для опромінення металів і сплавів концентрованими потоками іонізуючого випромінювання властиві як структурні фазові переходи, тверде тіло рідина, пар, так і явища виникнення просторово впорядкованих макроструктур. Ці ефекти мають певне прикладне значення, оскільки, як зазначалось в розділі 1.5 на прикладі молібдену.

Особливістю обробки металічних мішеней сильнострумовим релятивістським електронним пучком з параметрами: енергія електронів 350 кеВ, струм пучка 2кА, тривалість імпульсу 5 мкс є утворення складного рельєфу на поверхні. В результаті опромінення формується різномасштабна нерівність поверхні, для якої є властивими вигнутості, крупні краплі (масштабом в 1 мм), та менші за масштабом утворення (Рисунок 5.1). Слід зазначити, що за утворення вказаних фрагментів поверхні відповідальні різні механізми. Так, різна ступінь ерозії поверхні зумовлена нерівномірністю густини струму пучка в перетині і, відповідно, різною інтенсивністю випаровування речовини, що відслідковується при дослідженні динаміки розльоту газоплазмового факелу [166].

Опромінення сильнострумовим електронним пучком (СЕП) поверхні молібдену спричинило також утворення на ній впорядкованого хвилеподібного рельєфу з напівсферичними виступами (Рисунок 5.1). Формування такого рельєфу зумовлено перебігом низки процесів протягом дії імпульсу та наступного за ним відрізку часу, протягом якого відбувається

перехід речовини в тверду фазу з її охолодженням нижче температури твердотільних фазових перетворень.

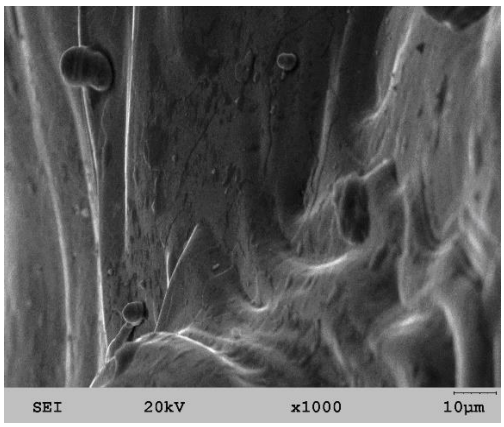


Рисунок 5.1 – СЕМ зображення ділянки опроміненої молібденової мішені

Оскільки густина потоку енергії становить близько 10^{12} Вт/см^2 і є достатньою для розплавлення мішені, правильно говорити виключно про радіаційно-термічні механізми в мішені, адже утворювані радіаційні дефекти типу міжвузловин і вакансій будуть анігілювати навіть в тій частині мішені, яка хоч і не була розплавленою, але значення температури на цій ділянці є для цього достатніми. Імпульсний радіаційний вплив спричинятиме перш за все генерацію механічних впливів, які будуть відбуватись через термопружний ефект та реактивну віддачу внаслідок абляційного викиду речовини [167]. Однією з причин нерівномірності затверділої після опромінення речовини є просторова неоднорідність внутрішніх напружень, зумовлених термопружним ефектом [168, 169], який призводить до того, що рух фронту кристалізації відбувається в умовах дії акустико-термічного імпульсу .

Поле впливу термопружного ефекту будемо визначати за виразом [131], [159]

$$\sigma(r,z,t) = \Gamma \cdot D(r,z,t), \tag{5.1}$$

де $\Gamma = \frac{\alpha}{\kappa \cdot c \cdot \rho}$ – коефіцієнт Грюнайзена, α коефіцієнт теплового розширення, κ – стисненість, α – питома теплоємність, ρ – густина, $D(r,z,t)$ – поглинена енергія випромінювання. Через симетричність відносно осі пучка розглядаємо циліндричні координати, нехтуючи азимутальною складовою. З огляду на те, що густина струму в перетині пучка є нерівномірною, одержимо і

нерівномірний розподіл поглиненої енергії випромінювання. Тривалість фронту імпульсу становить 5 мкс, протягом якого значення прискорюючої напруги та значення струму мають також імпульсний характер, що видно з осцилограми на Рисунку 5.2.

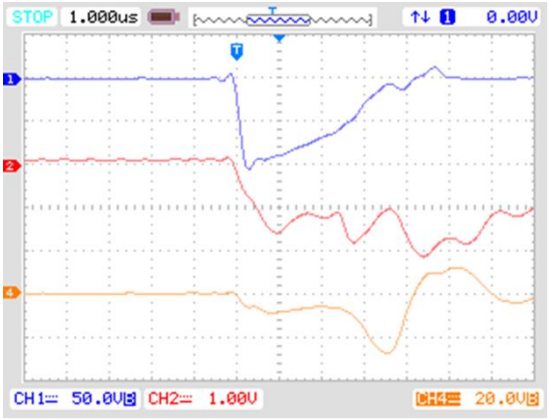


Рисунок 5.2 – Осцилограма імпульсу електронного пучка (верхня крива – прискорюючи напруга, середня крива значення струму пучка, нижня крива – загальний електричний струм діоду)

Отже маємо два джерела нерівномірності поля випромінювання: один зумовлений густиною струму пучка інший енергією частинок, що проникають в мішень, оскільки на різних стадіях розвитку імпульсу електрони починають взаємодіяти з продуктами абляційного викиду.

Виникнення імпульсних механічних впливів спричиняє хвилі стиснення-розрідження в глибині мішені, які при пониженні температури фіксують внутрішні напруження, що призводить, в тому числі, до вираженого розшарування на певній відстані від поверхні мішені (Рисунку 5.3).

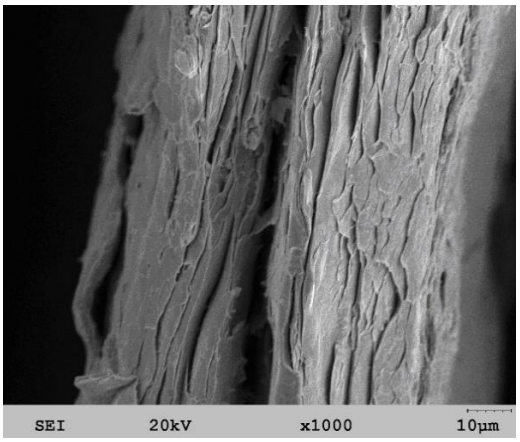


Рисунок 5.3 – СЕМ зображення зони вивільнення внутрішніх напружень

На Рисунку 5.4 показано фрактограми зламу приповерхневого шару мішені. Як видно, утворюються циліндричні пори та спостерігається витягнутість зерен вздовж напрямку формування внутрішніх напружень. Імпульси високого тиску також здатні спричинити зменшення періоду решітки, що підтверджувалось нами в роботі [170].

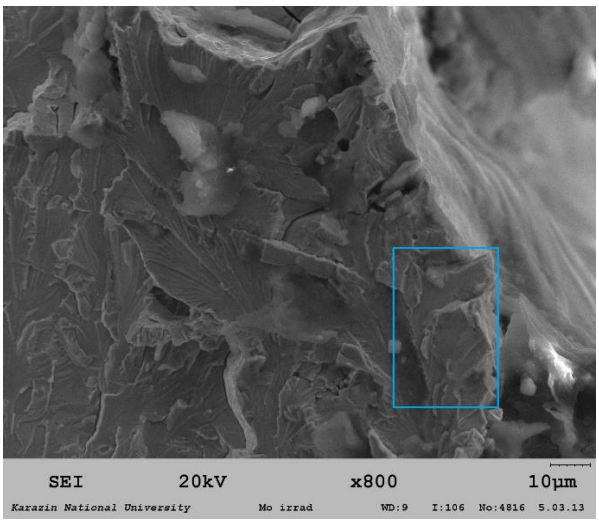


Рисунок 5.4 – СЕМ зображення ділянок зламу молібденової мішені в приповерхневій області

Утворення пор може бути зумовлено наявністю невеликої кількості легкоплавких домішок на поверхні, які мають більш низьку температуру розплавлення і утворюють локальні області перегрітої рідини, тиск в яких є недостатнім для порушення цілісності поверхневого шару. Порожнисті утворення так само будуть відбиватись на теплофізичних властивостях. У випадку, коли внутрішньої енергії локально розплавленої області достатньо для руйнування зовнішнього шару, виникають кратери, про що вказувалось в роботі [171].

Релаксація внутрішніх напружень, зумовлена зміною зеренної структури, також здатна утворювати деформаційних рельєф, про що йдеться в роботі [172, 173].

Таким чином динаміка температурного поля буде визначатись відводом тепла в глибину мішені, відводом тепла на периферію мішені, а також власне нерівномірністю густини струму пучка. Наявність температурного перепаду вздовж поверхні здатне призводити до виникнення нестійкості Марангоні, яка

спостерігається при впливі на поверхню металів концентрованих потоків енергії [40, 133], дана нестійкість є ще однією причиною виникнення нерівностей на поверхні мішені. Експериментальні та чисельні дослідження показують, що внаслідок дії сильно струмових пучків електронів на поверхні металів і сплавів утворюється поверхня зі складним рельєфом. Причому, якщо в роботі [174] шорсткість та нерівності спостерігаються при впливі сталого сильнострумового пучка, то в нашому випадку ми спостерігаємо явище складного рельєфу при дії імпульсного сильнострумового пучка. Прикладне значення з'ясування закономірностей виникнення рельєфу з певною модуляцією нерівностей є важливим для об'єктів з переважаючим радіаційним теплообміном. Так, можна очікувати, що при масштабі кривизни від 10 мкм і більше кут падіння потоку ІЧ випромінювання буде впливати на значення коефіцієнту відбиття випромінювання. При цьому важливість розуміння впливу особливостей форми сформованого рельєфу полягає в наступному. В умовах термоядерного реактора переважна частина теплообміну між плазмою і стінками реактора здійснюється в режимі радіаційного теплообміну. Неоднорідність теплових навантажень у початковому стані зумовлена неоднорідністю просторової густини плазми, але у випадку безпосереднього плазмового впливу на матеріали стінок відбувається зміна мікро та макроструктури, внаслідок чого змінюється значення коефіцієнту відбиття в ІЧ діапазоні. Це в свою чергу вже спричиняє неоднорідність розподілу температурних навантажень вже зумовлених станом поверхні першої стінки.

5.2. Мікроструктурні зміни та епітаксіальний ріст переплавленого шару

На Рисунку 5.5а. приведено вид поперечного перерізу пластини молібдену після обробки СЕП. Верхній шар на цьому рисунку був переплавлений дією СЕП. Середня глибина переплавленого шару складає приблизно 25-30 мкм. Як видно з Рисунка 5.5а переплалений шар складається із стовпчастих кристалітів, ширина яких складає від 5 до 12 мкм, а висота

відповідає майже всій вглибині переплавленого прошарку. На Рисунку 5.5b приведено збільшений фрагмент опроміненої поверхні. Як видно з цього рисунку, після обробки СЕП на поверхні мішені чіткість більшості границь зерен є досить очевидною навіть без травлення. Тобто після опромінення електронним пучком границі зерен проявлялись на закристалізованій поверхні без травлення. Ймовірно, поява границь зерен на опроміненій поверхні викликана надшвидким нагріванням та охолодженням при опроміненні електронним пучком. Слід зазначити, що розмір зерен на опроміненій поверхні в середньому співпадає з шириною стовбчастих кристалітів на Рисунку 5.5a. Про те, що мікроструктуру оброблених СЕП зразків можна спостерігати безпосередньо без процесу хімічного травлення, повідомлялося раніш в роботах [173, 175, 176].

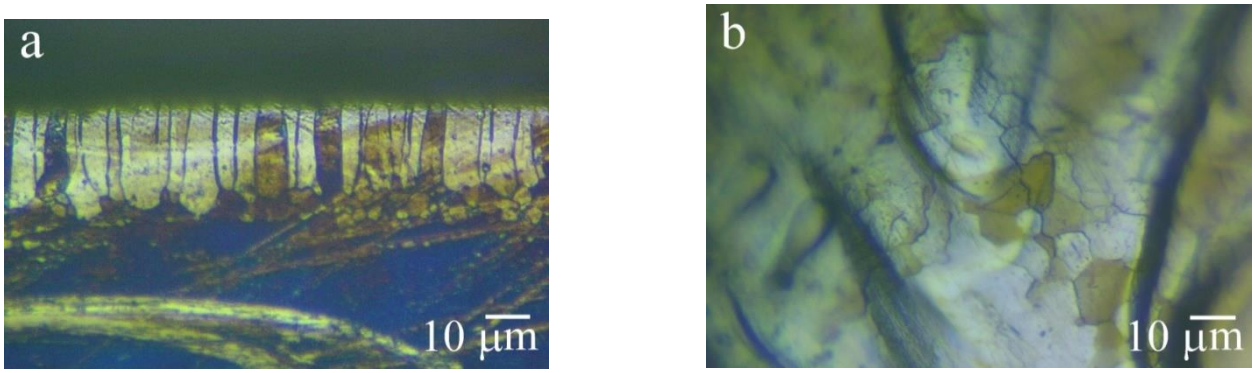


Рисунок 5.5 – Вид поперечного перерізу пластини молібдену в зоні обробки електронним пучком (a); вид опроміненої поверхні молібдену (b).

Оптична мікроскопія

Однією з особливостей обробки СЕП перед іншими звичайними методами обробки поверхні вважається утворення поверхневого модифікованого шару з субмікрокристалічною структурою, який має міцний металургійний зв’язок з непереплавленою частиною зразка (підкладкою) [177]. Загалом це явище зумовлене швидким застиганням розплавленого шару в умовах великого градієнту температур і високих тисків. Такі умови призводить до спрямованої кристалізації розплаву в нерівноважних умовах і можуть приводити до утворення дрібнокристалічних та навіть нанокристалічних і аморфних структур [170, 177-179]. Тобто, у поверхневому

переплавленому шарі в результаті дії імпульсного електронного опромінення створюються сприятливі умови для диспергування зеренної структури, навіть якщо матеріал мав у початковому стані крупнокристалічну зеренну структуру. При цьому утворення дрібнодисперсної зеренної структури після опромінення є характерним як для різноманітних сплавів, так і для чистих металів [180].

Однак таке подрібнення зерен в опроміненій зоні відбувається не завжди. Є ряд робіт [181, 182], де було показано, що після опромінення імпульсним електронним пучком у поверхневому обробленому опроміненням шарі формувалася досить крупнозериста мікроструктура. Утворення дуже великих зерен в переплавленому опроміненням шарі у роботах [181-183] авторами пояснюється з точки зору епітаксіального зростання розплавленої рідини з підкладки. Тобто вирощений епітаксіальний шар повторює структуру і кристалографічну орієнтацію підкладки. Для того, щоб відбулося таке епітаксіальне зростання, першочергово важливо уникнути зародження нових зерен на межі розділу тверда/рідка фаза під час затвердіння. Латеральний розмір цих зерен, що виросли епітаксіально, а також їх кристалографічна орієнтація безпосередньо успадковуються від їхніх підповерхневих попередників.

Оскільки для дослідження було обрано чистий молібден без домішок і розчинених газів, то кількість гетерогенних центрів для зародження зерен під час кристалізації є меншою, ніж для багатокомпонентних сплавів і сталей.

Ще один фактор, що може порушити процес епітаксіального росту зерен та спричинити зародження нових зерен є утворення поверхневих вивержених кратерів [180]. Однак яскраво виражених кратерних структур на опроміненій поверхні молібдена майже не спостерігається. Відсутність кратерів на опроміненій поверхні молібдену можна пояснити з точки зору механізму утворення кратерів, запропонованого в [171]. Згідно цього механізму кратери утворюються в процесі кристалізації через хімічну неоднорідність в шарі, що кристалізується. Оскільки молібден в цьому досліджені є досить чистим

металом, ймовірність хімічних неоднорідностей в розплавленому опромінення прошарку є дуже малою.

За результатами дифрактометричних досліджень на Рисунку 5.4a. наведено фрагмент дифрактограми зразка молібдену у початковому стані. Для оцінки можливої наявності кристалографічної текстури, відносні інтенсивності основних відбиттів були порівняні з тими, що вказані в базі даних JCPDS-ICDD [184], файл 42-1120, та відповідають матеріалу з випадково орієнтованими зернами.

Результати порівняння показують, що Mo, використаний у цих експериментах, відрізняється від еталону, тобто має певну кристалографічну текстуру. Зокрема, відносна інтенсивність піку {200} є значно більшою, ніж для еталону. Результати проведення рентгенівського аналізу молібдену після обробки НСРЕВ показані на Рисунку 5.4b. Порівняння дифрактограм на Рисунках 5.6a та 5.6b говорить про те, що ці дифрактограми не мають великих відмінностей, тобто є майже ідентичними. Таким чином, можна говорити про те, що кристалографічна текстура, яка була у початковому стані зразків молібдену, є такою ж і в переплавленому прошарку. Це може бути доказом того, що утворення стовбчастої зеренної мікроструктури в процесі кристалізації розплавленого опроміненням прошарку молібдену відбувалося за механізмом епітаксіального росту зерен.

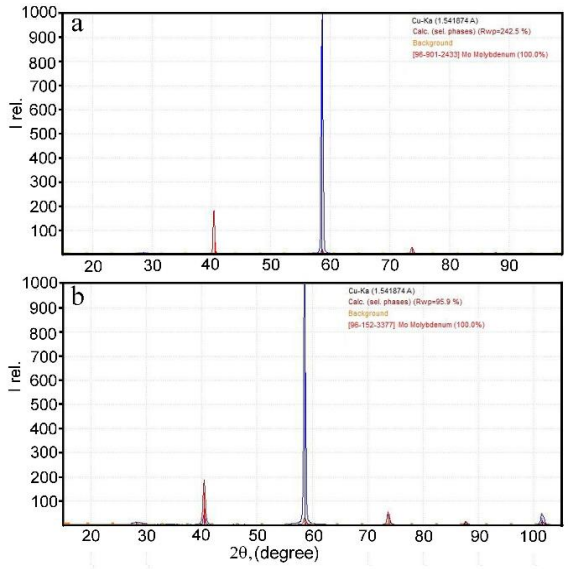


Рисунок 5.6 – Рентгенограми молібдену до (a) та після (b) опромінення НСЕВ

Також у переплавленому шарі спостерігається розширення піків молібдену. Це може бути викликане наявністю мікронапружень другого роду в мікроструктурі переплавленого шару.

Модифікуюча дія опромінення полягає у зміні фізико-технологічних властивостей поверхневого опроміненого шару. В цьому сенсі важливою характеристикою є мікротвердість обробленої опромінення поверхні. Як правило, зміна мікротвердості поверхневих прошарків металів і сплавів після обробки НСРЕВ є неоднозначною. Значення мікротвердості можуть залишатися незмінними, збільшуватися або зменшуватися [185, 186]. Така поведінка мікротвердості пояснюється процесами накопиченням точкових і лінійних дефектів і зміною фазового складу поверхні опроміненого матеріалу. У цьому дослідженні значення мікротвердості молібдену визначалися шляхом вимірювань на поперечних перерізах опроміненої дією СЕП пластини молібдену. Деякі відбитки індентора для вимірювання мікротвердості на поперечних перерізах пластини переплавленого прошарку молібдену наведено на Рисунках 5.7a,b, а на не переплавленій частині на Рисунку 5.7c.

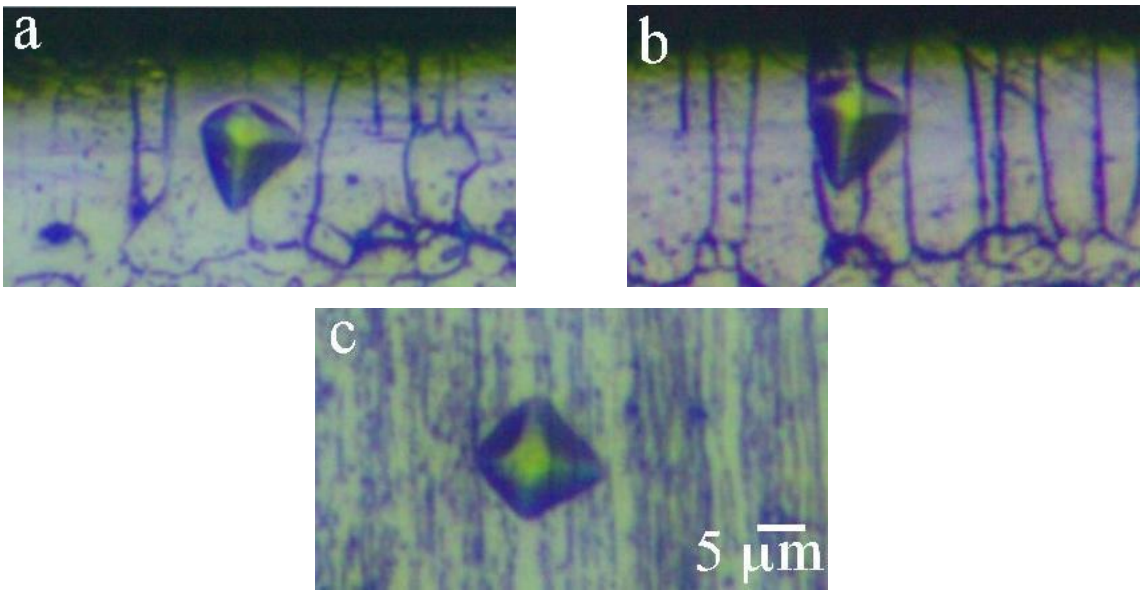


Рисунок 5.7 – Відбитки індентора для вимірювання мікротвердості на поперечних перерізах пластини молібдену: (a,b) - переплавлений прошарок; (c) – непереплавлена частина

Визначали середні значення мікротвердості по 10 вимірам. Встановлено, що мікротвердість молібдену у початковому стані становить величину 168HV. Мікротвердість модифікованого опроміненням прошарку молібдену дещо зросла і в середньому склала величину 180HV. Таким чином, встановлено, що в результаті впливу пучка відбувається зміцнення поверхневого прошарку молібдену, яке характеризується збільшенням його мікротвердості на 7% у порівнянні з початковим станом.

Одержані значення мікротвердості, як узагальнюючого параметра, який характеризує опір матеріалу локальній пластичній деформації, що виникає при зануренні в нього більш твердого тіла, містять дані про особливості внутрішньої будови матеріалу а також дозволяє робити висновки і про міцність та пластичність матеріалу. Пластична деформація при визначенні мікротвердості здійснюється в основному завдяки руху дислокацій. Коли дислокації зустрічають на своєму шляху перешкоду, їх ковзання вже не може бути продовжено таким же чином, як раніше. Чим більше перешкод для руху дислокацій буде в матеріалі, тим більші значення мікротвердості буде мати цей матеріал. За підвищення або зниження мікротвердості відповідальними є ряд механізмів – зернограничний, дисперсійний, твердорозчинний та дислокаційний. Оскільки досліджується чистий молібден, а до того ж в переплавленому прошарку не утворюється дрібнодисперсна зеренна структура, то підвищення мікротвердості можу бути зумовлене лише дислокаційним механізмом. Тобто перешкодою для руху дислокацій будуть лише інші дислокації. Так, надшвидке охолодження генерує інтенсивне поле напружень в прошарку, що кристалізується. Загалом, релаксація цих напружень може здійснюватися різними механізмами [187]. Але оскільки мова йде при чистий молібден, то основним з цих механізмів буде дислокаційне ковзання [188], завдяки якому густина дислокацій в переплавленому прошарку буде зростати, що і проявляється у збільшенні мікротвердості опроміненого прошарку молібдену. Окрім того додатковим чинником збільшення густини

дислокацій є ударно-хвильовий механізм, внаслідок якого порушується суцільність по товщині зразка, що видно як з Рисунка 5.3, так і з Рисунка 5.8.

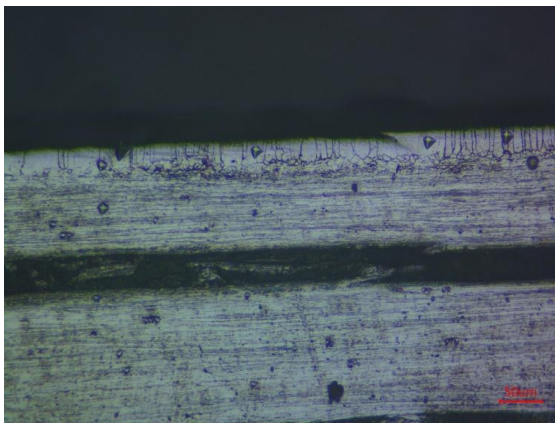
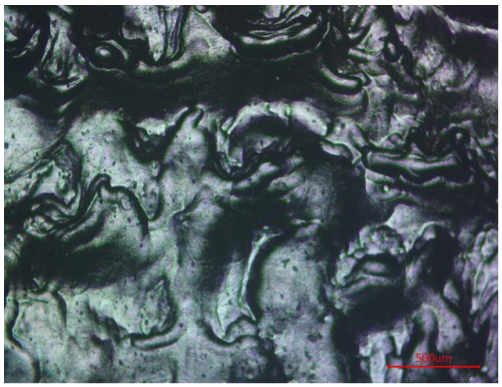
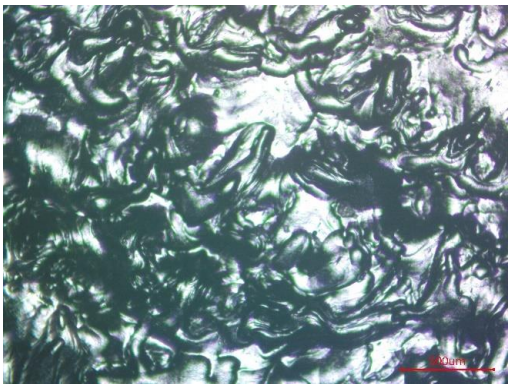


Рисунок 5.8 – Металографія поперечного шліфа молібденової мішені в зоні переплавляючої дії пучка та в зоні термічного і ударно-хвильового впливу

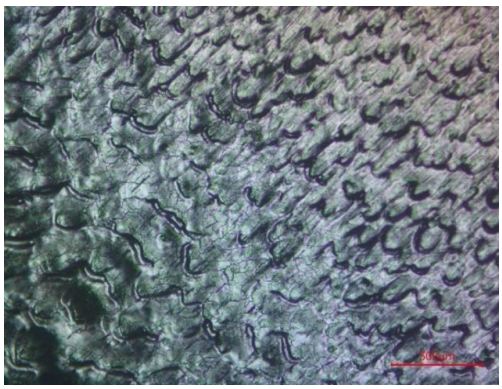
Звертає увагу хвилеподібний характер розподілу кривизни на поверхні мішені, який демонструє тренд до змін просторового періоду відтворюваності та розмірів впорядкованих структур (Рисунок 5.9). Інтенсивність опромінення зменшувалась від правого верхнього кута до нижнього лівого.



а)



б)



в)

Рисунок 5.9 – Панорамне зображення поверхні мішені. Оптична мікроскопія. (зверху вниз зменшення густини потоку випромінювання)

5.3. Моделювання температурних полів та аналіз нестійкостей

Очевидно, що це є «замороженим» відбитком перебігу нелінійних процесів в парорідинних фазах речовини, які утворились внаслідок опромінення. Розрахунок температурного поля проводився в рамках моделі нестаціонарного теплопереносу у циліндричній системі координат (2.1-2.2).

У даній моделі враховується лише густина $\rho(T)$, теплоємность $c(T)$ та $k(T)$ теплопровідність у твердому та рідкому станах. Процеси випаровування, абляції матеріалу з поверхні, а також радіаційні теплові втрати не розглядалися.

Поглинена енергія електронного пучка розподілялася по Гаусу, а розподіл поглиненої енергії електронного пучка (див. 2.1) за глибиною описувався узагальненою аналітичною апроксимацією, побудованою на основі теорії проникнення та енергетичних втрат електронів у твердих мішенях, запропонованої Kanaya та Okayama [189]. У рамках цієї теорії залежність поглиненої дози $Q(x)$ від нормованої глибини $x = z/z_m$ має вигляд:

$$Q(x) = \frac{1}{(1-x)^{2/5}} e^{-\frac{\gamma x}{1-x}} \left(\frac{\gamma}{1-x} + \frac{3}{5}\right) + 2.28 \frac{E_B}{E_0} \frac{\gamma}{(1-x)^2} e^{-\frac{1.9\gamma x}{1-x}} \times \left(\frac{1}{2^{5/6}} - (1-x)^{5/6}\right), \quad (5.1)$$

$$\gamma = z_m/z_D - 1, \quad (5.2)$$

де $z_D = 34$мкм — дифузійна глибина проникнення електронів, $z_m = 110$мкм — максимальна глибина проникнення електронів, знайдені експериментальним чином, а $E_B/E_0 = 0.7$ — співвідношення середньої енергії відбитих електронів до енергії первинних електронів, яке було взяте з [190].

Поглинання енергії вважалося рівномірним у межах радіуса дії пучка і рівномірним у часі протягом імпульсу тривалістю до 5мкс. При цьому потужність джерела нормувалася так, щоб інтегральна енергія, внесена у систему, відповідала добутку енергії електронів та струму пучка. Потужність розподілялася на об’єм дії пучка, що визначався радіусом пучка R та

максимальною глибиною проникнення електронів z_m. На Рисунку 5.10 наведено розрахункові дані просторового розподілу температури в певні моменти часу протягом дії імпульсу опромінення.

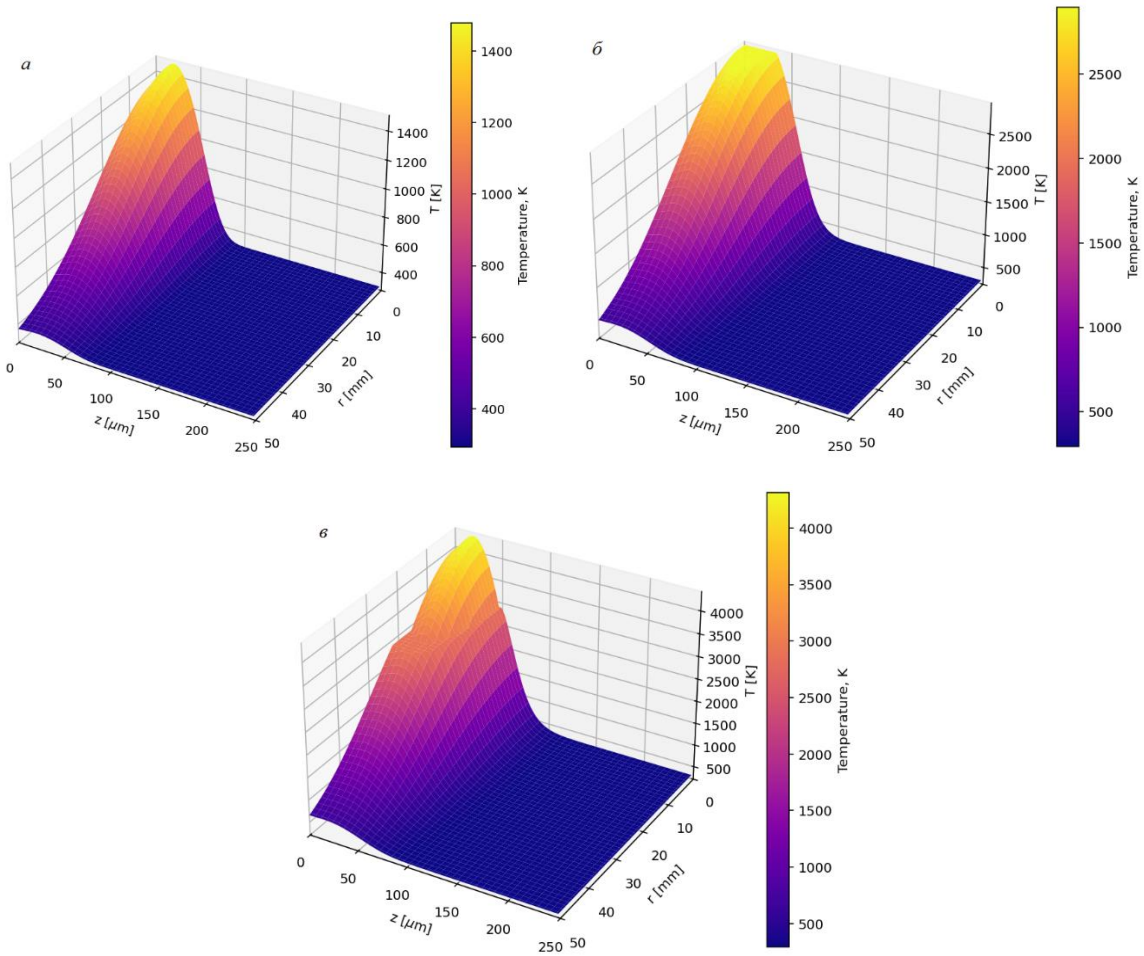


Рисунок 5.10 – Розподіл температури в мішені протягом дії імпульсу опромінення. (z - глибина мішені, r -радіус відносно осі пучка) в моменти часу: а) 1 мкс; б) 3 мкс; в) 5 мкс

Як бачимо з Рисунка 5.9, максимальне значення температури спостерігається в підповерхневому шарі, що стимулює рух речовини в напрямку до поверхні, в той же час має місце виразний градієнт від осі пучка до периферії, що здатно зумовити рух речовини по поверхні. Така ситуація приводить до виникнення конкуруючих процесів утворення дисипативних структур за різними механізмами нестійкості, ініціювання яких є різновидом фазових перетворень другого роду, що потребує окремого вивчення. Згідно роботи [137] нестійкість Марангоні виникає за умов певного співвідношення глибини розплавленого шару та характерного часу температуропровідності. За

можливістю фізичної реалізації ділянка мішені на якій відбуватиметься формування такої нестійкості буде мати температуру, що вища з а температуру плавлення але не вища температури випаровування. За умов випаровування та динамічного викиду газоплазмового факела виникнення впорядкованості неможливе через турбулентності. Так з Рисунків 5.9а, 5.9б видно що їх поверхня менш впорядкована аніж на Рисунку 5.9в, якому відповідає температура нижче температури випаровування, але достатня для розплавлення мішені. Рушійною силою виникнення нестійкостей, як ознаки фазового переходу, є просторово нерівномірний розподіл густини, зумовлений її залежністю від температури. Так для нестійкості Релея-Бенара, залежність густини від температури виглядає наступним чином [191]

$$\rho = \frac{\rho_0}{1 + \beta(T - T_0)}, \tag{5.3}$$

де ρ_0, ρ – значення початкової густини та після зміни температури, β – коефіцієнт термічного розширення, T – температура. Нерівність температури, зумовлену нерівномірністю поглиненої енергії по глибині зразка можні виразити через ентальпію та ентропію системи і закласти в вираз для термодинамічного потенціалу Гінзбурга-Ландау.

Нерівномірність температурного поля вздовж поверхні мішені буде зумовлена як спадом густини струму пучка від центру до периферії, так і більш інтенсивним теплообміном з неопроміненою частиною мішені. Відтак слід очікувати виникнення іншого типу нестійкості Бенара–Марангоні, тобто термокапілярного ефекту [192]:

$$\mu = \frac{\gamma \cdot \Delta T \cdot h}{\eta \cdot \chi}, \tag{5.4}$$

де χ – температурна провідність, λ – температурна залежність коефіцієнта поверхневого натяжіння, η – в’язкість, h – товщина розплавленого пучком шару мішені.

Згідно [189] умовою виникнення термокапілярної нестійкості є співвідношення часу дії імпульсу $\tau \ll \tau_\chi$ з характерним часом

температуропровідності. $\tau_\chi = h^2/\chi$, беручи дані для молібдену $\chi = 5{,}2 \cdot 10^{-5}$м^2/с, та розраховане нами значення $h = 30 \cdot 10^{-6}$ м, одержуємо $\tau_\chi = 1.7 \cdot 10^{-5}$ сек. В нашому випадку ця умова виконується, оскільки тривалість фронту імпульсу становить 5 мкс.

Висновки до розділу 5

1. Дія СРЕП на пластину з молібдену призводить до оплавлення поверхневого прошарку і зміни топографічного рисунку поверхні. Новоутворена поверхня має хвилястий тип з напівсферичними виступами, які демонструють тренд до зміни періоду відтворюваності та розмірів, що зумовлене нерівномірністю просторового розподілу температурного поля. Перехід до хвилястого рельєфу відбувається при досягненні критичного співвідношення товщини розплавленого шару мішені до характерного значення часу температуропровідності.

2. Поверхневий переплавлений опроміненням шар складається із стовпчастих кристалітів шириною до 12 мкм, а висота яких відповідає майже всій вглибині переплавленого прошарку. Після обробки НСЕВ на поверхні мішені чіткість більшості границь зерен є досить очевидною навіть без травлення. Розмір зерен на опроміненій поверхні в середньому співпадає з шириною стовбчастих кристалітів.

3. Утворення стовбчастої зеренної мікроструктури в процесі кристалізації розплавленого опроміненням СРЕП прошарку молібдену відбувалося за механізмом епітаксіального росту зерен.

4. Встановлено, що в результаті впливу СРЕП відбувається зміцнення поверхневого прошарку молібдену, яке характеризується збільшенням його мікротвердості на 7% у порівнянні з початковим станом. Збільшенні мікротвердості опроміненого прошарку молібдену викликане збільшенням густини дислокацій, які виникають через релаксацію внутрішніх напружень в процесі кристалізації розплавленого опромінення поверхневого шару.

ВИСНОВКИ

У дисертаційній роботі розв’язано актуальну наукову задачу дослідження фазових переходів у конденсованих середовищах із виникненням просторово неоднорідних станів, зокрема в системах з однокомпонентним параметром порядку, а також встановлено закономірності формування модульованих структур і солітонних розподілів у межах феноменологічного підходу.

Проведений аналіз сучасного стану проблеми показав, що просторово неоднорідні стани є характерною особливістю широкого класу фізичних систем, включаючи сегнетоелектрики, магнітні матеріали та опромінені тверді тіла. Узагальнення існуючих підходів, зокрема в рамках теорії фазових переходів Ландау, дозволило встановити, що врахування градієнтних доданків у термодинамічному потенціалі є принципово необхідним для опису несумірних фаз і модульованих структур. Показано, що класичні моделі потребують розширення для адекватного опису систем із вторинними параметрами порядку та складною симетрією.

У роботі розроблено феноменологічну модель фазових переходів, яка дозволяє описати виникнення просторово неоднорідних станів у системах із однокомпонентним параметром порядку. Встановлено фізичний та математичний зміст градієнтних доданків у термодинамічному потенціалі, що визначають енергетичну доцільність формування модульованих структур. Показано, що конкуренція між локальними та нелокальними внесками призводить до стабілізації періодичних або локалізованих розподілів параметра порядку.

На основі варіаційного підходу отримано рівняння стану для параметра порядку та проведено його якісний аналіз. Встановлено можливість реалізації різних сценаріїв фазових переходів із виникненням солітонних структур. Зокрема, показано існування фаз із локалізованими bell-солітонними розподілами, які відповідають просторово обмеженим збуренням параметра

порядку. Визначено умови їх існування та стійкості, а також встановлено послідовність фазових переходів, що супроводжуються їх появою.

Окремо досліджено сценарій фазових переходів із формуванням kink-солітонних структур, які відповідають топологічно нетривіальним розв’язкам. Проведено аналіз фазових діаграм і визначено граничні значення параметрів, що відповідають переходам між однорідними та неоднорідними фазами. Показано, що стабільність таких структур визначається знаком і величиною коефіцієнтів при градієнтних та нелінійних доданках у термодинамічному потенціалі.

Дослідження релаксаційних процесів у системах із параметром порядку показало, що динаміка встановлення рівноважного стану в органічних середовищах має суттєво нелінійний характер і визначається як внутрішніми властивостями системи, так і дією зовнішніх радіаційних чинників. На відміну від класичних уявлень про експоненційну релаксацію, у розглянутих системах важливу роль відіграють процеси генерації вторинного випромінювання, що виникає внаслідок збудження високомолекулярних структур і подальших переходів у основний стан. Такий механізм фактично формує додатковий канал зворотного впливу на параметр порядку, зокрема на кіральну поляризацію, що може призводити до підсилення асиметрії та стабілізації нерівноважних станів. Аналогічні закономірності виявляються і при релаксації електричного заряду в опромінених полімерних діелектриках, де експериментально спостерігається відхилення від простої експоненціальної залежності, що свідчить про складну багатостадійну динаміку процесу. аким чином, релаксаційні явища в досліджуваних системах мають універсальний характер і можуть бути описані в межах єдиного феноменологічного підходу, що враховує як нелінійність, так і вплив радіаційно індукованих процесів.

У роботі систематично застосовано методи групового аналізу до варіаційного рівняння, що описує просторові розподіли параметра порядку. Встановлено наявність трансляційної інваріантності та масштабної симетрії, що дозволило знизити порядок задачі та отримати класи інваріантних

розв’язків. Показано, що симетрійні властивості рівняння визначають можливість існування аналітичних розв’язків.

Отримано частинні точні розв’язки варіаційного рівняння, що описують просторово періодичні структури, які виражаються через еліптичні функції Якобі. Зокрема, знайдено розподіли параметра порядку у вигляді функцій типу *sn*, *cn* та *dn*, що відповідають різним режимам модуляції. Показано, що ці розв’язки узагальнюють як гармонічні, так і солітонні розподіли та дозволяють описати перехід між ними в залежності від параметрів системи.

Практичну апробацію розробленого підходу здійснено на прикладі фазових перетворень у молібдені під дією інтенсивних потоків іонізуючого випромінювання. Показано, що опромінення призводить до порушення симетрії та формування просторово неоднорідних структур, які можуть бути описані в рамках запропонованої моделі. Встановлено зв’язок між параметрами зовнішнього впливу та характером сформованих фаз.

Таким чином, у дисертаційній роботі:

- розвинуто феноменологічний підхід до опису фазових переходів у системах із просторово неоднорідними станами;
- встановлено умови виникнення та стійкості модульованих і солітонних структур;
- отримано нові аналітичні розв’язки варіаційного рівняння;
- виявлено роль симетрій у формуванні просторових розподілів параметра порядку;
- пояснено механізми формування неоднорідних фаз у матеріалах під дією зовнішніх факторів, зокрема випромінювання.

Отримані результати мають важливе теоретичне значення для розвитку теорії фазових переходів і можуть бути використані при дослідженні складних конденсованих систем, а також для інтерпретації експериментальних даних у фізиці твердого тіла, матеріалознавстві та суміжних галузях.

СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

[1] R. Blinc, *Advanced Ferroelectricity*, vol. 151. Oxford University Press, 2011, doi: 10.1093/acprof:oso/9780199570942.001.0001.

[2] A. B. Harris and G. Lawes, “Ferroelectricity in Incommensurate Magnets”, in *Handbook of Magnetism and Advanced Magnetic Materials*, Wiley, 2007, doi: 10.1002/9780470022184.hmm429.

[3] Yu. M. Vysochanskii, T. Janssen, R. Currat, R. Folk, J. Banys, J. Grigas and V. Damulionis, *Phase transitions in ferroelectric phosphorous chalcogenide crystals*, 2nd Edition. Vilnius: Vilnius University Publishing House, 2008.

[4] A. N. Morozovska, E. A. Eliseev, J. Wang, G. S. Svechnikov, Yu. M. Vysochanskii, V. Gopalan and L.-Q. Chen, “Phase diagram and domain splitting in thin ferroelectric films with incommensurate phase”, *Phys. Rev. B*, vol. 81, no. 19, p. 195437, 2010, doi: 10.1103/PhysRevB.81.195437.

[5] I. Yukhnovskii and M. Holovko, *Statistical Theory of Classical Equilibrium Systems*, 2nd Edition. Kyiv: PH “Akademperiodyka”, 2025, doi: 10.15407/akademperiodyka.558.444.

[6] E. A. Eliseev, S. V. Kalinin, Y. Gu, M. D. Glinchuk, V. Khist, A. Borisevich, V. Gopalan, L.-Q. Chen and A. N. Morozovska, “Universal emergence of spatially modulated structures induced by flexoantiferrodistortive coupling in multiferroics”, *Phys. Rev. B*, vol. 88, no. 22, p. 224105, 2013, doi: 10.1103/PhysRevB.88.224105.

[7] A. Y. Borisevich, E. A. Eliseev, A. N. Morozovska, C.-J. Cheng, J.-Y. Lin, Y. H. Chu, D. Kan, I. Takeuchi, V. Nagarajan and S. V. Kalinin, “Atomic-scale evolution of modulated phases at the ferroelectric–antiferroelectric morphotropic phase boundary controlled by flexoelectric interaction”, *Nat. Commun.*, vol. 3, no. 1, p. 775, 2012, doi: 10.1038/ncomms1778.

[8] S. T. Tan, B. J. Chen, X. W. Sun, X. Hu, X. H. Zhang and S. J. Chua, “Properties of polycrystalline ZnO thin films by metal organic chemical vapor deposition”, *J. Cryst. Growth*, vol. 281, no. 2–4, pp. 571–576, 2005, doi: 10.1016/j.jcrysgro.2005.04.093.

[9] A. Fernandez, M. Acharya, H. Lee, J. Schimpf, Y. Jiang, D. Lou, Z. Tian and L. W. Martin, “Thin-Film Ferroelectrics”, *Advanced Materials*, vol. 34, no. 30, p. 2108841, 2022, doi: 10.1002/adma.202108841.

[10] M. Okuyama and Y. Ishibashi, *Ferroelectric Thin Films*, vol. 98. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2005. doi: 10.1007/b99517.

[11] A. A. Mirkin, A. L. Pirozerskiĭ, E. V. Charnaya and C. Tien, “Incommensurate Phase Transition in a Thin Film”, *Ferroelectrics*, vol. 413, no. 1, pp. 399–408, 2011, doi: 10.1080/00150193.2011.532070.

[12] S. H. Park, J. Y. Kim, J. Y. Song and H. W. Jang, “Overcoming Size Effects in Ferroelectric Thin Films”, *Advanced Physics Research*, vol. 2, no. 6, 2023, doi: 10.1002/apxr.202200096.

[13] M. D. Glinchuk, A. N. Morozovska and L. P. Yurchenko, “Origin of Ferroelectricity and Multiferroicity in Binary Oxide Thin Films”, *IEEE Trans. Ultrason. Ferroelectr. Freq. Control*, vol. 68, no. 2, pp. 273–278, 2021, doi: 10.1109/TUFFC.2020.2988361.

[14] J. M. . Cowley, *Diffraction physics*. Elsevier Science B.V., 1995.

[15] N. Tasios, S. Samin, R. van Roij and M. Dijkstra, “Microphase Separation in Oil-Water Mixtures Containing Hydrophilic and Hydrophobic Ions”, *Phys. Rev. Lett.*, vol. 119, no. 21, p. 219001, 2017, doi: 10.1103/PhysRevLett.119.218001.

[16] M. F. Ali and M. H. Alqam, “The role of asphaltenes, resins and other solids in the stabilization of water in oil emulsions and its effects on oil production in Saudi oil fields”, *Fuel*, vol. 79, no. 11, pp. 1309–1316, 2000, doi: 10.1016/S0016-2361(99)00268-9.

[17] Y. A. Izyumov, “Modulated, or long-periodic, magnetic structures of crystals”, *Sov. Phys. Usp.*, vol. 27, no. 11, pp. 845–867, 1984, doi: 10.1070/PU1984v027n11ABEH004120.

[18] R. Whatmore, “Ferroelectric Materials”, 2017, pp. 589–614, doi: 10.1007/978-3-319-48933-9_26.

[19] H. Z. Cummins, “Experimental studies of structurally incommensurate crystal phases”, *Phys. Rep.*, vol. 185, no. 5–6, pp. 211–409, 1990, doi: 10.1016/0370-1573(90)90058-A.

[20] R. Khosla and S. K. Sharma, “Integration of Ferroelectric Materials: An Ultimate Solution for Next-Generation Computing and Storage Devices”, 2021, *American Chemical Society*. doi: 10.1021/acsaelm.0c00851.

[21] H. Hwang, S. Youn and H. Kim, “Recent advances in ferroelectric materials, devices, and in-memory computing applications”, *Nano Converg.*, vol. 12, no. 1, p. 55, 2025, doi: 10.1186/s40580-025-00520-2.

[22] J. F. Scott, “Applications of Modern Ferroelectrics”, *Science (1979).*, vol. 315, no. 5814, pp. 954–959, 2007, doi: 10.1126/science.1129564.

[23] A. N. Morozovska, O. M. Fesenko, A. D. Yaremkevich, T. V. Tsebrienko, O. P. Budnyk, L. Wang, A. V. Semchenko and V. V. Sidski, “Enhanced ferroelectric properties of low-annealed $SrBi_2(Ta,Nb)_2O_9$ thin films for NvFeRAM applications”, *Appl. Nanosci.*, vol. 13, no. 11, pp. 7171–7185, 2023, doi: 10.1007/s13204-023-02885-4.

[24] Yu. A. Izyumov, V. E. Naish, and R. P. Ozerov, *Neutron Diffraction of Magnetic Materials. Boston*, MA: Springer US, 1991. doi: 10.1007/978-1-4615-3658-1.

[25] J. C. Tolédano and P. Tolédano, *The Landau Theory of Phase Transitions*, vol. 3. World Scientific Publishing, 1987. doi: 10.1142/0215.

[26] В. Ф. Клепиков, *Фазовые переходы (несоизмеримые структуры)*. Харьков: НТЦ ЭФО НАН Украины, 1996.

[27] B. Horovitz, “Lock-in transitions and charge transfer in one-dimensional fermion systems”, *Journal of Physics C: Solid State Physics*, vol. 15, no. 2, pp. 161–173, 1982, doi: 10.1088/0022-3719/15/2/002.

[28] Y. Ishibashi, “Phenomenological theory of domain walls”, *Ferroelectrics*, vol. 98, no. 1, pp. 193–205, 1989, doi: 10.1080/00150198908217582.

[29] A. D. Bruce, R. A. Cowley and A. F. Murray, “The theory of structurally incommensurate systems. II. Commensurate-incommensurate phase transitions”,

Journal of Physics C: Solid State Physics, vol. 11, no. 17, pp. 3591–3608, 1978, doi: 10.1088/0022-3719/11/17/013.

[30] R. M. Hornreich, “The Lifshitz point: Phase diagrams and critical behavior”, *J. Magn. Magn. Mater.*, vol. 15–18, pp. 387–392, 1980, doi: 10.1016/0304-8853(80)91100-2.

[31] C. C. Becerra, Y. Shapira, N. F. Oliveira and T. S. Chang, “Lifshitz Point in MnP”, *Phys. Rev. Lett.*, vol. 44, no. 25, pp. 1692–1695, 1980, doi: 10.1103/PhysRevLett.44.1692.

[32] Y. M. Vysochanskiĭ and V. Y. Slivka, “Lifshitz point on the state diagram of ferroelectrics”, *Sov. Phys. Usp.*, vol. 35, no. 2, pp. 123–134, 1992, doi: 10.1070/PU1992v035n02ABEH002217.

[33] Yu. M. Vysochanskii, M. M. Mayor, V. M. Rizak, V. Yu. Slivka and M. M. Khoma, “The tricritical Lifshitz point on the phase diagram of Sn_2P_2 $(Se_xS_{1-x})_6$ ferroelectrics”, *Zh. Eksp. Teor. Fiz*, vol. 95, pp. 1355–1365, 1989.

[34] V. Liubachko, A. Oleaga, A. Salazar, R. Yevych, A. Kohutych and Yu. Vysochanskii, “Phase diagram of ferroelectrics with tricritical and Lifshitz points at coupling between polar and antipolar fluctuations”, *Phys. Rev. B*, vol. 101, no. 22, p. 224110, 2020, doi: 10.1103/PhysRevB.101.224110.

[35] R. Folk, “Multicritical behavior in ferroelectrics”, *Phase Transitions*, vol. 67, no. 4, pp. 645–666, 1999, doi: 10.1080/01411599908224501.

[36] P. Ondrejkovic, M. Kempa, Y. Vysochanskii, P. Saint-Grégoire, P. Bourges, K. Z. Rushchanskii and J. Hlinka, “Neutron scattering study of ferroelectric Sn2P2S6 under pressure”, *Phys. Rev. B*, vol. 86, no. 22, p. 224106, 2012, doi: 10.1103/PhysRevB.86.224106.

[37] P. Ondrejkovic, M. Guennou, M. Kempa, Y. Vysochanskii, G. Garbarino and J. Hlinka, “An x-ray scattering study of Sn2P2S6: Absence of incommensurate phase up to 1 GPa”, *Journal of Physics Condensed Matter*, vol. 25, no. 11, 2013, doi: 10.1088/0953-8984/25/11/115901.

[38] K. Z. Rushchanskii, M. Medulych, V. Liubachko and Y. M. Vysochanskii, “Pressure-induced toroidal order in molecular $Sn_2P_2S_6$ ferroelectrics”, 2024, doi: https://doi.org/10.48550/arXiv.2408.14179.

[39] A. P. Giddy, M. T. Dove, and V. Heine, “What do Landau free energies really look like for structural phase transitions?”, *Journal of Physics: Condensed Matter*, vol. 1, no. 44, pp. 8327–8335, 1989, doi: 10.1088/0953-8984/1/44/005.

[40] V. V. Bryukhovetsky, S. E. Donets, S. A. Kniaziev, O. V. Subbotin, V. V. Lytvynenko, S. I. Bogatyrenko, O. L. Rak and A. R. Shymanovskyi, “Structural and phase transformations in a molybdenum target under the impact action of a high-power electron beam”, *Problems of Atomic Science and Technology*, vol. 160, no. 6, pp. 76–82, 2025, doi: 10.46813/2025-160-076.

[41] K. Binder, “Theory of first-order phase transitions”, *Reports on Progress in Physics*, vol. 50, no. 7, pp. 783–859, 1987, doi: 10.1088/0034-4885/50/7/001.

[42] S. B. Goryachev, “Theory of spinodal decomposition”, *Phys. Rev. Lett.*, vol. 72, no. 12, pp. 1850–1853, 1994, doi: 10.1103/PhysRevLett.72.1850.

[43] H. D. Vuijk, J. M. Brader and A. Sharma, “Effect of anisotropic diffusion on spinodal decomposition”, *Soft Matter*, vol. 15, no. 6, pp. 1319–1326, 2019, doi: 10.1039/C8SM02017E.

[44] Л. А. Булавін, *Властивості рідин в критичній області*. Київ: РВЦ “Київський університет”, 2002.

[45] A. I. Olemskoi, A. V. Khomenko and V. F. Klepikov, “Synergetic kinetics of a second order phase transition”, *Ukrainian Journal of Physics*, vol. 41, no. 7–8, pp. 756–761, 1996.

[46] A. I. Olemskoi, A. V. Khomenko and V. F. Klepikov, “Synergetic kinetics of a first order phase transition”, *Ukrainian Journal of Physics*, vol. 41, no. 7–8, pp. 762–767, 1996.

[47] G. Nicolis and I. Prigogine, *Self-Organization in Nonequilibrium Systems: From Dissipative Structures to Order Through Fluctuations*. New York: Wiley, 1977.

[48] S. V. Berezovsky, V. F. Klepikov, V. Yu. Korda, Yu. V. Sereda and N. A. Shlyahov, “Numerical study of parametric evolution of incommensurate distributions of one-component order parameter”, *Journal of Kharkov National University*, vol. 421, pp. 18–23, 1998.

[49] S. V. Berezovsky, V. F. Klepikov, V. Y. Korda and N. A. Shlyakhov, “Equilibrium Nonlinear Distributions of One-Component Order Parameter in Systems with Competitive Interaction”, *Int. J. Mod. Phys. B*, vol. 12, no. 04, pp. 433–447, 1998, doi: 10.1142/S0217979298000284.

[50] S. V Berezovsky, V. F. Klepikov, V. Y. Korda and Y. V Sereda, “The non-linear distributions of one-component order parameter”, *Ukr. J. Phys.*, vol. 44, no. 5, pp. 665–660, 1999.

[51] Yu. V. Sereda, “Exact one-component order parameter distributions for the thermodynamic potential of Landau-Ginzburg type with higher gradient and power nonlinearities”, *Phys. Rev. B*, vol. 66, no. 5, p. 054109, Aug. 2002, doi: 10.1103/PhysRevB.66.054109.

[52] A. R. Shymanovskyi and V. F. Klepikov, “Partial Exact Solutions of Nonlinear Distribution One-Component Order Parameter in Equilibrium Systems”, *East European Journal of Physics*, vol. 158, no. 4, pp. 157–163, 2025, doi: 10.26565/2312-4334-2025-4-13.

[53] A. R. Shymanovskyi and V. F. Klepikov, “Analytical solutions of the thermodynamic potential of the Michelson model in equilibrium systems”, *Problems of Atomic Science and Technology*, vol. 161, no. 1, p. 103, 2026, doi: 10.46813/2026-161-103.

[54] Klepikov V. F. and Berezovsky S. V., “Modulatet structures of order parameter and spontaneous parity breaking”, *Condens. Matter Phys.*, no. 8, p. 69, 1996, doi: 10.5488/CMP.8.69.

[55] Berezovsky S. V., Klepikov V. F., Sereda Yu. V. and Lysenko M. A., “Symmetries in the systems with incommensurate phases”, *Journal of Kharkov National University*, vol. 443, pp. 17–22, 1999.

[56] A. V. Babich, S. V. Berezovsky and V. F. Klepikov, “Spontaneous symmetry breaking in the theory of modulated structures”, *Problems of Atomic Science and Technology*, vol. 49, no. 3, pp. 353–356, 2007.

[57] T. Simonson, F. Dénoyer, R. Currat and C. Vettier, “Structure of the modulation in thiourea. II. Structure refinement”, *Journal de Physique*, vol. 49, no. 3, pp. 471–480, 1988, doi: 10.1051/jphys:01988004903047100.

[58] I. Aramburu, G. Madariaga and J. M. Pérez-Mato, “Phenomenological model for type-II incommensurate phases having a soliton regime: Thiourea case”, *Phys. Rev. B*, vol. 49, no. 2, pp. 802–814, 1994, doi: 10.1103/PhysRevB.49.802.

[59] I. Aramburu, G. Madariaga, J. M. Pérez-Mato and T. Breczewski, “Time Relaxation of the Low-Temperature Modulated Structure of Thiourea”, *Acta Crystallogr. A*, vol. 52, no. 2, pp. 203–211, 1996, doi: 10.1107/S0108767395012864.

[60] Y. Ishibashi and H. Shiba, “Successive Phase Transitions in Ferroelectric $NaNO_2$ and $SC(NH_2)_2$”, *J. Physical Soc. Japan*, vol. 45, no. 2, pp. 409–413, 1978, doi: 10.1143/JPSJ.45.409.

[61] A. Yu. Milinskii, S. V. Baryshnikov and A. A. Antonov, “Phase transitions of $SC(NH_2)_2$ ferroelectrics in Al_2O_3-based nanoporous matrices”, *Physics of the Solid State*, vol. 59, no. 9, pp. 1783–1788, 2017, doi: 10.1134/S1063783417090207.

[62] K. Moriya, H. Kuniyoshi, K. Tashita, Y. Ozaki, S. Yano and T. Matsuo, “Ferroelectric Phase Transitions in $Sn_2P_2S_6$ and $Sn_2P_2Se_6$ Crystals”, *J. Physical Soc. Japan*, vol. 67, no. 10, pp. 3505–3511, 1998, doi: 10.1143/JPSJ.67.3505.

[63] S. W. H. Eijt, R. Currat, J. E. Lorenzo, P. Saint-Grégoire, S. Katano, T. Janssen, B. Hennion and Y. M. Vysochanskii, “Soft modes and phonon interactions in $Sn_2P_2Se_6$ studied by means of neutron scattering”, *Journal of Physics: Condensed Matter*, vol. 10, no. 22, pp. 4811–4844, 1998, doi: 10.1088/0953-8984/10/22/008.

[64] P. Lederer, J. P. Jamet and G. Montambaux, “Modulated phases, memory effect and defect density waves in thiourea”, *Ferroelectrics*, vol. 66, no. 1, pp. 25–56, 1986, doi: 10.1080/00150198608227872.

[65] M. M. Maior, T. Rasing, S. W. H. Eijt, P. H. M. van Loosdrecht, H. van Kempen, S. B. Molnar, Y. M. Vysochanskii, S. F. Motrij and V. Y. Slivka, “The role of charge carriers in the memory effect in the incommensurate phase of the semiconducting ferroelectric $Sn_2P_2Se_6$”, *Journal of Physics: Condensed Matter*, vol. 6, no. 50, pp. 11211–11220, 1994, doi: 10.1088/0953-8984/6/50/027.

[66] J. F. Scott, *Ferroelectric Memories*, vol. 3. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2000. doi: 10.1007/978-3-662-04307-3.

[67] M. M. Mayor, Yu. M. Vysochanskii, L. A. Salo, V. M. Rizak, M. V. Potorij and V. Yu. Slivka, “Evolution of incommensurate phase to chaotic state in $(Pb_ySn_{1-y})_2P_2(Se_xS_{1-x})_6$ solid solutions”, *Fizika Tverdogo Tela*, vol. 31, no. 6, 1989.

[68] K. Hamano, K. Abe and T. Mitsui, “Observation of Amorphous Domain Pattern in Ferroelectric Sodium Nitrite”, *J. Physical Soc. Japan*, vol. 67, no. 3, pp. 1037–1043, 1998, doi: 10.1143/JPSJ.67.1037.

[69] D. A. Kiselev, K. Z. Rushchanskii, I. K. Bdikin, M. D. Malinkovich, Y. N. Parkhomenko and Yu. M. Vysochanskii, “Theoretical Prediction and Direct Observation of Metastable Non-Polar Regions in Domain Structure of $Sn_2P_2S_6$ Ferroelectrics with Triple-Well Potential”, *Ferroelectrics*, vol. 438, no. 1, pp. 55–67, 2012, doi: 10.1080/00150193.2012.741935.

[70] R. Blinc and A. P. Levaniuk, *Incommensurate phases in dielectrics*, vol. 14(2). North-Holland ; Sole distributors for the U.S.A. and Canada : Elsevier Science Pub. Co., 1986.

[71] A. P. Levanyuk and D. G. Sannikov, “Improper ferroelectrics,” *Sov. Phys. Usp.*, vol. 17, no. 2, pp. 199–214, 1974, doi: 10.1070/PU1974v017n02ABEH004336.

[72] M. Ya. Rudysh, A. O. Fedorchuk, V. Yo. Stadnyk, P. A. Shchepanskyi, R. S. Brezvin, B. I. Horon, O. Yu. Khyzhun and O. M. Gorina, “Structure, electronic, optical and elastic properties of $(NH_4)_2BeF_4$ crystal in paraelectric phase”, *Current Applied Physics*, vol. 45, pp. 76–85, Jan. 2023, doi: 10.1016/j.cap.2022.11.005.

[73] M. Iqbal Khan and T. Chandra Upadhyay, “General Introduction to Ferroelectrics,” in *Multifunctional Ferroelectric Materials*, IntechOpen, 2021, doi: 10.5772/intechopen.97720.

[74] H. Yurtseven, S. Salihoğlu and Ö. Tari, “Spontaneous polarization close to phase transitions in $NaNO_2$”, *Mater. Chem. Phys.*, vol. 71, no. 2, pp. 206–209, 2001, doi: 10.1016/S0254-0584(01)00274-7.

[75] Y. Ishibashi, W. Buchheit and J. Petersson, “A thermodynamic potential describing the successive phase transitions in $NaNO_2$”, *Solid State Commun.*, vol. 38, no. 12, pp. 1277–1279, 1981, doi: 10.1016/0038-1098(81)91005-X.

[76] M. Yu. Seyidov, F. A. Mikailzade, R. A. Suleymanov, N. Bulut and F. Salehli, “The influence of uniaxial compressive stress on the phase transitions and dielectric properties of $NaNO_2$,” *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, vol. 93, pp. 22–26, 2016, doi: 10.1016/j.jpcs.2016.02.004.

[77] M. M. Maior, S. A. J. Wiegers, Th. Rasing, S. W. H. Eijt, F. C. Penning, Yu. M. Vysochanskii, S. F. Motrja and H. van Kempen, “Low temperature properties of incommensurate ferroelectrics $(Pb_ySn_{1-y})_2P_2(Se_xS_{1-x})_6$”, *Ferroelectrics*, vol. 202, no. 1, pp. 139–148, 1997, doi: 10.1080/00150199708213470.

[78] V. Shvalya, A. Oleaga, A. Salazar, A. A. Kohutych and Yu. M. Vysochanskii, “Critical behaviour study of ferroelectric semiconductors $(Pb_xSn_{1-x})_2P_2S_6$ from thermal diffusivity measurements”, *Thermochim. Acta*, vol. 617, pp. 136–143, 2015, doi: 10.1016/j.tca.2015.08.031.

[79] R. Folk and G. Moser, “Lifshitz points in uniaxial ferroelectrics,” *Phys. Rev. B*, vol. 47, no. 21, pp. 13992–13997, 1993, doi: 10.1103/PhysRevB.47.13992.

[80] A. V. Babich, S. V. Berezovsky, V. F. Klepikov and Yu. V. Sereda, “Solliton-like order parameter distributions in the critical region”, *Condens. Matter Phys.*, vol. 9, no. 1, pp. 121–125, 2006, doi: 10.5488/CMP.9.1.121.

[81] W. L. McMillan, “Theory of discommensurations and the commensurate-incommensurate charge-density-wave phase transition”, *Phys. Rev. B*, vol. 14, no. 4, pp. 1496–1502, 1976, doi: 10.1103/PhysRevB.14.1496.

[82] R. Blinc, V. Rutar, B. Topič, F. Milia, I. P. Aleksandrova, A. S. Chaves and R. Gazzinelli, “Soliton Density in Structurally Incommensurate Systems”, *Phys. Rev. Lett.*, vol. 46, no. 21, pp. 1406–1409, 1981, doi: 10.1103/PhysRevLett.46.1406.

[83] F. W. J. Olver, *NIST handbook of mathematical functions*. Cambridge University Press : NIST, 2010.

[84] S. L. Qiu, M. Dutta, H. Z. Cummins, J. P. Wicksted and S. M. Shapiro, “Extension of the Lifshitz-point concept to first-order phase transitions: Incommensurate $NaNO_2$ in a transverse electric field”, *Phys. Rev. B*, vol. 34, no. 11, pp. 7901–7910, 1986, doi: 10.1103/PhysRevB.34.7901.

[85] L. Zhang, W.-L. Zhong and J.-F. Hu, “Dielectric behavior and correlation length of ferroelectric particles in the paraelectric phase”, *Solid State Commun.*, vol. 116, no. 6, pp. 349–354, 2000, doi: 10.1016/S0038-1098(00)00298-2.

[86] F. J. Zuñiga, G. Madariaga, W. A. Paciorek, J. M. Pérez-Mato, J. M. Ezpeleta and I. Etxebarria, “Modulated structure of thiourea”, *Acta Crystallogr. B*, vol. 45, no. 6, pp. 566–576, 1989, doi: 10.1107/S0108768189007846.

[87] V. A. Golovko, “Exact solutions of equations describing an incommensurate phase in the absence of the Lifshitz invariant”, *JEPT*, vol. 94, no. 2, pp. 182–197, 1988.

[88] Yu. M. Vysochanskii, M. M. Khoma and A. A. Molnar, “The lock-in transition in proper $Sn_2P_2(Se_xS_{1-x})_6$ ferroelectrics”, *Ferroelectrics*, vol. 191, no. 1, pp. 231–239, 1997, doi: 10.1080/00150199708015644.

[89] M. M. Khoma, A. A. Molnar and Y. M. Vysochanskii, “The mean-field analysis of $Sn_2P_2(Se_xS_{1-x})_6$ thermodynamical properties in the paraelectric, incommensurate and ferroelectric phases”, *Journal of Physical Studies*, vol. 2, no. 4, pp. 524–535, 1998.

[90] V. F. Klepikov, “Modulated structures and phase transitions”, *Soviet Journal of Low Temperature Physics*, vol. 17, no. 9, pp. 611–613, 1991, doi: 10.1063/10.0032932.

[91] F. Dénoyer and R. Currat, “Modulated Phases in Thiourea”, 1986, pp. 129–160. doi: 10.1016/B978-0-444-86970-8.50011-1.

[92] K Parlinski, “Landau theory of incommensurate phases in thiourea”, *Journal of Physics C: Solid State Physics*, vol. 18, no. 30, pp. 5667–5682, 1985, doi: 10.1088/0022-3719/18/30/003.

[93] G. Schaack, “The Commensurate Phases of BCCD Revisited: Domain Walls, Condensates, and Quantum Effects”, *Ferroelectrics*, vol. 349, no. 1, pp. 128–156, 2007, doi: 10.1080/00150190701260926.

[94] P. Bak, “The Devil’s Staircase”, *Phys. Today*, vol. 39, no. 12, pp. 38–45, 1986, doi: 10.1063/1.881047.

[95] M. N. Barreto, P. Lederer and J. P. Jamet, “Thiourea in an electric field: Birefringence measurements and the Landau-Ginzburg theory”, *Phys. Rev. B*, vol. 28, no. 7, pp. 3994–4000, 1983, doi: 10.1103/PhysRevB.28.3994.

[96] I. Gregora, J. Hlinka and B. Březina, “Amplitudon Mode in Deuterated Thiourea by Raman Scattering”, *Ferroelectrics*, vol. 302, no. 1, pp. 155–157, 2004, doi: 10.1080/00150190490453496.

[97] A. Michelson, “Phase diagrams near the Lifshitz point. I. Uniaxial magnetization”, *Phys. Rev. B*, vol. 16, no. 1, pp. 577–584, 1977, doi: 10.1103/PhysRevB.16.577.

[98] A. K. Tagantsev, L. E. Cross and J. Fousek, *Domains in Ferroic Crystals and Thin Films*. NY: Springer New York, 2010, doi: 10.1007/978-1-4419-1417-0.

[99] A. S. Sidorkin, *Domain structure in ferroelectrics and related materials*. Viva Books, 2008.

[100] R. Blinc, J. Šušteršič, T. Apih and J. Hlinka, “Deuteron NMR and soliton density in incommensurate thiourea”, *Phys. Rev. B*, vol. 73, no. 9, p. 094119, 2006, doi: 10.1103/PhysRevB.73.094119.

[101] A. E. Jacobs, C. Grein and F. Marsiglio, “Rippled commensurate state: A possible new type of incommensurate state”, *Phys. Rev. B*, vol. 29, no. 7, pp. 4179–4181, 1984, doi: 10.1103/PhysRevB.29.4179.

[102] K. Ema, K. Hamano and A. P. Levanyuk, “A Phenomenological Theory for Dielectric Anomaly near the Normal-Incommensurate-Commensurate Phase Transitions of Type-II,” *J. Physical Soc. Japan*, vol. 59, no. 4, pp. 1438–1450, 1990, doi: 10.1143/JPSJ.59.1438.

[103] D. G. Sannikov and G. Schaack, “The theoretical temperature-pressure phase diagram for betaine calcium chloride dihydrate (BCCD)”, *Journal of Physics: Condensed Matter*, vol. 10, no. 8, pp. 1803–1812, 1998, doi: 10.1088/0953-8984/10/8/013.

[104] J. Hlinka, M. Iwata and Y. Ishibashi, “Phenomenological Description of the Sevenfold Phase of Betaine Calcium Chloride Dihydrate. I. Coupling to the Electric Field”, *J. Physical Soc. Japan*, vol. 68, no. 1, pp. 126–133, Jan. 1999, doi: 10.1143/JPSJ.68.126.

[105] D. G. Sannikov, “Phenomenological theory of phase diagrams involving an incommensurate phase”, *Crystallography Reports*, vol. 44, no. 1, pp. 148–164, 1999.

[106] W. R. Buessem, L. E. Cross and a. K. Goswami, “Phenomenological Theory of High Permittivity in Fine-Grained Barium Titanate”, *Journal of the American Ceramic Society*, vol. 49, no. 1, pp. 33–36, 1966, doi: 10.1111/j.1151-2916.1966.tb13144.x.

[107] Y. L. Li, L. E. Cross and L. Q. Chen, “A phenomenological thermodynamic potential for $BaTiO_3$ single crystals”, *J. Appl. Phys.*, vol. 98, no. 6, 2005, doi: 10.1063/1.2042528.

[108] Y. L. Wang, A. K. Tagantsev, D. Damjanovic, N. Setter, V. K. Yarmarkin, A. I. Sokolov and I. A. Lukyanchuk, “Landau thermodynamic potential for $BaTiO_3$”, *J. Appl. Phys.*, vol. 101, no. 10, 2007, doi: 10.1063/1.2733744.

[109] K. Tsuji, A. Ndayishimiye, S. Lowum, R. Floyd, K. Wang, M. Wetherington, J.-P. Maria and C. A. Randall, “Single step densification of high permittivity $BaTiO_3$ ceramics at 300 ^{o}C”, *J. Eur. Ceram. Soc.*, vol. 40, no. 4, pp. 1280–1284, 2020, doi: 10.1016/j.jeurceramsoc.2019.12.022.

[110] A. I. Sokolov and A. K. Tagantsev, “Fluctuations and Landau-Devonshire expansion for barium titanate”, *Journal of Experimental and Theoretical Physics Letters*, vol. 75, no. 8, pp. 410–414, 2002, doi: 10.1134/1.1490011.

[111] A. I. Sokolov, “Fluctuations, higher order anharmonicities, and Landau expansion for barium titanate”, *Physics of the Solid State*, vol. 51, no. 2, pp. 351–355, 2009, doi: 10.1134/S1063783409020255.

[112] K. Z. Rushchanskii, Y. M. Vysochanskii and D. Strauch, “Ferroelectricity, nonlinear dynamics, and relaxation effects in monoclinic $Sn_2P_2S_6$”, *Phys. Rev. Lett.*, vol. 99, no. 20, 2007, doi: 10.1103/PhysRevLett.99.207601.

[113] A. Tröster, C. Dellago and W. Schranz, “Free energies of the ϕ^4 model from Wang-Landau simulations”, *Phys. Rev. B*, vol. 72, no. 9, p. 094103, 2005, doi: 10.1103/PhysRevB.72.094103.

[114] J. Y. Fu, “On the Landau theory of phase transitions: a hierarchical dynamic model”, *Journal of Physics: Condensed Matter*, vol. 25, no. 7, p. 075903, 2013, doi: 10.1088/0953-8984/25/7/075903.

[115] A. A. Shoshin, A. V. Arzhannikov, A. V. Burdakov, V. V. Chebotarev, I. E. Garkusha, I. A. Ivanov, K. N. Kuklin, M. A. Makarov, V. A. Makhlaj, A. K. Marchenko, K. I. Mekler, A. F. Rovenskikh, S. V. Polosatkin, V. V. Postupaev, S. L. Sinitsky and V. I. Tereshin, “Plasma-Surface Interaction during ITER Type 1 ELMs: Comparison of Simulation with QSPA KH-50 and the GOL-3 Facilities”, *Fusion Science and Technology*, vol. 59, no. 1T, pp. 57–60, 2011, doi: 10.13182/FST11-A11574.

[116] I. E. Garkusha, V. V. Chebotarev, S. S. Herashchenko, V. A. Makhlaj, N. V. Kulik, M. S. Ladygina, A. K. Marchenko, Yu. V. Petrov, V. V. Staltsov, P. V. Shevchuk, D. G. Solyakov and D. V. Yelisyeyev, “Novel test-bed facility for PSI issues in fusion reactor conditions on the base of next generation QSPA plasma accelerator”, *Nuclear Fusion*, vol. 57, no. 11, p. 116011, 2017, doi: 10.1088/1741-4326/aa7924.

[117] S. E. Donets, V. V. Lytvynenko, Y. F. Lonin, A. G. Ponomarev, N. Y. Rokhmanov, R. I. Starovoytov and V. T. Uvarov, “Behavior of molybdenum

target in condition of irradiation by the high current relativistic electron beam", *Problems of Atomic Science and Technology*, vol. 118, no. 6, pp. 229–232, 2018.

[118] G. Yonas, "Fusion Power with Particle Beams", *Sci. Am.*, vol. 239, no. 5, pp. 50–61, 1978, doi: 10.1038/scientificamerican1178-50.

[119] C. N. Taylor, "Hydrogen and its detection in fusion and fission nuclear materials – a review", *Journal of Nuclear Materials*, vol. 558, p. 153396, 2022, doi: 10.1016/j.jnucmat.2021.153396.

[120] Y. Gao, M. Jakubowski, P. Drewelow, F. Pisano, A. Puig Sitjes, H. Niemann, A. Ali and M. Rack, "Approaches for quantitative study of divertor heat loads on W7-X", in *Proceedings of the 2018 International Conference on Quantitative InfraRed Thermography*, QIRT Council, Jul. 2018. doi: 10.21611/qirt.2018.p23.

[121] X. Courtois, M. Aumeunier, P. Moreau, C. Balorin, H. Roche, M. Jouve, J. Travere, F. Micolon, C. Begat and M. Houry, "Design of infrared thermography diagnostics for the west project", in *1st IAEA Technical Meeting on Fusion Data Processing, Validation and Analysis Nice, 1st - 3rd of June* 2015, 2015.

[122] L. Zhang, X. Zhang, N. Li, P. Zhang, X. Mei, Y. Wang and V. V. Uglov, "Experimental and simulation studies on damage mechanisms of tungsten and molybdenum under compressed plasma flow irradiation", *Nuclear Fusion*, vol. 63, no. 7, p. 076010, 2023, doi: 10.1088/1741-4326/acd016.

[123] N. Simos, E. Quaranta, N. Charitonidis, S. Redaelli, A. Bertarelli, N. Mariani, Z. Zhong, S. Ghose, E. Doorhyee, H. Zhong and Z. Kotsina, "Proton Irradiation Effects on the Physio-Mechanical Properties and Microstructure of Cold-Worked Molybdenum", *Journal of Nuclear Energy Science & Power Generation Technology*, vol. 6, no. 4, pp. 1–11, 2017, doi: 10.4172/2325-9809.1000180.

[124] M. Virgo, S. Chemerisov, R. Gromov, C. Jonah and G. F. Vandegrift, "Results of Thermal Test of Metallic Molybdenum Disk Target and Fast Acting Valve Testing", 2016. [Online]. http://www.ipd.anl.gov/anlpubs/2017/01/132800.pdf

[125] C. M. Petrie, J. R. Burns, R. N. Morris, R. Smith, A. G. Le Coq and K. A. Terrani, "Irradiation of Miniature Fuel Specimens in the High Flux Isotope Reactor", 2018.

[126] Q. Yin, G. Chen, Y. Ma, B. Zhang, Y. Huang, Z. Dong and J. Cao, “Strengthening mechanism for high-entropic weld of molybdenum/Kovar alloy electron beam welded joint”, *Materials Science and Engineering: A*, vol. 851, p. 143619, 2022, doi: 10.1016/j.msea.2022.143619.

[127] H. Xia, C. Zhang, P. Lv, J. Cai, Y. Jin and Q. Guan, “Surface alloying of aluminum with molybdenum by high-current pulsed electron beam”. *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B*, vol. 416, pp. 9–15, 2018, doi: 10.1016/j.nimb.2017.11.028.

[128] S. Valkov, M. Ormanova and P. Petrov, “Electron-Beam Surface Treatment of Metals and Alloys: Techniques and Trends”, *Metals (Basel).*, vol. 10, no. 9, p. 1219, 2020, doi: 10.3390/met10091219.

[129] В. В. Слезов, В. Т. Уваров, А. Г. Пономарьов, Г. Ф. Попов і А. І. Калініченко, “Динаміка фазових переходів у матеріалах з нелінійними термопружними характеристиками ”, *Питання атомної науки і техніки*, т. 79, вип. 2, с. 76–79, 2001.

[130] F. B. McLean, R. B. Oswald, D. R. Schallhorn and L. D. Buxton, “Temperature Dependence of the Dynamic Response of Si, Ge, and InSb to a Pulsed Electron Beam”, *J. Appl. Phys.*, vol. 42, no. 9, pp. 3474–3478, 1971, doi: 10.1063/1.1660756.

[131] A. Kalinichenko, V. T. Lazurik, and I. I. Zalyubovsky, *Introduction to Radiation Acoustics*. CRC Press, 2002. doi: 10.1201/9781482283679.

[132] V. T. Uvarov, A. G. Ponomarev, Yu. F. Lonin, V. V. Uvarov, A. N. Nikitin, V. N. Robuk, T. I. Ivankina, V. F. Klepikov, V. V. Lytvynenko, S. E. Donets and M. I. Bazaleev, “Radiation-acoustic control over the thermal parameter of construction materials irradiated by intense relativistic electron beams”, *Physics of Particles and Nuclei Letters*, vol. 11, no. 3, pp. 274–281, 2014, doi: 10.1134/S1547477114030157.

[133] P. D. Lee, P. N. Quested and M. McLean, “Modelling of Marangoni effects in electron beam melting”, *Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, vol. 356, no. 1739, pp. 1027–1043, 1998, doi: 10.1098/rsta.1998.0207.

[134] B. A. Demidov, M. V. Ivkin, V. V. Obukhov and Yu. F. Tomashchuk, “Dynamic characteristics of the interaction of power fuel REB with thick anodes”, *Zh. Tekh. Fiz.*, vol. 50, no. 10, pp. 2209–2214, 1980.

[135] В. В. Арсенюк, Н. І. Базалєєв, С. Є. Донець, В. Ф. Клепіков, В. В. Литвиненко, Ю. Б. Полторацький, В. В. Уваров і В. Т. Уваров “Стимулювання неоднорідностей у сильноточних пучках електронів та їх вплив на процеси масопереносу в мішенях, що опромінюються”, *Питання атомної науки і техніки*, т. 91, вип. 6, с. 124–127, 2007.

[136] О. П. Максимкин, А. В. Яровчук, К. В. Цай, Т. А. Доронина и А. В. Русакова, “Формирование кратеров, аналогичных космическим, на поверхности металлических материалов, бомбардируемых заряженными частицами”, *Известия НАН Республики Казахстан*, вып. 2, сс. 36–41, 2007.

[137] A. Ya. Leyvi, K. A. Talala, V. S. Krasnikov and A. P. Yalovets, “Modification of the Constructional Materials with the Intensive Charged Particle Beams and Plasma Flows”, Bulletin of the South Ural State University series “Mechanical Engineering Industry”, vol. 16, no. 1, pp. 28–55, 2016, doi: 10.14529/engin160103.

[138] V. Vassileva, K. Vutova, M. Naplatanova, N. Munirathnam and D. Amalnerkar, “Obtaining of pure molybdenum through electron beam melting of scrap materials”, *Electrotechnica & Electronica (E+E)*, vol. 51, no. 5–6, pp. 308–308, 2016.

[139] Berezovsky S. V., Sereda Yu. V. and Schelokovsky P. A., “Thermodynamic model of the order parameter field for the incommensurate phase in ferroelectric $Sn_2P_2Se_6$,” *Journal of Kharkov National University*, vol. 463, pp. 34–38, 1999.

[140] V. F. Klepikov, “Gauge principle and spontaneous symmetry breaking”, *Low Temperature Physics*, vol. 44, no. 12, pp. 1309–1312, 2018, doi: 10.1063/1.5078626.

[141] A. E. Jacobs, “Intrinsic domain-wall pinning and spatial chaos in continuum models of one-dimensionally incommensurate systems”, *Phys. Rev. B*, vol. 33, no. 9, pp. 6340–6345, 1986, doi: 10.1103/PhysRevB.33.6340.

[142] G. H. F. van Raaij, K. J. H. van Bemmel and T. Janssen, “Lattice models and Landau theory for type-II incommensurate crystals”, *Phys. Rev. B*, vol. 62, no. 6, pp. 3751–3765, 2000, doi: 10.1103/PhysRevB.62.3751.

[143] A. I. Buzdin, V. N. Men`shov and V. V. Tugushev, “Localized states on defects in electronic transitions into a soliton-lattice state”, *JEPT*, vol. 91, no. 6(12), pp. 2204–2219, 1986.

[144] R. Rajaraman, *Solitons and instantons : an introduction to solitons and instantons in quantum field theory*. North-Holland Pub. Co. ; Sole distributors for the USA and Canada, Elsevier Science Pub. Co., 1982.

[145] V. F. Klepikov, A. I. Olemskoi and S. V. Berezovsky, *Metallofizika i noveyshie tekhnologii*, vol. 19, no. 6, pp. 32–39, 1997.

[146] A. I. Olemskoi, V. F. Klepikov, I. V. Koplyk, O. B. Krut’ko and A. V. Khomenko, *Metallofizika i novejshie technologii*, vol. 18, no. 2, p. 3, 1996.

[147] V. Dvořák, “A Thermodynamic Theory of Gadolinium Molybdate”, *physica status solidi (b)*, vol. 46, no. 2, pp. 763–772, 1971, doi: 10.1002/pssb.2220460236.

[148] S. V Berezovsky, V. F. Klepikov, Y. V Sereda and D. I. Fedorec, “Inhomogeneous states of polarized systems in the model f 6”, *Problems of Atomic Science and Technology*, vol. 73, pp. 184–187, 1999.

[149] A. S. Zel`tser, T. K. Soboleva and A. E. Filippov, “Automatic blocking of nucleation and the universality of kinetic phenomena in first-order phase transitions”, *JEPT*, vol. 108, no. 1, pp. 356–372, 1995.

[150] V. Yu. Korda, S. V. Berezovsky, A. S. Molev, L. P. Korda and V. F. Klepikov, “A possible generalization of the phenomenological theory of phase transitions in type II ferroelectrics with incommensurate phase”, *Physica B Condens. Matter*, vol. 407, no. 17, pp. 3388–3393, 2012, doi: 10.1016/j.physb.2012.04.043.

[151] V. I. Gol’danskii and V. V. Kuz’min, “ Spontaneous breaking of mirror symmetry in nature and the origin of life”, *Sov. Phys. Usp.*, vol. 32, no. 1, pp. 1–29, 1989, doi: 10.1070/PU1989v032n01ABEH002674.

[152] Н. І. Базалєєв, В. Ф. Клепіков, і В. В. Литвиненко, “ Моделювання та прогнозування змін фізико-хімічних властивостей матеріалів під впливом випромінювань”, *Доповіді НАН України*, вип. 4, сс. 82–86, 1997.

[153] W. Goraczko, “Ionizing radiation and mitogenetic radiation: two links of the same energetic chain in a biological cell”, *Medical Hypotheses*, vol. 54, no. 3, pp. 461-468, 2000, doi: 10.1054/mehy.1999.0877.

[154] L. Ke-hsueh, “Coherent Radiation from DNA Molecules”, in *Recent Advances in Biophoton Research and Its Applications*, Singapore: World Scientific Publishing Co Pte Ltd, 1992, pp. 157–195, doi: 10.1142/9789814439671_0005.

[155] F. A. Popp, “Photon storage in biological systems”, *Electromagnetic bio-information*, pp. 123–149, 1979.

[156] J. Wang, Y. Zhang, L. Zhou, F. Yang, J. Li, Y. Du, R. Liu, W. Li and L. Yu, “Ionizing Radiation: Effective Physical Agents for Economic Crop Seed Priming and the Underlying Physiological Mechanisms”, *Int. J. Mol. Sci.*, vol. 23, no. 23, p. 15212, 2022, doi: 10.3390/ijms232315212.

[157] Н. І. Базалєєв, Є. О. Духін, В. Ф. Клепіков, В. В. Литвиненко, О. М. Могильна, Ю. А. Молчанов, О. М. Набока, С. М. Шаляпін і Г. І. Яровий, “Електрофізичні променеві технології в овочівництві: синергетична дія фізико-хімічних факторів”, *Східно-європейський журнал передових технологій*, т. 2, вип. 9(44), сс. 39–43, 2010.

[158] А. В. Бабіч, В. Ф. Клепіков, и Е. А. Мелякова, “Кіральність і спонтанне порушення рацемічности в наносистемах”, *Наносистеми, наноматеріали, нанотехнології*, т. 18, вип. 2, сс. 217–225, 2020.

[159] Ya. B. Zel’dovich and A. S. Mikhailov, “Fluctuation kinetics of reactions”, *Uspekhi Fizicheskih Nauk*, vol. 153, no. 11, p. 469, 1987, doi: 10.3367/UFNr.0153.198711d.0469.

[160] V. Albrecht, F. Simon, U. Gohs, B. Kretzschmar, E. Reinsch, R. Schunemann, U. A. Peuker, “The effects of additives and fillers on electrostatic sorting of plastic waste – Part 1: Model mixtures”, *Recovery: Recycling Technology Worldwide*, no. 2, pp. 36–45, 2016, [Online]. http://www.recovery-worldwide.com

[161] K. L. Ngai, *Relaxation and Diffusion in Complex Systems*. in Partially Ordered Systems. New York, NY: Springer New York, 2011, doi: 10.1007/978-1-4419-7649-9.

[162] J. Mertsching and H. J. Fischbeck, “The Incommensurate Peierls Phase of the Quasi-One-Dimensional Fröhlich Model with a Nearly Half-Filled Band”, *physica status solidi (b)*, vol. 103, no. 2, pp. 783–795, 1981, doi: 10.1002/pssb.2221030242.

[163] A. I. Buzdin and V. V Tugushev, “Phase diagrams of electronic and superconducting transitions to soliton lattice states”, *JEPT*, vol. 85, no. 2, pp. 735–745.

[164] M. C. Cross and P. C. Hohenberg, “Pattern formation outside of equilibrium”, *Rev. Mod. Phys.*, vol. 65, no. 3, pp. 851–1112, 1993, doi: 10.1103/RevModPhys.65.851.

[165] A. Fang, C. Adamo, S. Jia, R. J. Cava, S.-C. Wu, C. Felser and A. Kapitulnik, “Bursting at the seams: Rippled monolayer bismuth on $NbSe_2$”, *Sci. Adv.*, vol. 4, no. 4, 2018, doi: 10.1126/sciadv.aaq0330.

[166] V. F. Klepikov, V. V. Lytvynenko, Yu. F. Lonin, A. G. Ponomarev, O. G. Tolstolutskiy, V. V. Uvarov and V. T. Uvarov, “Dynamics of the gas-plasma torch formed by the high-current electron beam action on solid targets”, *Problems of Atomic Science and Technology*, vol. 59, no. 1, pp. 119–121, 2009.

[167] A. G. Kobets, P. R. Horodek, V. V. Lytvynenko, Yu. F. Lonin, A. G. Ponomarev, O. A. Startsev and V. T. Uvarov, “Melting effects of high-current relativistic electron beam on aluminum alloy 1933”, *Surface Engineering and Applied Electrochemistry*, vol. 51, no. 5, pp. 478–482, 2015, doi: 10.3103/S1068375515050075.

[168] Y. Qin, J. Zou, C. Dong, X. Wang, A. Wu, Y. Liu, S. Hao and Q. Guan, “Temperature–stress fields and related phenomena induced by a high current pulsed electron beam”, *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B*, vol. 225, no. 4, pp. 544–554, 2004, doi: 10.1016/j.nimb.2004.06.008.

[169] S. E. Donets, V. V. Lytvynenko, O. L. Rak, V. V. Shatov and A. R. Shymanovskyi, “Estimation of the effect of high-current electron beam irradiation on the radiative heat transfer modes on the molybdenum target”, *Problems of Atomic Science and Technology*, vol. 159, no. 5, pp. 45–49, 2025, doi: 10.46813/2025-159-045.

[170] V. V. Bryukhovetsky, V. F. Klepikov, V. V. Lytvynenko, D. E. Myla, V. P. Poyda, A. V. Poyda, V. T. Uvarov, Yu. F. Lonin and A. G. Ponomarev, “The features of the structural state and phase composition of the surface layer of aluminum alloy Al-Mg-Cu-Zn-Zr irradiated by the high current electron beam”, *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B*, vol. 499, pp. 25–31, 2021, doi: 10.1016/j.nimb.2021.02.011.

[171] V. V. Bryukhovetsky, V. F. Klepikov, V. V. Lytvynenko, O. A. Startsev, D. E. Myla, Yu. F. Lonin and A. G. Ponomarev, “Formation mechanism of craters on the surface of AA6111 aluminum alloy irradiated by quasi-relativistic high-current electron beam”, *Vacuum*, vol. 215, p. 112263, 2023, doi: 10.1016/j.vacuum.2023.112263.

[172] V. V. Bryukhovetsky, V. V. Lytvynenko, O. A. Startsev, D. E. Myla, Yu. N. Volkov and O. L. Rak, “Mechanisms of deformation induced by high-current pulsed electron beam irradiation”, *Mater. Lett.*, vol. 367, p. 136642, 2024, doi: 10.1016/j.matlet.2024.136642.

[173] V. V. Bryukhovetsky, V. F. Klepikov, V. V. Lytvynenko, D. E. Myla, Yu. F. Lonin and A. G. Ponomarev, “The structural phase state and strength properties of the surface layer of AA6111-T4 aluminum alloy irradiated by the high-current electron beam”, *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B*, vol. 519, pp. 1–8, 2022, doi: 10.1016/j.nimb.2022.03.008.

[174] A. Lucchini Huspek, V. Mataloni, A. Mohtashamifar, L. Paterlini and M. Bestetti, “Thermal Modelling of Metals and Alloys Irradiated by Pulsed Electron Beam: Focus on Rough, Heterogeneous and Multilayered Materials”, *Journal of Manufacturing and Materials Processing*, vol. 9, no. 4, p. 130, 2025, doi: 10.3390/jmmp9040130.

[175] S. Hao, P. Wu, J. Zou, T. Grosdidier and C. Dong, “Microstructure evolution occurring in the modified surface of 316L stainless steel under high current pulsed electron beam treatment”, *Appl. Surf. Sci.*, vol. 253, no. 12, pp. 5349–5354, 2007, doi: 10.1016/j.apsusc.2006.12.011.

[176] D. E. Myla, V. V. Bryukhovetsky, V. V. Lytvynenko, S. I. Petrushenko, O. O. Nevgasimov, Yu. F. Lonin, A. G. Ponomarev and V. T. Uvarov, “Microstructure and property modifications in surface layers of a AA6111 aluminum alloy induced by high-current pulsed relativistic electron beam”, *Problems of Atomic Science and Technology*, vol. 2022, no. 2, pp. 25–31, 2022, doi: 10.46813/2022-138-025.

[177] D. I. Proskurovsky, V. P. Rotshtein, G. E. Ozur, A. B. Markov, D. S. Nazarov, V. A. Shulov, Yu. F. Ivanov and R. G. Buchheit, “Pulsed electron-beam technology for surface modification of metallic materials”, *Journal of Vacuum Science & Technology A: Vacuum, Surfaces, and Films*, vol. 16, no. 4, pp. 2480–2488, 1998, doi: 10.1116/1.581369.

[178] D. E. Myla, V. V. Bryukhovetsky, V. V. Lytvynenko, V. P. Poyda, A. V. Poyda, V. F. Klepikov, V. T. Uvarov, Yu. F. Lonin and A. G. Ponomarev, “Analysis of changes in the phase and structural state of an aluminum alloy 1933 surface layer, melted by a pulsed electron beam”, *Problems of Atomic Science and Technology*, vol. 126, no. 2, pp. 33–38, 2020.

[179] B. Gao, L. Hu, S. Li, Y. Hao, Y. Zhang, G. Tu and T. Grosdidie, “Study on the nanostructure formation mechanism of hypereutectic Al–17.5Si alloy induced by high current pulsed electron beam”, *Appl. Surf. Sci.*, vol. 346, pp. 147–157, 2015, doi: 10.1016/j.apsusc.2015.04.029.

[180] C. Zhang, Y. Zhang, N. Tian, S. Chen, Z. Qian, P. Lv and Q. Guan, “Microstructures of pure nickel induced by high-current pulsed electron beam irradiation”, *Protection of Metals and Physical Chemistry of Surfaces*, vol. 52, no. 5, pp. 869–875, 2016, doi: 10.1134/S2070205116050269.

[181] Y. Samih, G. Marcos, N. Stein, N. Allain, E. Fleury, C. Dong and T. Grosdidier, “Microstructure modifications and associated hardness and corrosion

improvements in the AISI 420 martensitic stainless steel treated by high current pulsed electron beam (HCPEB)", *Surf. Coat. Technol.*, vol. 259, no. PC, pp. 737–745, 2014, doi: 10.1016/j.surfcoat.2014.09.065.

[182] P. Yan, T. Grosdidier, X. Zhang and J. Zou, "Formation of large grains by epitaxial and abnormal growth at the surface of pulsed electron beam treated metallic samples", *Mater. Des.*, vol. 159, pp. 1–10, 2018, doi: 10.1016/j.matdes.2018.08.033.

[183] Y. Sun, K. Li, B. Gao, P. Sun, H. Fu, Z. Liu and J. Yin, "Study on microstructure and wear resistance of Zr-17Nb alloy irradiated by high current pulsed electron beam", *Reviews on Advanced Materials Science*, vol. 59, no. 1, pp. 514–522, 2020, doi: 10.1515/rams-2020-0047.

[184] S. N. Kabekkodu, A. Dosen and T. N. Blanton, "PDF-5+: a comprehensive Powder Diffraction FileTM for materials characterization", *Powder Diffr.*, vol. 39, no. 2, pp. 47–59, 2024, doi: 10.1017/S0885715624000150.

[185] Y. Qin, C. Dong, Z. Song, S. Hao, X. Me, J. Li, X. Wang, J. Zou and T. Grosdidier, "Deep Modification of materials by thermal stress wave generated by irradiation of high-current pulsed electron beams", *Journal of Vacuum Science & Technology A: Vacuum, Surfaces, and Films*, vol. 27, no. 3, pp. 430–435, 2009, doi: 10.1116/1.3093876.

[186] V. V. Bryukhovetsky, V. V. Lytvynenko, D. E. Myla, V. A. Bychko, Yu. F. Lonin, A. G. Ponomarev and V. T. Uvarov, "Effect of Structural and Phase Changes under Relativistic Electron Pulsed Beam Irradiation on the Aluminum Alloys Micro-hardness", *Physics and Chemistry of Solid State*, vol. 22, no. 4, pp. 655–663, 2021, doi: 10.15330/pcss.22.4.655-663.

[187] V. V. Bryukhovetsky, V. V. Lytvynenko, O. A. Startsev, D. E. Myla, Yu. N. Volkov and O. L. Rak, "Mechanisms of deformation induced by high-current pulsed electron beam irradiation", *Mater. Lett.*, vol. 367, p. 136642, 2024, doi: 10.1016/j.matlet.2024.136642.

[188] K. M. Zhang, J. X. Zou, B. Bolle and T. Grosdidier, "Evolution of residual stress states in surface layers of an AISI D2 steel treated by low energy high current

pulsed electron beam", *Vacuum*, vol. 87, pp. 60–68, 2013, doi: 10.1016/j.vacuum.2012.03.061.

[189] K Kanaya and S Okayama, "Penetration and energy-loss theory of electrons in solid targets", *J. Phys. D Appl. Phys.*, vol. 5, no. 1, pp. 43–58, 1972, doi: 10.1088/0022-3727/5/1/308.

[190] L. Yang, A. Hussain, S. Mao, B. Da, K. Tőkési and Z. J. Ding, "Electron backscattering coefficients of molybdenum and tungsten based on the Monte Carlo simulations", *Journal of Nuclear Materials*, vol. 553, p. 153042, 2021, doi: 10.1016/j.jnucmat.2021.153042.

[191] E. A. Lukashev, E. V. Radkevich, N. N. Yakovlev and O. A. Vasil'eva, "Introduction to the generalized theory of non-equilibrium Cahn-Hilliard phase transitions (Thermodynamic problems in continuum mechanics)", *Journal of Samara State Technical University, Ser. Physical and Mathematical Sciences*, vol. 21, no. 3, pp. 437–472, 2017, doi: 10.14498/vsgtu1554.

[192] G. Z. Gershuni, E. M. Zhukhovitskii and R. Kelly, *Convective stability of incompressible fluids*, Jerusalem: Israel Program for Scientific Translations, 1976.

ДОДАТОК А

СПИСОК ПУБЛІКАЦІЙ ЗДОБУВАЧА ЗА ТЕМОЮ ДИСЕРТАЦІЇ

Наукові праці в наукових фахових виданнях України, що входять до міжнародних наукометричних баз Scopus та Web of Science:

1. **A. R. Shymanovskyi** and V. F. Klepikov, “Spontaneous chirality of the organic environment as a sign of external radiation exposure”, *Problems of Atomic Science and Technology*, vol. 157, no. 3, pp. 139–141, 2025, doi: 10.46813/2025-157-139.

(Особистий внесок здобувача: участь у формулюванні та аналізі літературних даних, інтерпретації результатів та написанні статті)

2. S. E. Donets, V. V. Lytvynenko, O. L. Rak, V. V. Shatov and **A. R. Shymanovskyi**, “Estimation of the effect of high-current electron beam irradiation on the radiative heat transfer modes on the molybdenum target”, *Problems of Atomic Science and Technology*, vol. 159, no. 5, pp. 45–49, 2025, doi: 10.46813/2025-159-045.

(Особистий внесок здобувача: виконання аналітичних обчислень та розрахунків, написання окремих розділів, участь в обговоренні результатів)

3. V. V. Bryukhovetsky, S. E. Donets, S. A. Kniaziev, O. V. Subbotin, V. V. Lytvynenko, S. I. Bogatyrenko, O. L. Rak and **A. R. Shymanovskyi**, “Structural and phase transformations in a molybdenum target under the impact action of a high-power electron beam”, *Problems of Atomic Science and Technology*, vol. 160, no. 6, pp. 76–82, 2025, doi: 10.46813/2025-160-076.

(Особистий внесок здобувача: виконання аналітичних обчислень та розрахунків, написання окремих розділів, участь в обговоренні результатів)

4. **A. R. Shymanovskyi** and V. F. Klepikov, “Partial Exact Solutions of Nonlinear Distribution One-Component Order Parameter in Equilibrium Systems”, *East European Journal of Physics*, vol. 158, no. 4, pp. 157–163, 2025, doi: 10.26565/2312-4334-2025-4-13.

(Особистий внесок здобувача: участь у формулюванні та аналізі

літературних даних, виконання аналітичних обчислень та розрахунків, інтерпретації результатів та написанні статті)

5. **A. R. Shymanovskyi** and V. F. Klepikov, “Analytical solutions of the thermodynamic potential of the Michelson model in equilibrium systems”, *Problems of Atomic Science and Technology*, vol. 161, no. 1, pp. 103–107, 2026, doi: 10.46813/2026-161-103.

(Особистий внесок здобувача: участь у формулюванні та аналізі літературних даних, виконання аналітичних обчислень та розрахунків, інтерпретації результатів та написанні статті)

Наукові праці, які засвідчують апробацію матеріалів дисертації:

6. **A. R. Shymanovskyi,** V. F. Klepikov, and A. V. Kotova, “Evolution and critical phenomena”, in XII Ukrainian Scientific Conference “*Academic and Scientific Challenges of Diverse Fields of Knowledge in the 21st Century. CLIL in Action”*, Kharkiv, 24 Mar. 2023, Kharkiv: V. N. Karazin Kharkiv Nat. Univ., 2023, pp. 323–329.

(Особистий внесок здобувача: участь у формулюванні задач дослідження, аналізі літературних даних, інтерпретації результатів, написанні статті, доповідь)

7. **А. Р. Шимановський** і В. Ф. Клепіков, “Термодинамічний підхід до опису радіаційно-стимульованих перетворень в органічних речовинах”, у II Міжнар. наук.-техн. конф. імені В. Воєводіна *“Проблеми сучасної ядерної енергетики”*, Харків, 16–18 Квіт. 2025, Київ: Вістка, 2025. с. 47.

(Особистий внесок здобувача: участь у формулюванні задач дослідження, аналізі літературних даних, інтерпретації результатів, написанні тез, доповідь)

8. **А. Р. Шимановський** і В. Ф. Клепіков, “Нелінійні властивості просторової модуляції параметру порядку в тіокарбаміді”, у *10-та Українська наукова конференція з фізики напівпровідників*, Ужгород, 26–30 Трав. 2025, Ужгород: ТОВ «РІК-У», 2025, с. 147.

(Особистий внесок здобувача: участь у формулюванні задач дослідження, аналізі літературних даних, інтерпретації результатів, написанні тез, доповідь)

9. С. Є. Донець, В. В. Литвиненко, О. А. Мєлякова й **А. Р. Шимановський** “Особливості радіаційних методів сепарації відходів пластику для їх переробки та запобігання засміченню морського середовища”, у XVI Міжнар. наук.-практ. конф. *“Сучасні інформаційні та інноваційні технології на транспорті (MINTT – 2025)”*, Одеса, 28–30 Трав. 2025, Одеса: Херсонська державна морська академія, 2025, с. 377–379.

(Особистий внесок здобувача: аналіз літературних даних, інтерпретації результатів, написанні окремого розділу)

10. **А. Р. Шимановський** і В. Ф. Клепіков “Частинні точні розв’язки моделі Міхельсона фазових переходів першого роду в чистих матеріалах”, у 7-ї Міжнар. конф. *“Високочисті матеріали: отримання, застосування, властивості”*, Харків, 15–17 Вер. 2025, Харків: ННЦ ХФТІ, 2025, с. 46.

(Особистий внесок здобувача: участь у формулюванні задач дослідження, аналізі літературних даних, інтерпретації результатів, написанні статті та тези, доповідь)