

Подходы теории перколяции и свободная энергия кластеров дислокаций

© В.А. Иванской

Центральный научно-исследовательский институт точного машиностроения,
142181 Климовск, Московская область, Россия
e-mail: V.Ivanskoy@rambler.ru

(Поступило в Редакцию 11 января 2007 г. В окончательной редакции 7 июня 2007 г.)

Для упорядоченных конфигураций дислокационных сеток в кристаллах теоретически исследована применимость подходов теории перколяции. Вычислена свободная энергия для дислокационных сеток, образующих кластеры методами теории перколяции, использующей модели Изинга, Поттса и решение Онзагера.

PACS: 61.72.Lk, 64.60.ah, 68.35.-p

Для исследования дислокационных сеток, формирующихся на поверхности твердого тела, представляет интерес применение теории перколяции [1], которая применяется в физике для изучения процессов, происходящих в неоднородных средах со случайными свойствами, зафиксированными в пространстве и неизменными во времени. Ранее теория была применена для описания проводимости в твердых телах с примесными атомами [2]. Теория перколяции [3] в ряде проблем близка к статистической механике и заимствует из нее ряд понятий (фазовый переход, критический индекс и др.).

Первые работы по теории перколяции принадлежат Дж. Хаммерсли (см., например, [4]). В перколяционной теории различают решеточные и континуальные задачи (на случайных узлах). Здесь применим теорию, исследующую протекание по связям решетки (решеточные задачи связей).

В теории перколяции применяется понятие кластера [5]. Понятие кластера рассматривается в модели случайных кластеров. Вначале запишем известное понятие парного статистического веса (ПСВ):

$$\omega(\sigma_1, \sigma_2) = \exp[-\varepsilon(\sigma_1, \sigma_2)/T], \quad (1)$$

где σ_1, σ_2 — состояние спинов, $\sigma_i = \pm 1$.

Статистическая сумма в модели Поттса представляется графически в соответствии с ПСВ:

$$Z = \exp(K_{KL}\delta_{p1,p2}) = 1 + v\delta_{p1,p2}, \quad (2)$$

$$v = \exp K_{KL} - 1, \quad (3)$$

где $p_j = 0, 1, 2, \dots, q - 1$ — спиновая переменная, θ — угол между направлениями q ($\theta = 2\pi p_j/q$).

На графе рис. 1 сопоставляются пустое ребро и $v\delta_{p1,p2}$ — заполненное. Кластером называется совокупность узлов, соединенных дислокациями. Изолированный узел также считается кластером [5]. В наиболее простом представлении статистическая сумма q -компонентной модели Поттса представляется в виде [5–7]:

$$Z_{(q,v)} = \sum_{\text{On count}} q^{KL} v^m, \quad (4)$$

где K_{KL} — число кластеров, m — число заполненных ребер в графе. Определив статистическую сумму графически, можем не считать q целым числом.

Энергия Гиббса–Гельмгольца, как обычно,

$$F = -k_B T \ln Z.$$

В теории перколяции считается, что распределение целых и заблокированных связей в решетке случайно; вероятность того, что данная связь является целой, равна x . При малых значениях x целые связи, как правило, далеки друг от друга и доминируют кластеры из небольшого количества узлов, однако с увеличением x размеры кластеров резко возрастают. Порогом протекания (x_c) называется такое значение x , при котором впервые возникает кластер из бесконечного числа узлов. Для физически реальных решеток существуют точные формулы, определяющие величины x_c [8]. Так, для рассматриваемых дислокационных сеток правильной формы (треугольной, квадратной и шестиугольной) пороги протекания соответственно равны 0.6527, 0.5, 0.3473 [9] (в данной работе p_c — пороговые значения).

Указанные критические значения порогов протекания, вычисленные по теории перколяции для физических решеток, очевидно, определяют границу устойчивости,

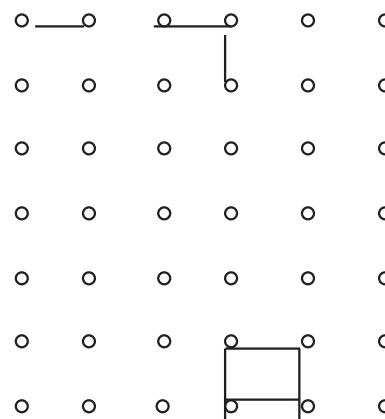


Рис. 1. Пример графа в кластерном разложении модели Поттса.

следовательно, последние тождественны определенным точкам спинодали [10] и справедливо обращение производной $(\partial p / \partial v)_T$ в точке перехода в нуль.

К современным направлениям теории перколяции можно отнести работу [11], где теория применяется при анализе прохождения дислокаций через ячеистую структуру деформированных материалов; [12], в которой развита цветная модель Поттса, где q — различные; работу [13], в которой описывается перколяция на решетке неточечных объектов, эта задача занимает промежуточное положение между классическими решеточными задачами и континуальными. В работе [14] приводится описание различных направлений, в том числе перколяции для решеток с $d \leq 3$.

Цель настоящей работы применить подходы теории перколяции, полученные в [1–4], к конкретным кластерам дислокаций, экспериментально полученным различными авторами; определить свободную энергию для кластеров с помощью подходов теории перколяции.

Для определения количества кластеров (K_{KL} в выражении (4)) применим метод производящих функций. Следуя работам [6,15], для случая отсутствия „побочного“ поля (h) запишем выражение для производящей функции [15]:

$$G = \sum_s n_s(p) e^{-sh} = \sum_s n_s(p) e^0 = n_s(p_1) + n_s(p_2) + \dots, \quad (5)$$

где $n_s(p)$ — среднее число кластеров размером s , разделенное на общее число мест, $p = 1 - e^{-K}$ — вероятность, K — флуктуационное поле Вейсса. Наиболее вероятное развитие кластеров дислокаций в соответствии с (5) должно происходить в единственном векторном направлении, „пошаговым“ присоединением — один за другим. Выражение (5), таким образом, представляет интерпретацию модели Изинга в производящих функциях. Приведем конкретный экспериментальный результат: кластеры из сеток дислокаций в платине (рис. 2) [16], конфигурация сеток близка к модели Изинга [6,15]. „Заполненные ребра“ в данном случае образуют правильные многоугольники. По определению, изолированный узел (например, квадрат) также является кластером. Соединенные между собой многоугольники образуют (рис. 2) кластер прямоугольной формы шириной H (но неизвестной длины). Заметим, что модель Изинга ($q = 2$) наиболее вероятна для реализации на двумерной решетке, и существование указанных сеток в реальном кристалле свидетельствует о совершенстве структуры. Максимальное число кластеров определяется, очевидно, условием $p < p_c$.

Производящая функция [15] при $h \neq 0$ такова:

$$G = n_{s_1}(p_1) \exp(-s_1 h) + n_{s_2}(p_2) \exp(-s_2 h) + \dots, \quad (6)$$

(где s — размер кластера, h — внешнее поле) и описывает „распадающиеся“ по нескольким векторным

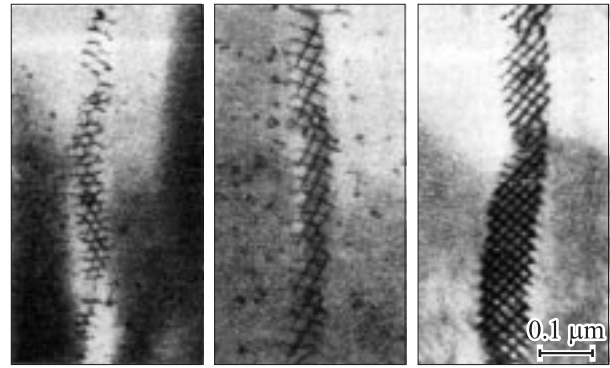


Рис. 2. Дислокационные сетки в платине: a — шестиугольные, b, c — квадратные.



Рис. 3. Дислокационные сетки в бромиде хрома.

направлениям кластеры дислокаций, интерпретируя модель Поттса. Определим G для $d = 2$, следуя [16].

$$G = - \min \left[P_1 (m - 1)^2 - e^{-(2P_1+h)} \right], \quad (6a)$$

где P_1 — порог протекания по связям [2], m — параметр порядка, равный 0–1.

Подставив выражение (6a) в (6) и считая $p_1 \approx p_2 \approx p_3 \approx \dots \langle p \rangle$, можно приближенно определить количество кластеров и статистическую сумму (соответственно энергию Гиббса–Гельмгольца) по выражению (4).

На рис. 3 мы приводим экспериментальный результат [16], в котором хорошо видно разбиение на класте-

Материал	L, m сторона шести- угольника	Модуль сдвига μ_{disp} , N/m ²	b, Å	Растяги- вающее напря- жение σ_B , N/m ²	Свободная энергия $F_{\text{six angle}}$, J				L, m (квадрат)	Собственная энергия, $F_{\text{four angle}}$, J		Свободная энергия, $F_{\text{four angle}}$, J	
					Собственная энергия, $F_{\text{six angle}}$, J	теория дислокаций	одномерная модель Изинга	двумерная модель Изинга		модель Поттса	теория дисло- каций	одномерная модель Изинга	
Pt	(0.01–0.02) $\times 10^{-6}$	$6.65 \cdot 10^{10}$	2.775	$14.3 \cdot 10^7$	$7.8 \cdot 10^{-16}$	$3.75 \cdot 10^{-16}$		$9.2 \cdot 10^{-16}$	(2–3) $\times 10^{-6}$	$5 \cdot 10^{-16}$	$4.9 \cdot 10^{-16}$		
Fe	$0.166 \cdot 10^{-6}$	$6.3 \cdot 10^{10}$	2.54 (ГЦК)*	$110 \cdot 10^7$	$56.4 \cdot 10^{-16}$	$82.8 \cdot 10^{-16}$	$157.3 \cdot 10^{-16}$						
Zn	$0.09 \cdot 10^{-6}$	$3.26 \cdot 10^{10}$	4.94	$23 \cdot 10^7$	$52 \cdot 10^{-16}$	$42.5 \cdot 10^{-16}$							

* ГЦК — гранцентрированная кубическая решетка.

ры. Результат с указанной конфигурацией кластеров в некоторой степени близок к модели Поттса. Подобный результат был получен и в работе [17] — для молибдена. Таким образом, применение теории перколяции к конкретным дислокационным конфигурациям сеток позволяет разделить и описать кластеры дислокаций в рамках модели Изинга и Поттса.

Получим выражения свободной энергии для дислокационных сеток методами теории перколяции.

Для шестиугольной сетки выражение для собственной энергии получено Хирт и Лоте [18]:

$$W_{\text{six angle}} = 6L \frac{2 - \nu}{2(1 - \nu)} \frac{\mu_{\text{disp}} \mathbf{b}^2}{4\pi} [\ln(L/\rho_{\text{integr}}) - 0.84] \quad (7)$$

где $W_{\text{six angle}}$ — собственная энергия шестиугольной сетки, ρ_{integr} — параметр обрезания интегралов, ν — коэффициент Пуассона, \mathbf{b} — вектор Бюргерса, μ_{disp} — модуль сдвига, L — длина стороны правильного шестиугольника.

Выражение для собственной энергии квадратной сетки, следуя работе [17] будет:

$$W_{\text{four angle}} \approx 4 \frac{\mu_{\text{disp}} \mathbf{b}^2 L}{4\pi} \frac{2 - \nu}{2(1 - \nu)} [\ln(L/\rho_{\text{integr}}) + 1/3] \quad (8)$$

На рис. 2, 3 дислокационные сетки расположены наклонно к плоскости рисунка, и произведение векторов дифракции и Бюргерса ($\mathbf{g} \cdot \mathbf{b}$) различно в разных частях рисунка. Наклон микрообразца (фольги) происходит из-за ее неравномерного утонения (в процессе приготовления), и дислокационная сетка испытывает прогиб, изменяющийся по мере сближения с поверхностью фольги. Собственная энергия отрезка дислокации изменяется в зависимости от ориентации и в приближении линейного натяжения

$$\delta L_{\text{full}} = \frac{1}{2} L \varphi^2,$$

где φ — угол между вектором Бюргерса и ориентацией поверхности [18]. Это приводит к изменению энергии $\Delta\Phi$:

$$\Delta\Phi = \frac{\mu \mathbf{b}^2}{4\pi(1 - \nu)} [\ln(L/\rho) - 2.39]. \quad (9)$$

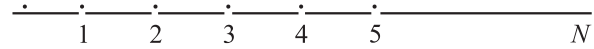


Рис. 4. Одномерная решетка из N узлов.

Для типичных длин прогибов $L \sim 10^3 \mathbf{b}$ и $\nu = 1/3$ величина δL_{full} может отличаться на множитель порядка 2. Следовательно, полученные по выражениям (7), (8) значения энергии необходимо увеличить примерно в 2 раза [17]. Заметим, что дислокации в данном случае исследовались на монокристалле Pt, поэтому в данном случае малоугловая граница (и ее воздействие) отсутствует [19].

Вычислим собственную энергию дислокационных сеток [16] (правильные шестиугольники, L — длина стороны) для некоторых монокристаллов, следуя выражениям теории дислокации, а именно для платины, железа, цинка (7), результаты приведены в таблице.

Учитывая применимость методов статической механики в теории перколяции, определим свободную энергию в одномерной модели Изинга в представлении Онзагера [6,15,20].

В модели Изинга (рис. 4) узлы расположены вдоль одной линии и пронумерованы индексами: $j = 1, \dots, N$. Энергия системы

$$E(\sigma) = -J \sum_{j=1}^N \sigma_j \sigma_{j+1} - H \sum_{j=1}^N \sigma_j. \quad (10)$$

Модель предполагает эквивалентность узлов $\langle \sigma_1 \rangle = \langle \sigma_2 \rangle$, статистическая сумма

$$Z_N = \sum_{\sigma} \exp \left\{ K \sum \sigma_j \sigma_{j+1} + h \sum \sigma_j \right\}, \quad (11)$$

где $K = J/kT$, $h = H/kT$.

Экспонента может быть представлена [21] в виде сомножителей

$$Z_N = \sum V(\sigma_1, \sigma_2) V(\sigma_2, \sigma_3) V(\sigma_3, \sigma_4) \dots \dots V(\sigma_{N-1}, \sigma_N) V(\sigma_N, \sigma_1), \quad (12)$$

где $V(\sigma\sigma') = \exp[K\sigma_1\sigma + 1/2h(\sigma + \sigma')]$.

Выражение (12) можно представить как элементы матрицы

$$\mathbf{V} = \begin{pmatrix} V(+, +) & V(+, -) \\ V(-, +) & V(-, -) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{K+h} & e^{-K+h} \\ e^{-K-h} & e^{K-h} \end{pmatrix}. \quad (13)$$

В этом случае каждое суммирование по $\sigma_2, \sigma_3, \sigma_4, \dots, \sigma_N$ в (12) можно рассматривать как последовательное умножение матриц, а суммирование по σ_1 — как операцию взятия следа:

$$Z_N = \text{Trace } \mathbf{V}^N. \quad (14)$$

На каждом шаге вычислений умножение на матрицу \mathbf{V} соответствует суммированию по конфигурациям еще одного узла решетки. Матрица \mathbf{V} называется трансфер-матрицей. Пусть $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2$ — два собственных вектора матрицы \mathbf{V} , а λ_1 и λ_2 — соответствующие собственные значения, в этом случае

$$\mathbf{V}\mathbf{x}_j = \lambda_j\mathbf{x}_j, \quad j = 1, 2. \quad (15)$$

Если \mathbf{P} — матрица 2×2 , столбцы которой составлены из компонент векторов \mathbf{x}_1 и \mathbf{x}_2 , т.е.

$$\mathbf{P} = (\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2), \quad (16)$$

то из (15) следует

$$\mathbf{V} \cdot \mathbf{P} = \mathbf{P} \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{pmatrix}. \quad (17)$$

Так как \mathbf{V} — симметричная матрица, то находят пару ортогональных линейно-независимых собственных векторов $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2$. Матрица \mathbf{P} , составленная из компонент такой пары, несингулярна, т.е. имеет обратную матрицу \mathbf{P}^{-1} . Умножение (17) на \mathbf{P}^{-1} дает:

$$\mathbf{V} \cdot \mathbf{P} = \mathbf{P} \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{pmatrix} \mathbf{P}^{-1}. \quad (18)$$

После подстановки этого выражения для \mathbf{V} в выражение (14) матрицы сокращаются:

$$Z_N = \text{Trace} \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{pmatrix}^N = \lambda_1^N + \lambda_2^N. \quad (19)$$

Если λ_1 — наибольшее из двух собственных значений, то в этом случае (19) можно записать

$$N^{-1} \ln Z_N = \ln \lambda_1 + N^{-1} \ln [1 + (\lambda_2/\lambda_1)^N]. \quad (20)$$

Так как $|\lambda_2/\lambda_1| < 1$, второй член справа стремится к нулю, когда $N \rightarrow \infty$. Из этого следует, что свободная энергия при $N \rightarrow \infty$ стремится к следующему пределу:

$$f(H, T) = -kT \lim N^{-1} \ln Z_N. \quad (21)$$

Следуя [20] и учитывая, что для железа температура Кюри — $T_{\text{Curier}} = 1048^\circ \text{K}$, запишем выражение для свободной энергии:

$$F = -Nk_B T_{\text{Curier}} \log \lambda, \quad (22)$$

$$\lambda_1 = -2 \cosh (J_{\text{exc}}/k_B T_{\text{Curier}}), \quad (23)$$

$$\lambda_1 = -(e^{J/k_B T_K} - e^{-J/k_B T_K}), \quad (23a)$$

где F — свободная энергия, k_B — постоянная Больцмана, N — число атомов (L. Onzager в [20] записывает гиперболический косинус именно в виде \cosh).

Отметим, что „обменный интеграл“, J_{exc} (exchange), в общем виде записывается [19]:

$$J_{\text{exc}} = \frac{1}{4} \left\{ \tilde{J}_{AB} - \frac{1}{2} (\tilde{J}_{AA} + \tilde{J}_{BB}) \right\},$$

где \tilde{J}_{AA} — энергия взаимодействия между атомами AA , \tilde{J}_{AB} — энергия взаимодействия между атомами AB .

Применим известное значение J_{exc} для чистого железа исходя из соотношения в работе [19], учитывая температуру $T_{\text{Curier}} = 1043 \text{K}$:

$$k_B T_{\text{Curier}} = p J_{\text{exc}}, \quad J_{\text{exc}} = k_B T_{\text{Curier}}/p \approx 1.8 \cdot 10^{-21}, \quad (24)$$

где p — координационное число.

Из выражений (23a) и (24) имеем:

$$\lambda_1 = - \left[e^{1.8 \cdot 10^{-21}/(1.38 \cdot 10^{-23} \cdot 297)} - e^{-1.8 \cdot 10^{-21}/(1.38 \cdot 10^{-23} \cdot 297)} \right] = -0.9.$$

Определим количество атомов на стороне шестиугольной сетки (рис. 5) [22]

$$N = L/a = 653.$$

Число атомов на поверхности сетки (шестиугольное число, рис. 5 [23]):

$$N_{\Pi} = (4n_L^2 - 2n_L)/2, \quad (25)$$

$$N_{\Pi} = (4n_L^2 - 2n_L)/2 = 85.2 \cdot 10^4.$$

Приближенно будем считать, что внутренние атомы (рис. 6) занимают, по крайней мере, половину от наружных (точное расположение неизвестно) т.е. $n_{\text{in}} \approx 653/2 \approx 325$. В этом случае число атомов дислокационной сетки будет

$$N_D = N_{\Pi} - n_{\text{in}} \approx 64.2 \cdot 10^4.$$

Свободная энергия в одномерной модели Изинга $F \approx 82.8 \cdot 10^{-16} \text{J}$.

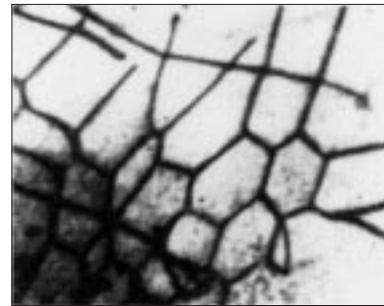


Рис. 5. Дислокационные сетки в железе ($\times 36000$).

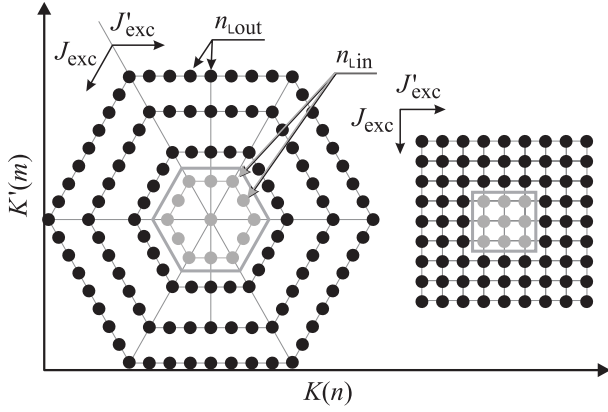


Рис. 6. Двумерная модель Изинга (шестиугольной сетки и квадратной) в координатной системе поля Вейсса.

Далее, следуя [20], свободную энергию определяем для сетки дислокаций в платине (парамагнетик). В этом случае наибольшее число матрицы λ_1 (19) Онзагер связывает с растягивающим напряжением на один атом

$$\lambda_1 = \sigma_1 / k_B T, \quad (26)$$

$$W = \sigma^2 V / 2E \quad (\text{энергия на кристалл}), \quad (27)$$

$$\Delta W = W / N = \sigma^2 M / 2EN_A \rho, \quad (28)$$

$$\Delta \sigma = 2E \Delta W / V_{\text{at}}, \quad (29)$$

где $\sigma_i = \Delta \sigma$ — напряжение на один атом, ΔW — энергия на один атом, N_A — число Авогадро, M — молярная масса, ρ — плотность, E — модуль Юнга, V — объем кристалла, V_{at} — объем атома.

На внешней стороне шестиугольной сетки число атомов $n_{L\text{out}} = 0.02 \cdot 10^{-6} / 2.775 \cdot 10^{-10} \approx 72$ at. Число атомов на поверхности в сетке

$$N_{\Pi} = 4n_L^2 - 2n_L / 2 = 10\,296.$$

Считая, что на внутренней стороне $n_{L\text{in}} \approx 36$ at, имеем

$$N_{\Pi\text{in}} = 4n_{L\text{in}}^2 - 2n_{L\text{in}} / 2 \approx 5148.$$

Число атомов сетки $N_D \approx 5148$, т.е. вычитаем из внешнего шестиугольного числа меньшее, внутреннее. Учитывая, что толщина фольги [17] $t \approx 100$ nm, а вследствие утонения (см. выше) ~ 80 nm, то общее число атомов в объеме

$$N = (t/a)N_{\Pi} \approx 1.45 \cdot 10^5. \quad (30)$$

Свободная энергия шестиугольной сетки из платины, с учетом ориентации фольги, по выражению (22):

$$F_{\text{six angle}} \approx 3.75 \cdot 10^{-16} \text{ J},$$

аналогично для цинка $F_{\text{six angle}} \approx 42.5 \cdot 10^{-16} \text{ J}$ (см. таблицу).

Определим далее собственную энергию для квадратной сетки из платины (рис. 2) по выражению (8) — подходами теории дислокаций. Величина $L \approx$

$\approx (0.02 \dots 0.03) \cdot 10^{-6} \text{ m}$. Остальные параметры сохраняются. $W_{\text{Pt four angle (disloc)}} \approx 5 \cdot 10^{-16} \text{ J}$. Далее для той же сетки свободную энергию определяем в одномерной модели Изинга, следуя [20], применяя выражения (22), (23а).

В данном случае изменится число атомов в сетке — N . Число атомов на поверхности N_{Π} будет следующим:

$$N_{\Pi} = (L/a)^2.$$

На одной стороне

$$L/a = (0.02-0.03) \cdot 10^{-6} / 2.775 \cdot 10^{-10} = 72-108,$$

$$N_{\Pi} = (72-108)^2 = 5184-11\,664.$$

Общее число N будет (30) $\approx 1.67 \cdot 10^7$ (внутреннее квадратное число не учитываем).

Свободная энергия: $F_{\text{Pt four angle (Onzager)}} \approx 4.9 \cdot 10^{-16} \text{ J}$.

Далее определим свободную энергию в двумерной модели Изинга при $h = 0$ [24]:

$$F(n, m, 0) = 1/2\pi \int_0^{\pi} f(\theta) d\theta, \quad (31)$$

где

$$f(\theta) = \ln 2 + \ln [\text{ch}(2n) \text{ch}(2m) + t^{-1}(1 + t^2 - 2t \cos \theta)^{1/2}],$$

$t = 1 / \text{sh}(2n) \text{sh}(2m)$, $n = v / k_B T$, $m = \mu / k_B T$; v, μ — коэффициенты межспиновых взаимодействий по соответствующим направлениям, или, в обозначениях (11), $F(n, m, 0) \equiv F(K, K', 0)$,

$$f(\theta) = \ln 2 + \ln [\text{ch}(2K) \text{ch}(2K') + t^{-1}(1 + t^2 - 2T \cos \theta)^{1/2}],$$

$$t = 1 / \text{sh}(2K) \text{sh}(2K').$$

В [24] для двумерной модели

$$\text{Trace } A^N = \lambda^N \left(1 + \sum \theta_1^N \right).$$

Так как между векторами взаимодействий (Fe) угол 120° (см. рис. 5), то

$$N \ln \lambda_1 + N \ln(\lambda_2 / \lambda_1) = N \left[\ln(-0.9) + \frac{1}{2} \ln(-3) \right] \approx N \cdot 0.54,$$

$$F \approx 119.3 \cdot 10^{-16} \text{ J}.$$

Далее определим статистическую сумму по выражению (4) для кластера, состоящего из одной шестиугольной ячейки для Pt: $q = 3$, $K = 1$, $v = \exp K - 1 = 1.718$. Для шести сторон $m = 432$ (по числу связей атомов). Будем в самом грубом приближении считать, что ячейка состоит только из двух рядов атомов:

$$Z = 2 \cdot 3^1 \cdot (1.718)^{432} = 2022,$$

$$F \sim kT \ln Z \sim 1.38 \cdot 10^{-23} \cdot 2022 \cdot 1300 \sim 0.36 \cdot 10^{-16} \text{ J}.$$

Так как распределение атомов в сетке неизвестно, то предположим, что правомерно определить свободную энергию из большего числа атомов, (принимая 12). В этом случае имеем

$$Z \approx 51\,314, \quad F \approx 9.2 \cdot 10^{-16} \text{ J}.$$

Выводы

1. Исследование дислокационных сеток с применением теории перколяции показало возможность разделения кластеров по двум модельным представлениям — Изинга и Поттса.

2. Показана принципиальная возможность определения количества кластеров в моделях Изинга и Поттса с применением производящих функций.

3. Рассчитана энергия Гиббса—Гельмгольца для дислокационных сеток (шестиугольных и квадратных) подходами теории перколяции в модельных представлениях: Изинга и в простейшей модели Поттса на графах.

4. Установлено, что явный минимум свободной энергии для дислокационных сеток, определенный методами в моделях Изинга (одномерной и двумерной), наблюдается в сетках из платины. Минимум энергии Гиббса—Гельмгольца — критерий устойчивости материалов. Любое контролируемое изменение фазового состава материала либо легирование должно проводиться так, чтобы в тонкой структуре (кластерах дислокаций) выполнялось условие минимума энергии Гиббса—Гельмгольца. Причем уже появление сеток дислокаций — критерий области устойчивости. Разрозненные дислокации (винтовые и смешанные) — явный признак метастабильности.

Автор благодарен академику РАН Новикову И.И. и канд. физ.-мат. наук доц. МИФИ Аксеновой Е.Н. за поддержку и обсуждение статьи.

Список литературы

- [1] *Shante V.K., Kirkpartic S.* // Adv. in Phys. 1971. Vol. 20. N 85. P. 325–357.
- [2] *Займан Дж.М.* Модели беспорядка. Теоретическая физика однородно неупорядоченных систем. М.: Мир, 1982. 591 с.
- [3] Вероятность и математическая статистика. М.: Большая Российская энциклопедия, 2003. 912 с.
- [4] *Broadment S.R. and Hammersley J.M.* Proc. Camb. Phil. Soc. 1957. Vol. 53. P. 629–641.
- [5] Физическая энциклопедия. Т. 1. / Гл. ред. А.М. Прохоров. М.: Большая Российская энциклопедия, 1998.
- [6] *Kasteleyn P.W., Fortuin C.M.* // J. Phys. Soc. Jpn. 1969. Vol. 26. N 11 (Suppl.)
- [7] *Fortuin C.H., Kasteleyn P.W.* // Physica. 1972. Vol. 57. P. 536.
- [8] *Essam J.W.* Phase transition and critical phenomena. N.Y.: Academic Press, 1972. Vol. 2. P. 197–270.
- [9] *Sykes M.F., Essam J.W.* // Phys. Rev. 1964. Vol. 133. P. A310–315.
- [10] *Новиков И.И.* Термодинамика спинодалей и фазовых переходов. М.: Наука, 2000. 165 с.
- [11] *Shim Y., Levine L.E., Thomson R., Savage M.F.* // Physica A. 2003. Vol. 320. P. 11–24.
- [12] *Xiao Q., Youjin D.* // Phys. Rev. B 2005. Vol. 71. N 14. P. 144 303-1–144 303-6.
- [13] *Vandewalle N., Galam S. Kramer.* // Eyr. Phys. J. B. 2000. Vol. 14. P. 407–410.
- [14] *Wu F.Y.* // Rev. Mod. Phys. 1982. Vol. 54. N 1. P. 235–268.

- [15] *Kaufman M., Kardar M.* // Phys. Rev. B. 1984. Vol. 29. N 9. P. 5053–5059.
- [16] *Амелинкс С.* Методы прямого наблюдения дислокаций. М.: Мир, 1968. 440 с.
- [17] *Рюле М., Уилкенс М.* // Физическое металловедение. Т. 1. М.: Металлургия, 1987. 640 с.
- [18] *Хирт Дж., Лоте И.* Теория дислокаций. М.: Атомиздат, 1972.
- [19] *Займан Дж.М.* Принципы теории твердого тела. М.: Мир, 1974. 472 с.
- [20] *Onzager L.* // Phys. Rev. 1944. Vol. 65. P. 117–149.
- [21] *Бэкстер Р.* Точно решаемые модели в статистической механике. М.: Мир, 1985. 488 с.
- [22] *Новиков И.И.* Дефекты кристаллического строения металлов. М., 1975. 208 с.
- [23] *Ван дер Варден Б.Л.* Пробуждающаяся наука. Математика Древнего Египта, Вавилона и Греции. М.: КомКнига, 2006. 460 с.
- [24] *Дмитриев А.А., Катрахов В.В., Харченко Ю.Н.* Корневые трансфер-матрицы в моделях Изинга. М.: Наука, 2004. 192 с.