

Установление стационарного состояния при наложении интенсивной пластической деформации кручения в двухкомпонентных кристаллах

© Ю.Д. Заворотнев¹, Л.С. Метлов^{1,2}, Е.Ю. Томашевская³

¹ Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина, Донецк, Украина

² Донецкий национальный университет, Донецк, Украина

³ Донецкий национальный университет экономики и торговли им. М. Туган-Барановского, Донецк, Украина

E-mail: zavorotnev.yurii@mail.ru

Поступила в Редакцию 24 декабря 2021 г.

В окончательной редакции 24 декабря 2021 г.

Принята к публикации 27 декабря 2021 г.

Рассмотрено распространение волны переключения (кинк) в двухкомпонентных кристаллах при наложении интенсивной пластической деформации кручения. При этом использовалась феноменологическая теория Ландау с учетом инвариантов Лифшица. Проведено численное моделирование формы кинка, возникающего при различных температурных воздействиях на кристалл.

Ключевые слова: кинк, параметр порядка, кручение, потенциал, двухкомпонентный кристалл.

DOI: 10.21883/FTT.2022.04.52186.263

1. Введение

В настоящее время актуальным является вопрос поведения материалов при наложении интенсивной пластической деформации кручения (ИПДКР). Как показано в работах [1,2], при наложении ИПДКР может меняться фазовый состав двухкомпонентных материалов типа Cu–Ag, Cu–Sn, Cu–Co. При этом осуществлялся неразрушающий процесс воздействия кручения. Обнаружено, что при достаточно большом количестве оборотов система независимо от начального состояния и температуры отжига всегда приходит к одному и тому же стационарному состоянию. При этом фазовая граница диаграммы зависимости концентрации растворенной примеси от температуры отжига T_{ann} смещалась и вырождалась в прямую вертикальную линию [1]. Параллельно с этим синхронно происходило изменение параметров решетки. Подобное поведение наблюдаемых величин можно объяснить, опираясь на феноменологическую теорию Ландау [3,4]. Однако, в этих работах не рассматривалась форма фронта волны (кинк), возникающей при наложении ИПДКР. Изучению этого вопроса посвящена настоящая работа. Перемещение фронта является автоволновым процессом в форме кинка и является простейшим топологическим солитоном. После прохода фронта через весь кристалл устанавливается стационарное состояние. Автоволны возникают в самых различных средах физического, химического и биологического происхождения. Их примерами могут служить концентрационные волны в реакции Белоусова–Жаботинского [5], волны химической сигнализации в колониях некоторых микроорганизмов [6], волны в межзвездном газе,

приводящие к образованию спиральных галактик [7]. Важный пример активных сред представляют многие биологические ткани. Так, автоволновую природу имеют распространение нервного импульса [8] и возбуждения в сердечной мышце [9]. В физических системах автомодельные решения дифференциального уравнения отвечают движению межфазной границы при фазовых переходах первого или второго рода [10,11], описывают распространение пламени [12]. В вышеперечисленных работах находились аналитические приближенные решения. В [13] была предпринята попытка численного рассмотрения этой проблемы, позволяющая получить более точное решение. В настоящей работе идеи, развитые в [3,4,13], применены к двухкомпонентным кристаллам.

2. Теория

Пусть на двухкомпонентный кристалл с одним закрепленным концом наложено ИПДКР в области фазовой диаграммы, в которой примесь полностью растворена. В настоящей работе рассмотрим поведение фронта (кинк) возникающей бегущей волны. В этом случае можно воспользоваться приближением виртуального кристалла. При его использовании предполагается, что все характеристики кристалла усредняются и можно ввести единый параметр порядка (ПП), описывающий деформацию элементарной ячейки. Для установления формы кинка воспользуемся феноменологической теорией Ландау.

Как показано в [10,11], динамику кинка удобно рассматривать с помощью дифференциального уравнения

типа Ландау–Халатникова [14]:

$$\frac{\partial q_i}{\partial t} = -\gamma_{ii} \frac{\delta \tilde{\Phi}}{\delta q_i}; \quad (i = x, y), \quad (1)$$

где $\tilde{\Phi}$ — функционал свободной энергии,

$$\frac{\delta \tilde{\Phi}}{\delta q_i} = \sum_k (-1)^k \frac{d^k}{dz^k} \frac{\partial \Phi}{\partial \left(\frac{\partial^k q_i}{\partial z^k} \right)}$$

— функциональная производная, t — время, $\gamma_{ii} (i = x, y)$ — компоненты параметра, характеризующего скорость релаксации системы к положению равновесия. В дальнейшем будем предполагать, что эти компоненты постоянны и для простоты пренебрежем недиагональными компонентами. Уравнение Ландау–Халатникова является уравнением в частных производных относительно времени (левая часть) и пространственных переменных (правая часть) и описывает процесс релаксации из одного состояния в другое. Создание уравнения базировалось на том факте, что при $t \rightarrow \infty$ физическая система приходит в стационарное состояние. В зависимости от правой части этот переход может быть плавным, скачкообразным или через несколько промежуточных состояний. На вид перехода оказывают влияние дисперсия, диссипация, скорость релаксации и другие факторы. Уравнение Ландау–Халатникова допускает множество решений, зависящих от вида неравновесного термодинамического потенциала и величины его параметров. Это уравнение описывает процессы релаксации, как в идеальных кристаллах, так и в кристаллах с дефектами. Различные отклонения от идеальной структуры в неравновесном термодинамическом потенциале НТДП определяются с помощью производных различного порядка от соответствующих ПП по пространственным переменным. В частности, в кристаллах без центра инверсии длиннопериодические спиральные структуры можно описать с помощью инвариантов Лифшица. Если кристалл с центром инверсии, то необходимо в НТДП ввести квадраты первых и вторых производных. В последнем случае система уравнений (2) становится системой четвертого порядка относительно пространственных производных, что требует большого количества начальных (граничных) условий и решение усложняется. Поэтому в настоящей работе ограничимся кристаллами без центра инверсии.

Плотность НТДП-системы, которая подвергнута воздействию ИПДКР с направленным по оси OZ моментом M , имеет вид [3,4,13,15]:

$$\begin{aligned} \tilde{\Phi} = & \frac{\alpha_1}{2} q^2(N) + \frac{\alpha_2}{4} q^4(N) + \frac{\alpha_3}{6} q^6(N) + \gamma_1 M^r \\ & \times \left(q_x \frac{\partial q_y}{\partial z} - q_y \frac{\partial q_x}{\partial z} \right) + \gamma_2 M^s \left(\left(\frac{\partial q_x}{\partial z} \right)^2 + \left(\frac{\partial q_y}{\partial z} \right)^2 \right) \\ & + \beta_1 \varphi + \frac{\beta_2}{2} \varphi^2 + \frac{\beta_3}{2} \varphi^3 + \delta q^2 \varphi, \end{aligned} \quad (2)$$

где $\gamma_i (i = 1, 2)$, α_i , $\beta_i (i = 1-3)$, δ — феноменологические постоянные, q — векторный структурный ПП с компонентами q_x и q_y , который определяется как линейная комбинация сдвигов ионов элементарной ячейки в результате ФП, φ — плотность дефектов. Компонента q_z не учитывается, поскольку момент кручения направлен по оси OZ . Фактически в данной работе рассматривается возможность возникновения только поперечных волн. Момент кручения M является аксиальным вектором. Поэтому в кристаллах без центра инверсии степени r и s в (1) должны быть четными. Как показано в работе [13], $r = 6$, $s = 2$. В потенциале (1) не выписано слагаемое, ответственное за упругое взаимодействие. Процедура его исключения приведена в работе [16]. Необходимо отметить, что инварианты Лифшица, описывающие возникающую при наложении ИПДКР деформацию, в кристаллах с центром инверсии отсутствуют, поскольку возникающая аксиальная симметрия не снимает инверсию. Поэтому в данной работе рассматриваются кристаллы без центра инверсии. Подставляя (2) в (1) получаем

$$\begin{cases} \frac{\partial q_x}{\partial t} = -\gamma_{xx} \left[q_x (\alpha_1 + \alpha_2 q^2 + \alpha_3 q^4 + 2\delta\varphi) \right. \\ \qquad \qquad \qquad \left. + 2\gamma_1 M^r \frac{\partial q_y}{\partial z} - 2\gamma_2 M^s \frac{\partial^2 q_x}{\partial z^2} \right] \\ \frac{\partial q_y}{\partial t} = -\gamma_{yy} \left[q_y (\alpha_1 + \alpha_2 q^2 + \alpha_3 q^4 + 2\delta\varphi) \right. \\ \qquad \qquad \qquad \left. - 2\gamma_1 M^r \frac{\partial q_x}{\partial z} - 2\gamma_2 M^s \frac{\partial^2 q_y}{\partial z^2} \right] \end{cases} \quad (3)$$

Как показано в [3,4], величина плотности дефектов φ зависит от температуры отжига T_{ann} . Поскольку соответствующий закон не известен, то искомая зависимость подбиралась методом наилучшего согласия теоретических и экспериментальных данных. Поскольку зависимость слабая, то в настоящей работе ею пренебрегаем. Полученная система уравнений является автономной и ее можно существенно упростить путем перехода к автомоделльной переменной

$$u = z - ct, \quad (4)$$

где c — фазовая скорость распространения волны. Математически данное преобразование означает переход к движущейся системе координат, в которой волна неподвижна, и при этом распределение характеристик в разные моменты времени получаются путем сдвига. Ясно, что в этом случае класс решений системы сужается и существенно упрощается нахождение решения. В итоге получаем систему обыкновенных дифференциальных

уравнений

$$\begin{cases} 2\gamma_{xx}\gamma_2M^s \frac{d^2q_x}{du^2} - 2\gamma_{xx}\gamma_1M^r \frac{dq_y}{du} + c \frac{dq_x}{du} \\ = \gamma_{xx}q_x(\alpha_1 + \alpha_2q^2 + \alpha_3q^4 + 2\delta\varphi) \\ 2\gamma_{yy}\gamma_2M^s \frac{d^2q_y}{du^2} + 2\gamma_{yy}\gamma_1M^r \frac{dq_x}{du} + c \frac{dq_y}{du} \\ = \gamma_{yy}q_y(\alpha_1 + \alpha_2q^2 + \alpha_3q^4 + 2\delta\varphi) \end{cases} \quad (5)$$

Для решения этой системы необходимо задать четыре условия, в качестве которых можно взять $q_x(-\infty)$, $q_y(-\infty)$, $q_x(+\infty)$, $q_y(+\infty)$. Поскольку при $t = 0$ и произвольном значении $z(u = z)$ система находится в равновесном состоянии (ИПДКР отсутствует), то все производные равны нулю. Следовательно, величина $q(+\infty)$ определяются из системы алгебраических уравнений

$$\alpha_1 + \alpha_2q^2 + \alpha_3q^4 + 2\delta\varphi = 0. \quad (6)$$

Ввиду неопределенности в настоящей работе принято $q_x(+\infty) = q_y(+\infty) = \frac{q(+\infty)}{\sqrt{2}}$.

В работах [3,4] показано, что величины коэффициентов $\alpha_i (i = 1-3)$ зависят от температуры отжига и, поэтому стационарные состояния будут несколько отличаться друг от друга. Однако для простоты в настоящей работе этим незначительным различием пренебрегаем. При $t = +\infty (u = -\infty)$ система также находится в равновесном состоянии и под воздействием ИПДКР в ней имеется кристаллическая спиральная структура, которая описывается соотношениями $q_x = q(-\infty) \cdot \cos(k \cdot z)$, $q_y = q(-\infty) \cdot \sin(k \cdot z)$. Здесь модуль ПП является постоянной величиной. Для нахождения следующей пары граничных условий необходимо подставить эти соотношения в (3) с учетом того, что все производные по времени равны нулю. После несложных преобразований получается биквадратное алгебраическое уравнение, решение которого имеет вид [3]:

$$q^2(-\infty) = \frac{-\alpha_2 + \sqrt{\alpha_2^2 + 4\alpha_3 \left(\alpha_1 - 2\delta\varphi + \frac{\gamma_1^2 M^{2r-s}}{2\gamma_2} \right)}}{2\alpha_3}. \quad (7)$$

Здесь также принимаем $q_x(-\infty) = q_y(-\infty) = \frac{q(-\infty)}{\sqrt{2}}$. Как показано в [1-4], в двухкомпонентных системах типа Cu-A ($A = Ag, Sn, Co$) имеет место критическая температура отжига $T_{kr\,ann}$, при переходе через которую поведение системы кардинально меняется. При $T_{ann} < T_{kr\,ann}$ функция $q(N)$, где N — число оборотов — возрастающая и выпуклая, при $T_{ann} > T_{kr\,ann}$ искомая зависимость — убывающая и вогнутая. Подобное поведение объясняется расходимостью и изменением знака коэффициента γ_2 в окрестности точки $T_{ann} < T_{kr\,ann}$ [3,4]. Эта особенность влияет и на форму кинка.

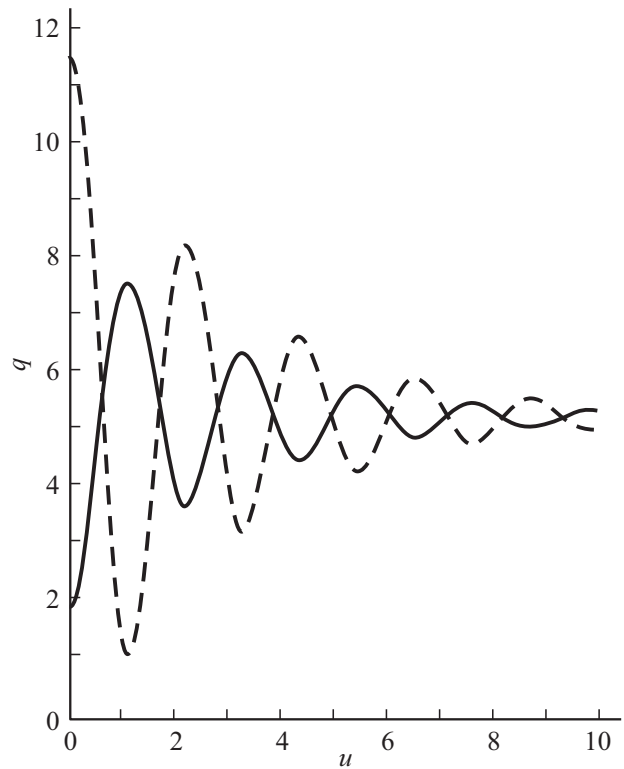


Рис. 1. Качественная форма кинка при малой скорости. По осям приняты произвольные единицы измерения.

На рис. 1 изображен устоявшийся режим распространения для достаточно больших времен после воздействия ИПДКР и представлена зависимость $q(u)$ для случая $T_{ann} < T_{kr\,ann}$ (сплошная кривая) и $T_{ann} > T_{kr\,ann}$ (пунктирная кривая). В обоих случаях имеет место колебательный процесс при переходе из одного состояния в другое. Эта особенность переднего фронта кинка зависит от его скорости и величины коэффициента релаксации. Увеличение скорости распространения с приводит к увеличению затухания колебательного процесса, т.е. уменьшается амплитуда и количество колебание до перехода в равновесное состояние. В пределе большой скорости форма кинка становится монотонной (убывающая или возрастающая). При увеличении коэффициента релаксации растут амплитуды колебаний переднего фронта и их количество. Уменьшение γ действует аналогично увеличению невозмущенной скорости.

Уменьшение значения коэффициента γ_2 приводит к уменьшению частоты затухающих колебаний и не влияет на их амплитуду. При этом происходит более быстрый переход в конечное стационарное состояние (рис. 2). Необходимо отметить, что аналогичные осциллирующие хвосты солитонов были предсказаны в работе [17].

На поведение переднего фронта может оказывать влияние дисперсия, величина которой определяется постоянной γ_1 . Предположим, что причиной появления слабой дисперсии является изменение величины ПП.

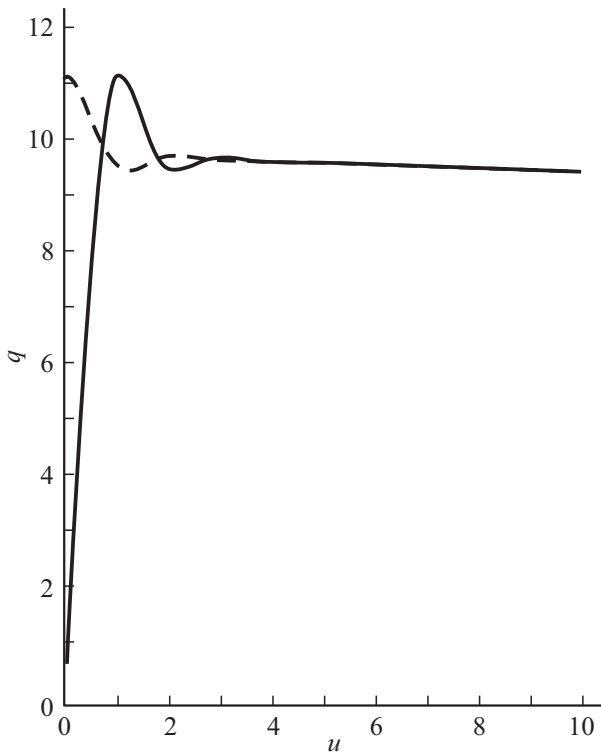


Рис. 2. Качественная форма кинка при большой скорости. Сплошная линия — $T_{amm} < T_{kr\ amm}$. Пунктирная линия — $T_{amm} > T_{kr\ amm}$. По осям приняты произвольные единицы измерения.

Тогда γ_1 можно разложить в ряд по степеням ПП. Рассмотрим два случая.

1. Квадратичная зависимость: $\gamma_1 = \gamma_{10} + \gamma_{11} \times (q - q(+\infty))^2$. Соответствующая система автоволновых уравнений имеет вид

$$\left\{ \begin{aligned} & 2\gamma_{xx}\gamma_2 M^s \frac{d^2 q_{2x}}{du^2} - 2\gamma_{xx} (\gamma_{10} + \gamma_{11} (q_2 - q_2(+\infty))^2) \\ & + 2\gamma_{11} (q_{2x} - q_{2x}(+\infty)) M^r \frac{dq_{2y}}{du} + (c + 2\gamma_{xx}\gamma_{11} M^s \\ & \times (q_{2x} - q_{2x}(+\infty)) (q_{2y} - q_{2y}(+\infty))) \frac{dq_{2x}}{du} \\ & = \gamma_{xx} q_{2x} (\alpha_1 + \alpha_2 q_2^2 + \alpha_3 q_2^4 + 2\delta\varphi) \\ & 2\gamma_{yy}\gamma_2 M^s \frac{d^2 q_{2y}}{du^2} + 2\gamma_{yy} (\gamma_{10} + \gamma_{11} (q_2 - q_2(+\infty))^2) \\ & + 2\gamma_{11} (q_{2y} - q_{2y}(+\infty)) M^r \frac{dq_{2x}}{du} + (c + 2\gamma_{yy}\gamma_{11} M^s \\ & \times (q_{2x} - q_{2x}(+\infty)) (q_{2y} - q_{2y}(+\infty))) \frac{dq_{2y}}{du} \\ & = \gamma_{yy} q_{2y} (\alpha_1 + \alpha_2 q_2^2 + \alpha_3 q_2^4 + 2\delta\varphi) \end{aligned} \right. \quad (8)$$

График численного решения этой системы при учете начальных условий (6) и (7) приведен на рис. 3 пунк-

тирной линией. Здесь же сплошной линией приведена форма кинка ($q_1(u) = q(u)$) при $\gamma_1 = \text{const}$. Видно, что имеет место значительное уменьшение максимумов переднего фронта. Этот вывод подтверждается приведенными на рис. 4 графиками соответствующих скоростей

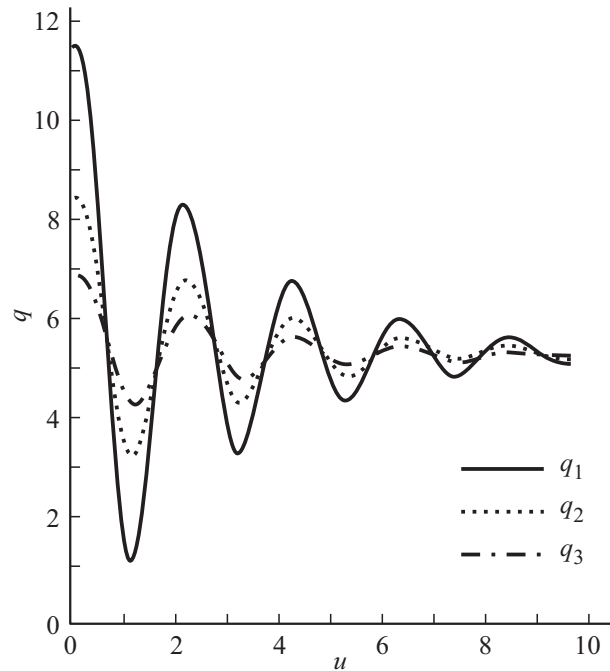


Рис. 3. Сравнение качественных форм кинка при квадратичной (пунктирная линия) и линейной (штрихпунктирная линия) зависимостях дисперсии от ПП. Сплошная линия — дисперсия отсутствует. По осям приняты произвольные единицы измерения.

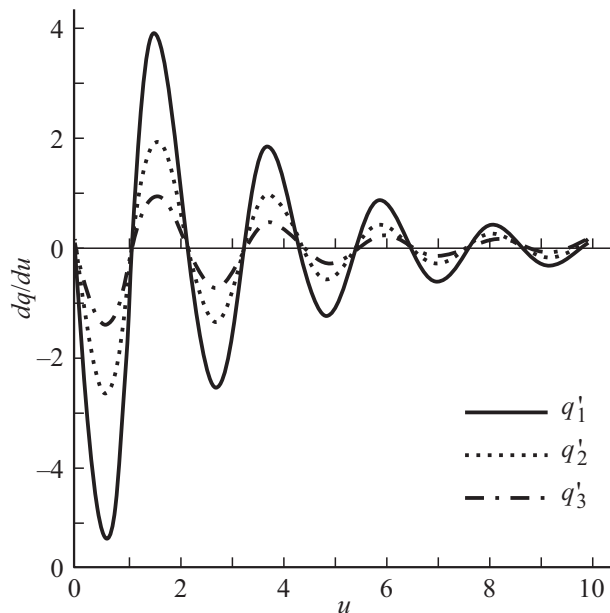


Рис. 4. Качественная форма производных ПП при квадратичной (пунктирная линия) и линейной (штрихпунктирная линия) зависимостях дисперсии. Сплошная линия — дисперсия отсутствует. По осям приняты произвольные единицы измерения.

смещения ПП. Необходимо отметить, что качественное поведение ПП в правой части переднего фронта кинка в обоих случаях практически одинаково.

2. Линейная зависимость: $\gamma_1 = \gamma_{10} + \gamma_{11}(q - q(+\infty))$. Система уравнений

$$\left\{ \begin{aligned} & 2\gamma_{xx}\gamma_2 M^s \frac{d^2 q_{3x}}{du^2} - 2\gamma_{xx}(\gamma_{10} + \gamma_{11}(q_3 - q_3(+\infty))) \\ & + \gamma_{11} \frac{(q_{3x} - q_{3x}(+\infty))^2}{2(q_3 - q_3(+\infty))} M^r \frac{dq_{3y}}{du} + \left(c + \gamma_{xx}\gamma_{11} M^s \right. \\ & \times \left. \frac{(q_{3x} - q_{3x}(+\infty))(q_{3y} - q_{3y}(+\infty))}{q_3 - q_3(+\infty)} \right) \frac{dq_{3x}}{du} \\ & = \gamma_{xx}q_{3x}(\alpha_1 + \alpha_2 q_3^2 + \alpha_3 q_3^4 + 2\delta\varphi) \\ & 2\gamma_{yy}\gamma_2 M^s \frac{d^2 q_{3y}}{du^2} + 2\gamma_{yy}(\gamma_{10} + \gamma_{11}(q_3 - q_3(+\infty))) \\ & + \gamma_{11} \frac{(q_{3y} - q_{3y}(+\infty))}{2(q_3 - q_3(+\infty))} M^r \frac{dq_{3x}}{du} + \left(c + \gamma_{yy}\gamma_{11} M^s \right. \\ & \times \left. \frac{(q_{3x} - q_{3x}(+\infty))(q_{3y} - q_{3y}(+\infty))}{q_3 - q_3(+\infty)} \right) \frac{dq_{3y}}{du} \\ & = \gamma_{yy}q_{3y}(\alpha_1 + \alpha_2 q_3^2 + \alpha_3 q_3^4 + 2\delta\varphi) \end{aligned} \right. \quad (9)$$

На рис. 3, 4 штрихпунктирными линиями приведены найденные численным методом зависимости фронта кинка ($q_3(u)$) и соответствующей производной. В правой половине переднего фронта имеет место уменьшение амплитуд колебания ПП, что приводит к меньшему значению ПП конечного стационарного состояния. Производные в правой части переднего фронта также имеют одинаковую форму.

Необходимо отметить, что в точке $u = 0$ производные во всех случаях равны нулю, т.е. имеет место минимум колебательного процесса по отношению к конечному состоянию. Эта точка является устойчивой, поскольку первая производная от ПП равна нулю и обеспечивается минимум энергии. Аналогичная ситуация имеет место в задаче распространения теплового фронта [17]. В этой работе показано, что локальный максимум в начальной точке возможен только в системах с плоской симметрией, что имеет место в нашей задаче. Если симметрия осевая или шаровая, то в точке $u = 0$ первая производная отлична от нуля.

3. Выводы

1. Показано, что при малой скорости распространения кинка в переднем фронте возникают колебания с возрастающей амплитудой.

2. Если скорость распространения кинка велика, то передний фронт представляет собой монотонную кривую.

3. Дисперсия оказывает существенное влияние на форму кинка. При линейной и квадратической дисперсии уменьшаются амплитуды колебаний, но частотный характер не меняется.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] B.B. Straumal, A.R. Kilmametov, Y. Ivanisenko, L. Kurmaeva, B. Baretzky, Y.O. Kucheev, P. Zieba, A. Korneva, D.A. Molodov. *Mater. Lett.* **118**, 111 (2014).
- [2] B.B. Straumal, A.R. Kilmametov, B. Baretzky, O.A. Kogtenkova, P.B. Straumal, L. Litynska-Dobrzynska, R. Chulist, A. Korneva, P. Zieba. *Acta Mater.* **195**, 184 (2020).
- [3] B. Straumal, A. Kilmametov, A. Korneva, P. Zieba, Yu. Zavorotnev, L. Metlov, O. Popova, B. Baretzky. *Crystals* **11**, 766 (2021).
- [4] A. Korneva, A. Kimametov, Yu. Zavorotnev, L. Metlov, O. Popova, B. Baretzky. *Mater. Lett.* **302**, 130386 (2021).
- [5] A.N. Zaikin, A.M. Zhabotinsky. *Nature* **225**, 535 (1970).
- [6] F. Alcantara, M. Monk. *Microbiology*. **85**, 321 (1974).
- [7] B.F. Madore, W.L. Freedman. *Am. Sci.* **75**, 252 (1987).
- [8] N.A. Gorelova, J. Bures. *J. Neurobiol.* **14**, 353 (1987).
- [9] R.A. Gray, J. Jalife. *Int. J. Bifurcation Chaos* **06**, 415 (1996).
- [10] В.Н. Кашеев. Автомодельные решения эволюционного уравнения диффузионного типа. Препринт ЛАФИ-098. Саласпилс (1986). 21с.
- [11] В.Н. Кашеев. Кинки при структурных фазовых переходах в системах с многокомпонентным параметром порядка. Препринт ЛАФИ-107. Саласпилс (1987). 22 с.
- [12] Я.Б. Зельдович, Г.И. Баренблат, В.Б. Либрович, Г.М. Махвиладзе. *Математическая теория горения и взрыва*. Наука. М. (1980). 478 с.
- [13] Yu.D. Zavorotnev, L.S. Metlov, A.Yu. Zakharov, E.Yu. Tomashenska. *IOP Conf. Ser.: J. Phys.: Conf. Ser.* **1352** 012063 (2019).
- [14] Е.М. Лифшиц, Л.П. Питаевский. *Физическая кинетика*. Наука, М. (1979). 528 с.
- [15] Ю.Д. Заворотнев., А.Ю. Захаров, Л.С. Метлов. *ФТТ* **59**, 2266 (2017).
- [16] Yu.D. Zavorotnev, E.H. Pashinskaya, V.N. Varjuchin, O.Yu. Popova. *J. Magn. Magn. Mater.* **349**, 244 (2014).
- [17] V.I. Karpman, E.M. Maslov. *Sov. Phys. JETP* **48**, 252 (1978).
- [18] П.П. Волосевич, Е.И. Леванов. Автомодельные решения задач газодинамики и теплопереноса. Изд-во МФТИ, М. (1997). 233 с.

Редактор Т.Н. Василевская