

08,11

Влияние процессов микросегрегации на формирование периодических примесных сверхструктур в бинарных сплавах

© А.А. Чеврычкина, А.Л. Корженевский[†]

Институт проблем машиноведения РАН,
Санкт-Петербург, Россия

[†] E-mail: alekorzh@mail.ru

Поступила в Редакцию 23 апреля 2021 г.

В окончательной редакции 23 апреля 2021 г.

Принята к публикации 12 мая 2021 г.

Проведен анализ влияния эффекта захвата подвижных примесных атомов неподвижными дефектами на сверхструктуры, формирующиеся в результате фазовых переходов типа направленной кристаллизации. В рамках простой капиллярно-волновой модели показано, что в наиболее типичном случае, когда время диффузионного скачка примесных атомов много меньше, чем характерное время их сегрегации на дефектах, условия возникновения периодических сверхструктур облегчаются при учете этого эффекта.

Ключевые слова: фазовые переходы, градиент температуры, подвижные примеси, дефекты, микросегрегация, условия формирования периодических примесных сверхструктур.

DOI: 10.21883/FTT.2021.10.51411.094

1. Введение

Большинство технологически важных материалов являются сплавами (сталь, сплавы на основе алюминия, титана, никеля и др.) [1]. Во многих случаях одним из основных требований к изделиям из них является пространственная однородность образцов. В соответствии с этим требованием развиты промышленные и лабораторные методики, базирующиеся на использовании при термообработке сплавов тех или иных фазовых переходов (ФП). Поскольку кинетика образования новых фаз в условиях, далеких от равновесных, разработана в целом слабо, то зачастую необходимой степени однородности материала-продукта приходится добиваться за счет работы в квазиравновесных режимах. Разумеется, это приводит к большой длительности промежуточных процессов обработки материалов и снижению интенсивности производства.

В последние годы, отчасти в связи с увеличением объемов серийной продукции, а также из-за растущей общей тенденции к миниатюризации различных изделий и устройств, резко возросла потребность в развитии теории, способной описывать быструю кинетику ФП в образцах достаточно малых размеров. При этом необходимо учитывать и то обстоятельство, что в ряде случаев по технологическим причинам целесообразно вместо отдельных образцов создавать с помощью ФП регулярные пространственно-неоднородные микроструктуры (patterns) с заданными свойствами непосредственно в едином блоке материала.

Принимая все это во внимание, наши предшествующие работы [2–11] были посвящены разработке теории нестационарной динамики ФП типа быстрой направленной кристаллизации и расчетам параметров периодических пространственных примесных профилей,

формирующихся в твердых сплавах-продуктах. В этой теории в первую очередь учитывалось, что в процессе создания таких периодических сверхструктур, ключевую роль играют подвижные атомы легирующего компонента. Действительно, с самой общей точки зрения, их увлечение межфазной границей (МФГ) всегда сопровождается диссипацией энергии, что приводит к появлению эффективной силы трения (solute drag), действующей на границу и влияющей на ее динамику. Нестационарность этой динамики ведет к неоднородному отложению примеси позади МФГ. В наиболее интересном режиме периодической динамики МФГ возникают регулярные примесные сверхструктуры.

Можно дать и более наглядную трактовку причины появления указанной силы трения. Уже само наличие вектора скорости означает нарушение симметрии вперед-назад, что ведет к пространственной асимметрии примесного облака, сформировавшегося вокруг движущейся МФГ. В результате возникает дисбаланс сил взаимодействия с ней примесных атомов, находящихся спереди и позади границы, так что суммарная сила, действующая на нее, оказывается ненулевой.

В определенном диапазоне скоростей протяжки образца V_p в поле заданного градиента температуры ∇T эта сила трения оказывается падающей с ростом V_p , что приводит к неустойчивости движения плоского фронта с постоянной скоростью. В результате устанавливается режим с ее периодическими осцилляциями вокруг экспериментально заданного значения средней скорости $V = V_p$.

В работах [2–6,8,10,11] было показано, что в высокоскоростной части неустойчивого диапазона значений V_p , описание нестационарной динамики МФГ сплавах может быть упрощено до решения дифференциального уравнения для нелинейного осциллятора с отрицатель-

ным трением типа обобщенного уравнения Рэлея. Наличие у него устойчивого предельного цикла на плоскости координата МФГ — скорость МФГ является причиной возникновения автоколебательной динамики фронта ФП. При этом осцилляции скорости фронта приводят к тому, что легирующая примесь откладывается позади него неравномерно, так что в фазе-продукте возникает регулярная слоистая примесная сверхструктура. Ее пространственный профиль был нами рассчитан в зависимости от найденной из решения уравнения для нелинейного осциллятора формы предельного цикла. С помощью дополнительных компьютерных вычислений было также подтверждено, что решения исходных интегро-дифференциальных уравнений движения близки к решениям, полученным для более простого дифференциального уравнения нелинейного осциллятора.

Вместе с тем надо отметить, что в работах [2–11] для упрощения математического анализа была использована модель бесконтактной среды, в которой полное число диффундирующих примесей считалось неизменным. Однако в реальных образцах всегда есть и неподвижные дефекты, взаимодействие с которыми влияет на динамику подвижных примесей. Поскольку установить сколько-нибудь детально степень этого влияния в сильнонеравновесных условиях быстрых ФП без конкретизации свойств самого дефектного ансамбля невозможно, в настоящей работе мы провели исследование влияния эффекта захвата (trapping) подвижных примесей неподвижными дефектами на нестационарную динамику МФГ в рамках максимально упрощенной модели. Мы показали, что для такой модели задача с хорошей точностью допускает аналитическое решение. Оно обобщает полученные ранее результаты [2–11] и позволяет делать количественные предсказания об изменении профилей периодических примесных сверхструктур в дефектных сплавах-продуктах. Тем самым, к таким экспериментально варьируемым параметрам ФП типа направленной кристаллизации, как градиент температуры ∇T и скорость протяжки V_p , удалось добавить еще один независимый управляющий параметр, учитывающий степень микросегрегации атомов легирующей примеси на статических дефектах или их десорбцию из образца.

2. Формулировка модели и исходных уравнений движения межфазной границы и легирующей примеси

Как известно, эффект захвата диффундирующих примесей может происходить на дефектах кристалла самых разных типов и масштабов, начиная от образования комплексов, состоящих из нескольких атомов и до формирования микросегрегационных слоев на границах протяженных неоднородностей (таких как дислокации, межзеренные границы, дефекты упаковки и др.). Поскольку даже идеальный кристалл имеет ограничивающую его поверхность, этот эффект является универсальным, поэтому необходимо анализировать степень его

влияния на динамику МФГ в любом сплаве, в котором предполагается создать примесную сверхструктуру.

С физической точки зрения, захват диффундирующего атома примеси неподвижным дефектом означает исключение этого атома из процесса формирования примесного облака, сопровождающего движение МФГ. При этом исчезает и вклад этого атома в действующую на нее силу трения, что, разумеется, изменяет динамику границы. С математической точки зрения описание этого процесса подразумевает, что полное число *подвижных* атомов примеси не сохраняется. Это значит, что в уравнении диффузии для концентрации подвижной легирующей примеси необходимо ввести дополнительные члены, „стоки“, конкретный вид которых определяется структурой ансамбля неподвижных сегрегирующих дефектов данного образца.

Так же, как и в работах [2–11], основой нашего теоретического подхода к описанию нестационарной динамики МФГ в разбавленных бинарных сплавах остается капиллярно-волновая модель, математически строго выведенная из менее удобной для расчетов (особенно аналитических) стандартной модели фазового поля [12]. В этой статье мы ограничимся анализом динамики плоских МФГ, для которых эффективный гамильтониан одномерной капиллярно-волновой модели принимает предельно простую форму

$$H = \frac{\kappa(T)}{2} \int dz [C - C_e(z - Z)]^2, \quad (1)$$

где Z — координата границы, C — концентрация подвижных примесей, функция $C_e(z - Z)$ описывает их равновесное пространственное распределение в присутствии границы. Будем считать, что это распределение обладает конечной характерной шириной ξ . В случае разбавленного бинарного сплава функция $k(T)$ имеет вид

$$k(T) = - \left(\frac{\partial C}{\partial T} \right)^{-1} \frac{L}{T_c} \frac{1}{\Delta C(T)}, \quad (2)$$

где L , T_c и $\Delta C(T)$ обозначают теплоту превращения, температуру ФП и ширину области концентрационного гистерезиса соответственно.

Уравнения движения МФГ и подвижной примеси, увлекаемой ею, а также сегрегирующей на неподвижных дефектах, запишем в виде

$$\partial_t Z = \Lambda \left(F - \frac{\delta H}{\delta Z} \right), \quad (3)$$

где Λ — кинетический коэффициент, движущая сила F , действующая на МФГ, определяется как $F = L(T_c - T)/T_c$. Наличие неподвижных дефектов учитывается сдвижкой температуры T_c . Значение локальной температуры T определяется заданной средней скоростью границы v_p и фиксированным градиентом температуры G :

$$T = T_c + G(z - v_p t). \quad (4)$$

В рамках нашей модели будем считать, что неподвижные дефекты обладают одной и той же эффективной мощностью стока \tilde{r} , а их распределение в пределах образца пространственно-однородно. Тогда уравнение диффузии для подвижных атомов легирующей примеси принимает вид

$$\partial_t C = D \frac{\partial^2}{\partial z^2} \left(\frac{\delta H}{\delta C} \right) - \tilde{r} C, \quad (5)$$

где D — коэффициент диффузии. Хотя выбор модели ансамбля неподвижных дефектов в такой форме максимально упрощен, он позволяет установить аналитически, как процесс сегрегации влияет на динамику МФГ и формирующуюся позади нее примесную сверхструктуру в материале-продукте.

Для удобства записи формул в дальнейших расчетах, введем безразмерные переменные: ξ

$$\frac{z}{\xi} \rightarrow Z, \quad \frac{Dt}{\xi^2} \rightarrow t, \quad \frac{2(C - C_0)}{\Delta C} \rightarrow C, \quad (6)$$

где C_0 — номинальная концентрация сплава, и независимые безразмерные параметры:

$$\gamma = \left(\frac{\Delta C}{2} \right)^2 \frac{\kappa \xi^2}{k_B T_c}, \quad p = \frac{\Lambda \xi^2}{D}, \quad g = \frac{\xi G}{T_c}, \quad \tilde{r} \rightarrow \frac{Dr}{\xi^2}, \quad (7)$$

где k_B — константа Больцмана.

При этом безразмерная скорость будет измеряться в единицах диффузионной скорости $v_d = \frac{D}{\xi}$: $v = V/v_d$. Безразмерный параметр r описывает отношение времени диффузионного скачка примесного атома к характерному времени до его сегрегации на дефекте. Во введенных безразмерных переменных уравнения движения модели (1)–(5) приобретают вид:

$$\frac{1}{p} \partial_t Z = F(Z) - \gamma \int_{-\infty}^{+\infty} dz C'_e(z - Z(t)) [C(z, t) - C_e(z - Z(t))], \quad (8)$$

$$\partial_t C = \partial_{zz} [C - C_e(z - Z(t))] - rC. \quad (9)$$

3. Общий вид уравнения движения межфазной границы, сопровождаемой облаком подвижных примесей, с учетом их сегрегации на неподвижных дефектах-ловушках

Поскольку появление регулярных пространственно-периодических сверхструктур отвечает установившимся периодическим колебаниям скорости МФГ вокруг постоянного заданного значения скорости смещения

изотерм V_p , то естественно выбрать решение диффузионного уравнения (9) с граничным условием $C(z, t = -\infty) = 0$:

$$C(z, t) = \int_{-\infty}^t dt' \int_{-\infty}^{+\infty} dz' \partial_{z'} \Im(z - z', t - t') C'_e(z - Z(t')). \quad (10)$$

Для проведения последующих вычислений в модели с конечной шириной МФГ удобно записать функцию Грина в уравнении (10) в виде представления Фурье

$$\Im(z, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk}{2\pi} e^{[-(k^2+r)t+ikz]}. \quad (11)$$

Введем координаты ξ и ξ' , отсчитанные от положения МФГ в моменты времени t и t' :

$$\xi \equiv z - Z(t), \quad \xi' \equiv z' - Z(t'). \quad (12)$$

Подставив (10), (11), (12) в уравнение (9) и разложив в ряд Тейлора разность $Z(t') - Z(t)$, получим представление функции Грина в виде ряда по возрастающим производным ускорений МФГ:

$$\begin{aligned} \Im(\xi - \xi' + Z(t) - Z(t'), t - t') &= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk}{2\pi} \\ &\times e^{[ik(\xi - \xi') - (k^2\tau + ikv(t)\tau)]} \exp[-ik \sum_{n \geq 2} \frac{(-1)^n}{n!} \tau^n \partial_t^{n-1} v(t)], \end{aligned} \quad (13)$$

где $\tau \equiv t - t'$ и $v(t) \equiv \dot{Z}$.

Если подставить функцию Грина $\Im(z, t)$, записанную в виде ряда (13), в решение для избытка концентрации подвижных примесей (10), то в нем становится возможным выполнить для каждого члена интегрирование по времени τ в явном виде. Это удастся потому, что, хотя мы пока не сделали никаких предположений о динамике координаты МФГ, все характеристики траектории $Z(t)$ входят в подынтегральное выражение в (10) только в виде параметрических множителей, зависящих от t , но независящих от τ . Соответственно, решение уравнения (10) запишется в виде суммы вкладов от ускорений всех рангов (гиперускорений)

$$C(z, t) = C_0(\xi, \dot{Z}) + \dot{Z} C_1(\xi; \dot{Z}, \dots) + \ddot{Z} C_2(\xi; \dot{Z}, \dots) + \dots, \quad (14)$$

где точки сверху обозначают дифференцирование по времени. В этом разложении решения по ускорениям нулевой член C_0 описывает, разумеется, примесный профиль вокруг МФГ, движущейся с постоянной скоростью.

Очевидно, что, подставив затем (14) в (8), мы получим точное замкнутое уравнение на траекторию $Z(t)$ также содержащее бесконечный ряд от вкладов всех гиперускорений. С чисто математической точки зрения,

вполне естественно, что интегральный оператор динамики некоторого объекта, вынужденного двигаться в среде „с памятью“, оказалось возможным эквивалентным образом записать в виде бесконечного ряда дифференциальных („мгновенных“ во времени) операторов. В такой общей постановке математическая трудность решения задачи остается той же самой, независимо от используемого операторного представления.

Но в задачах динамики физических объектов, типа МФГ, это зачастую не так. Дело в том, что вынуждающая движение МФГ внешняя „сила“ (называемая в зависимости от контекста задачи „пересыщением“, „перенапряжением“ и т.п.), как правило, много меньше внутренних „сил“ в равновесной среде. В нашей конкретной задаче внутренние „силы“ задают толщину МФГ микроскопического масштаба $\xi \sim 1 \text{ nm}$ и температуру ФП $T_c \sim (10^2 - 10^3) \text{ K}$, а внешняя „сила“ (например, печь) задает величину градиента температуры $\nabla T \sim \frac{(10-10^3) \text{ K}}{\text{cm}}$, типичную для твердотельных ФП. В результате в задаче появляется малый параметр $g = \frac{\xi \nabla T}{T_c}$, т.е. безразмерный градиент температуры оказывается малым¹.

Целесообразно использовать это физическое обстоятельство следующим образом. Очевидно, что уравнение (8) обладает решением $Z = v_p t$ (которое в зависимости от значений безразмерных параметров p, γ, r, g может быть как устойчивым, так и неустойчивым.) Вычтем из нестационарного уравнения (8) его же, но записанное для стационарного режима $Z = v_p t$. Тогда уравнение для отклонения координаты плоской МФГ от стационарного положения $h = Z(t) - v_p t$ примет вид

$$\sum_{n=1}^{+\infty} M_n(\dot{Z}, \ddot{h}, \dots) \frac{d^n \ddot{h}}{dt^n} + M(v_p \dot{h}) \ddot{h} + R(v_p + \dot{h}) + gh = 0, \quad (15)$$

в котором функции $M(v_p + \dot{h})$ и $R(v_p + \dot{h})$ для нашей задачи будут вычислены в явном виде в следующем разделе. Если теперь выполнить в (15) переход к новым переменным $gh \rightarrow h, gt \rightarrow t$ (это преобразование сохраняет относительную скорость \dot{h} неизменной), то в них уравнение (15) переписется в виде

$$\sum_{n=1}^{+\infty} M_n(v_p + \dot{h}, g\ddot{h}, \dots) g^{(n+1)} \frac{d^n \ddot{h}}{dt^n} + gM(v_p + \dot{h}) \ddot{h} + R(v_p + \dot{h}) + h = 0, \quad (16)$$

поскольку каждое дифференцирование по новому времени сопровождается появлением дополнительного малого множителя g . Мы видим из (16), что, в отличие от общей абстрактной математической ситуации, нелокальный во времени оператор „памяти“ может быть записан

¹ Отметим, что значение безразмерного градиента оказывается очень малым даже в случае кристаллизации из расплавов, несмотря на то, что величина размерного градиента примерно на 3 порядка больше.

в виде асимптотического ряда по малому параметру физического происхождения. Это открывает возможность аппроксимировать отклонение $h(t)$ решением редуцированного уравнения (16), в котором сохранены только последние три члена в левой части, т.е. искать решения уравнения для нелинейного осциллятора с малой эффективной массой. При этом характер установившейся временной зависимости $h(t)$ определится знаком производной эффективной силы трения R' при $v = v_p$ [13]. При $R' > 0$ стационарное движение МФГ остается устойчивым, если же $R' < 0$, то фиксированная точка $h = \dot{h} = 0$ теряет устойчивость, и динамика МФГ становится нестационарной.

Из представления для избытка концентрации подвижной примеси $C(z, t)$, записанного в форме уравнения (14), очевидно, что для появления пространственно-периодических слоистых примесных сверхструктур необходимо наличие у уравнения (16) решений, отвечающих автоколебаниям МФГ. Роль же процесса захвата подвижных примесей дефектами, описанного в нашей простой модели единственным „обобщенным“ (lump) параметром r , определится тем, усиливает или ослабляет этот параметр тенденцию к возникновению этих автоколебаний. Решение этого вопроса требует вычислений, проведение которых становится возможным только после конкретизации модельного вида равновесного пространственного распределения избытка подвижной примеси в окрестности МФГ. Эти расчеты приведены в следующем разделе.

4. Изменения области существования и размеров устойчивого цикла автоколебательных решений динамики МФГ, обусловленные эффектом захвата подвижных примесей дефектами-ловушками

Итак, нам надо рассчитать зависящие как от скорости, так и от нескольких материальных параметров функции $M(v, \gamma, r)$ и $R(v, p, \gamma, r)$ которые входят в редуцированное уравнение (16):

$$gM(v_p + \dot{h}) \ddot{h} + R(v_p + \dot{h}) + h = 0. \quad (17)$$

Эффективная сила трения $R(v_p + \dot{h})$ состоит из линейного по относительной скорости вклада $\frac{\dot{h}}{p}$, а также нелинейного по ней вклада, происходящего от члена в уравнении (13), не зависящего от ускорений. Последний, очевидно, совпадает с функцией Грина для стационарной задачи $\mathfrak{S}_p(\xi; v, r)$

$$\mathfrak{S}_p(\xi; v) = (v^2 + 4r)^{-1/2} \exp \left[-\frac{1}{2} \left(\xi + \left| \xi \sqrt{v^2 + 4r} \right| \right) \right], \quad (18)$$

так что выражение для силы трения имеет вид

$$R(v_p + \dot{h}) = \frac{\dot{h}}{p} - G_p(v + \dot{h}) + G_p(v), \quad (19)$$

где примесный вклад в силу трения стационарной задачи $G_p(v)$ определен как:

$$G_p(v) \equiv -\gamma \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi C'_e(\xi) C_0(\xi; v), \quad (20)$$

а примесное распределение $C_0(\xi; v)$ дается формулой, аналогичной (10), но для случая МФГ, движущейся с постоянной скоростью v :

$$C_0(\xi; v) = \int_{-\infty}^{\xi} d\xi' C'_e(\xi') \mathfrak{S}_p(\xi - \xi', v, r). \quad (21)$$

Предполагая, что на самой МФГ существенной сегрегации подвижных примесей не происходит², равновесное распределение примеси C_e естественно записать в виде плавной ступеньки, „соединяющей“ фазы с разной концентрацией

$$C_e(z - Z) = H(Z - z) \exp(z - Z) + H(z - Z) [2 - \exp(Z - z)], \quad (22)$$

где $H(z)$ — функция Хэвисайда. Подставляя (22) в (20) и (21), получаем

$$C_0(\xi; v) = \frac{1}{\sqrt{v^2 + 4r}} \left\{ \exp(\lambda_+ \xi) \int_{-\infty}^{\xi} C'_e \exp(-\lambda_+ \xi') d\xi' - \exp(-\lambda_- \xi) \int_{-\infty}^{\xi} C'_e \exp(-\lambda_- \xi') d\xi' \right\} \quad (23)$$

и силу $G_p(v)$, которую удобно записать в компактной форме

$$G_p(v) = (v^2 + 4r)^{-1/2} [\lambda_+ g(-\lambda_+) - \lambda_- g(-\lambda_-)], \quad (24)$$

где

$$g(x) = \gamma \frac{x + 2}{(x + 1)^2}, \quad \lambda_{\pm} = \frac{1}{2} \left(-v \pm \sqrt{v^2 + 4r} \right), \quad (25)$$

Как было указано в предыдущем разделе, характер динамики МФГ определяется знаком производной силы трения $R'(v = v_p)$. Из (19), (24) и (25) находим для нее выражение

$$R'(v) = \frac{1}{p} - \gamma \frac{(3 + v + r)}{(1 + v - r)^2}. \quad (26)$$

² Расчет динамических характеристик при наличии заметного эффекта сегрегации примеси на МФГ не представляет дополнительных трудностей.

Из (26) следует, что при $r < 1$ (т.е. в типичной ситуации, когда время захвата примесного атома дефектом больше, чем время его диффузионного перескока) область неустойчивости стационарной динамики МФГ расширяется.

Чтобы понять, как именно проявится присутствие неподвижных дефектов в нестационарном режиме, нам надо вычислить также зависимость от параметра r для эффективной массы $M(v, r)$ и затем решить уравнение (17).

Эффективная масса происходит от члена с $n = 2$ в разложении функции Грина в уравнении (13). Интеграл по τ в этом вкладе имеет вид

$$-\frac{\dot{v}}{2} \int_0^{+\infty} k^2 \tau^2 [\exp(-k^2 + ikv - r)\tau] d\tau = \frac{\dot{v}}{2} \frac{\partial^2}{\partial v^2} \left(\frac{1}{k^2 - ikv + r} \right). \quad (27)$$

Выполнив последующее интегрирование по k получаем

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk}{2\pi} \exp[ik(\xi - \xi')] \frac{1}{k^2 - ikv + r} = \frac{1}{\sqrt{v^2 + 4r}} \times \{ H(\xi - \xi') \exp[\lambda_+(\xi - \xi')] + H(\xi - \xi') \exp[\lambda_-(\xi - \xi')] \}. \quad (28)$$

Используя (10), (21), (27), (28) замечаем, что выражение для примесного профиля в автоколебательном режиме может быть достаточно простым образом выражено через решение, полученное для стационарного движения МФГ $C_0(\xi, v)$:

$$C(z, t) = C_0(\xi, v) + \frac{\dot{v}}{2} \frac{\partial^2}{\partial v^2} \left\{ \frac{1}{\sqrt{v^2 + 4r}} [C_0(\xi, -\lambda_+) + C_0(\xi, -\lambda_-)] \right\}, \quad (29)$$

где стационарный примесный профиль $C_0(\xi, v)$ определяется в явном виде формулой (23).

Из (8), (10), (13), (27)–(29) находим выражение для эффективной массы также в удобной компактной форме

$$M(v) = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial v^2} \left\{ \frac{1}{\sqrt{v^2 + 4r}} [g(-\lambda_+) + g(-\lambda_-)] \right\}. \quad (30)$$

Построенные в соответствии с формулами (19), (24) и (30) рис. 1 для силы трения $R(v, r)$ и рис. 2 для эффективной массы $M(v, r)$ демонстрируют зависимость этих функций от параметра захвата подвижной примеси r . Значения скорости протяжки и материальных параметров рис. 1, 2 были выбраны так, чтобы автоколебательная динамика МФГ и обусловленные ею пространственно-периодические примесные профили слоистых сверхструктур не были возмущены морфологической неустойчивостью Маллинза и Секерки [14]. В противном случае

МФГ становится неплоской, и использованная нами в расчетах выше одномерная версия капиллярно-волновой модели теряет свою применимость.

Затем с помощью формул (19, 24, 30) было численно решено уравнение (17), описывающее динамику МФГ.

На рис. 3 показано, что эффект захвата подвижных примесей ведет к существенному росту размеров устойчивого предельного цикла уже при очень малых значениях параметра захвата r . Этот рост в основном связан с уменьшением эффективной массы при малых скоростях и соответствующим сокращением доли „медленной“ части цикла относительно „быстрой“.

Отметим, что вычисление параметра r требует решения отдельной сложной задачи, при постановке которой

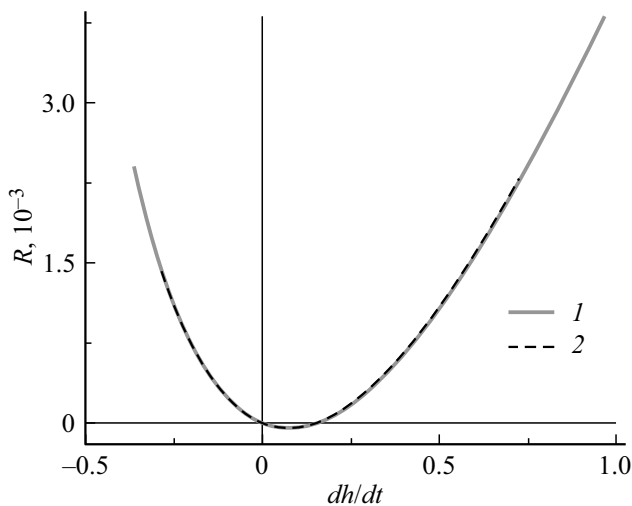


Рис. 1. Зависимость эффективной силы трения (19) из решения уравнения (17) при значениях параметров $\gamma = 0.01$, $p = 100$, $g = 6 \cdot 10^{-6}$, $v_p = 0.45$. Линия 1 соответствует значению параметра $r = 0.0015$, линия 2 — $r = 0$.

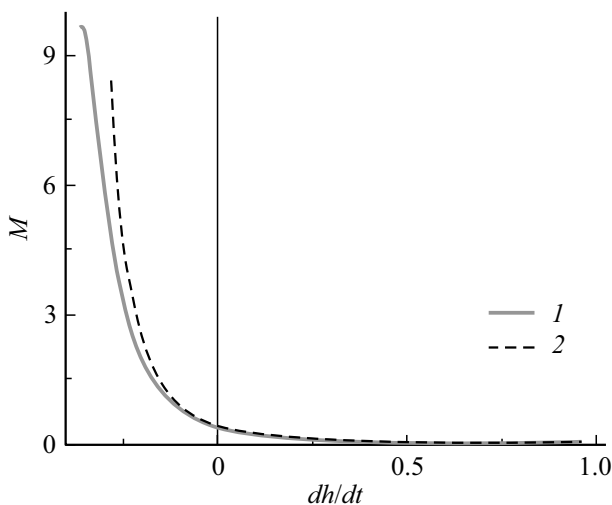


Рис. 2. Зависимость эффективной массы (30) из решения уравнения (17) при значениях параметров $\gamma = 0.01$, $p = 100$, $g = 6 \cdot 10^{-6}$, $v_p = 0.45$. Линия 1 соответствует значению параметра $r = 0.0015$, линия 2 — $r = 0$.

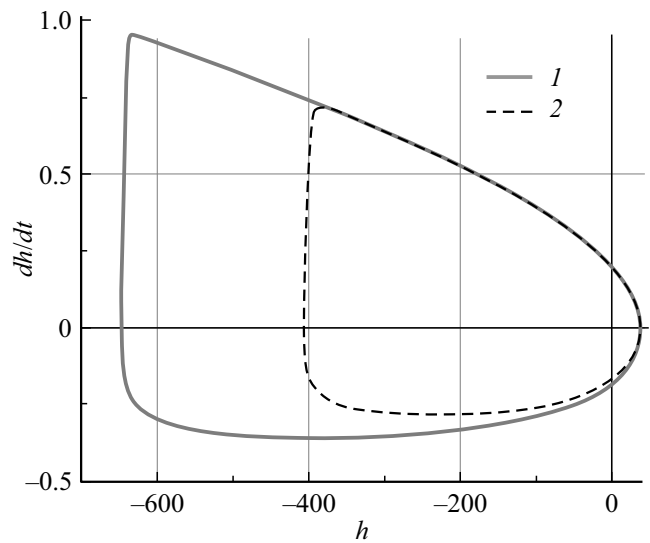


Рис. 3. Устойчивые циклы уравнения (17) при значениях параметров $\gamma = 0.01$, $p = 100$, $g = 6 \cdot 10^{-6}$, $v_p = 0.45$. Линия 1 соответствует значению параметра $r = 0.0015$, линия 2 — $r = 0$.

необходим учет целого ряда статистических и микроскопических факторов, кардинально влияющих на взаимодействие диффундирующих примесей с неподвижными дефектами. В рамках же использованного нами феноменологического описания можно только утверждать, что а) всегда параметр $r \ll 1$, иначе диффузия примесей будет так сильно подавлена, что образование сверхструктур станет невозможным и б) оставаясь малыми, значения r могут, тем не менее, меняться в разных материалах в весьма широких пределах, например, из-за возможного активационного характера захвата диффундирующего примесного атома дефектом.

5. Заключение

В рамках максимально упрощенной одномерной капиллярно-волновой модели мы рассчитали автоколебательную динамику межфазной границы и примесный профиль периодической слоистой сверхструктуры, возникающие в результате твердотельного фазового перехода с изменением концентрации примеси в кристалле, содержащем также неподвижные дефекты-ловушки. Установлено, что выполнение условий, необходимых для появления примесных сверхструктур, облегчается присутствием умеренного количества таких дефектов, при этом амплитуды концентрационных профилей в сплаве-продукте заметно возрастают. В заключение заметим, что примененный в этой статье метод расчета нестационарной динамики МФГ может быть использован также и для исследования динамики других протяженных дефектов, движение которых сопровождается перемещением подвижных примесей, в том числе ростовых граней кристаллов и химических фронтов твердотельных реакций.

Финансирование работы

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского Научного Фонда (проект № 19-19-00552).

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] Physical Metallurgy / Ed. D.E. Laughin, K. Hono, 5th ed. Elsevier Amsterdam (2014). V. I–III.
- [2] A.L. Korzhenevskii, R. Bausch, R. Schmitz. Phys. Rev. Lett. **108**, 046101 (2012).
- [3] A.L. Korzhenevskii, R. Bausch, R. Schmitz. Phys. Rev. E **85**, 021605 (2012).
- [4] E. Babushkina, N.M. Bessonov, A.L. Korzhenevskii, R. Bausch, R. Schmitz. Phys. Rev. E **87**, 042402 (2013).
- [5] R.E. Rozas, A.L. Korzhenevskii, R. Bausch, R. Schmitz. Physica A **413**, 394 (2014).
- [6] R.E. Rozas, A.L. Korzhenevskii, J. Horbach. J. Phys. **28**, 035001 (2016).
- [7] А.А. Чеврычкина, Н.М. Бессонов, А.Л. Корженевский. ФТТ **61**, 1904 (2019).
- [8] А.А. Чеврычкина, Н.М. Бессонов, А.Л. Корженевский. ФТТ **61**, 2122 (2019).
- [9] A.A. Chevrychkina, N.M. Bessonov, A.L. Korzhenevskii, D.V. Alexandrov. Eur. Phys. J. Spec. Top. **229**, 253 (2020).
- [10] А.А. Чеврычкина, Н.М. Бессонов, А.Л. Корженевский. ФТТ **62**, 1244 (2020).
- [11] А.А. Чеврычкина, А.Л. Корженевский. ФТТ **62**, 2101 (2020).
- [12] A.L. Korzhenevskii, R. Bausch, R. Schmitz. Phys. Rev. E **83**, 041609 (2011).
- [13] А.А. Андронов, А.А. Витт, С.Э. Хайкин. Теория колебаний. Физматлит, М. (1981). 568 с.
- [14] W.W. Mullins, R.F. Sekerka, J. Appl. Phys. **35**, 444 (1964).

Редактор Ю.Э. Кутаев