

PACS numbers: 02.30.Jr, 02.30.Mv, 05.65.+b, 05.70.Ln, 34.20.Gj, 63.20.Ry

Самоорганизация как результат неупругих колебаний атомов в цепочке

В. И. Засимчук, Е. Э. Засимчук

*Институт металлофизики им. Г. В. Курдюмова НАН Украины,
бульв. Академика Вернадского, 36,
03142 Киев, Украина*

Получено уравнение для описания колебаний атомов в одномерной цепочке в приближении, несколько отличающемся от квазиупругого. Оно решено методом теории возмущений. Малым параметром был выбран нелинейный член $f^\Pi(\alpha)x_nx_{nn}$. Показано, что такие колебания могут порождать упорядоченную структуру в виде периодически (по длине цепочки) расположенных вакансий.

Ключевые слова: самоорганизация, одномерная цепочка атомов, неквазиупругие колебания, гидродинамический канал, атом-вакансационные состояния, вакансии, упорядоченная структура, теория возмущений.

Одержано рівняння для опису коливань атомів у одновимірному ланцюжку у наближенні, яке дещо відрізняється від квазіпружного. Воно вирішено методом теорії збурень. Малим параметром було обрано нелінійний член $f^\Pi(\alpha)x_nx_{nn}$. Показано, що такі коливання можуть породжувати упорядковану структуру у вигляді періодично (по довжині ланцюжка) розташованих вакансій.

Ключові слова: самоорганізація, одновимірний ланцюжок атомів, неквазіпружні коливання, гідродинамічний канал, атом-вакансійні стани, вакансії, упорядкована структура, теорія збурень.

The equation for atoms oscillation description at one-dimensional chain in

Corresponding author: Vera Igorevna Zasimchuk
E-mail: vera_59@voliacable.com

*G.V. Kurdumov Institute for Metal Physics, N.A.S. of Ukraine,
36 Academician Vernadsky Blvd., UA-03142 Kyiv, Ukraine*

Citation: V. I. Zasimchuk and E. E. Zasimchuk, Self-Organization as Consequence of Atoms not Elastic Oscillations at Chain, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **41**, No. 6: 765–774 (2019), DOI: [10.15407/mfint.41.06.0765](https://doi.org/10.15407/mfint.41.06.0765).

approximation, which some differs from the quasi-elastic one, are received. It is solved by the perturbation theory method. The nonlinear term $f^{\Pi}(\alpha)x_nx_{nn}$ is chosen as a small parameter. As shown, such oscillations may produce ordered structure of vacancies, which are placed periodically along the length of chain.

Key words: self-organization, one-dimensional chain of atoms, non-quasi-elastic oscillations, hydrodynamic channel, atom-vacancy states, vacancies, ordered structure, perturbation theory.

(Получено 1 июня 2015 г.; окончат. вариант — 6 марта 2019 г.)

1. ВВЕДЕНИЕ

Известно явление: если через некоторую систему пропускать достаточно большой поток энергии, в ней может возникнуть некоторый порядок или самоорганизация [1–4]. Это явление пытались объяснить с помощью неравновесной термодинамики [1–4]. Однако практически неизвестно, как это происходит на атомном уровне. В настоящей работе мы попытались ответить на этот вопрос на примере одномерной цепочки атомов, в которой последние совершают неквазиупругие колебания вокруг своих положений равновесия [5].

Получившуюся в результате структуру можно считать «прообразом» гидродинамического канала [6–10]. Гидродинамические каналы играют важную роль в процессах массопереноса вещества в условиях, когда дислокационное скольжение тормозится либо ранее возникшей субструктурой, либо изначально не может происходить при некоторых ориентировках кристаллов [11, 12]. В то же время пластичность таких кристаллических материалов, в основном металлических, неоднократно наблюдалась экспериментально.

В наших предыдущих работах [6–8] было показано, что прокатка ряда металлов как в монокристаллическом, так и в поликристаллическом состояниях на начальных этапах сопровождается образованием ячеистой структуры, которая препятствует свободному перемещению дислокаций. В этих условиях при продолжающемся действии внешнего механического поля возникает так называемая структурная неустойчивость [8] — полное разрушение дислокационных границ. В дислокационном хаосе отдельные дислокации могут перемещаться на небольшие расстояния, порождая вакансии. Дальнейшее взаимодействие вакансий сопровождается образованием структуры, которую можно рассматривать как зародыш гидродинамического канала [13]. В некоторых случаях деформации ГЦК-монокристаллов дислокационное скольжение тормозится из-за множественного скольжения [11]. Тогда образованию гидродинамического канала может способствовать возникновение атом-вакансационных состояний. Истоки такого процесса рассматриваются

в данной статье.

2. РЕЗУЛЬТАТЫ И РАСЧЁТЫ

Рассмотрим одномерную цепочку, состоящую из $2N+1$ положительных ионов, погруженных в электронный газ. На каждый n -й ион, находящийся внутри цепочки, действуют приведённые силы

$$f_{n,n+i} = f(a + x_{(n+i)} - x_{(n)}) \quad (1)$$

со стороны $n+i$ ионов, где $i = \pm 1$, a — расстояние между двумя соседними ионами, соответствующее минимуму суммы их потенциальной энергии и энергии окружающих их электронов U , $x_{(n)}$ — отклонение от положения равновесия n иона;

$$f(R) = -(1/m)(\partial U(R)/\partial R) = -(1/m)U^I(R), \quad (2)$$

где m — масса иона, R — расстояние между двумя соседними ионами. Соответственно

$$\frac{\partial f}{\partial R} = f^I(R), \quad \partial^2 f / \partial R^2 = f^{II}(R). \quad (3)$$

Будем рассматривать дискретную переменную n как непрерывную. Тогда путём разложения в ряд Тейлора [14] получим

$$x_{(n+1)} = x_{(n)} + \partial x_{(n)} / \partial n + 0,5(\partial^2 x_{(n)} / \partial n^2) + \dots . \quad (4)$$

Переобозначим

$$x = x_{(n)}, \quad x_n = \partial x / \partial n \quad (5)$$

и т.д. Разложим функцию $f_{n,n+1}$ в ряд по малому параметру $x_{(n+1)} - x_{(n)}$. Тогда получим

$$\begin{aligned} f_{n,n+1} &= f(a) + f^I(a)(x_n + 0,5x_{nn} + \dots) + \\ &+ 0,5f^{II}(a)(x_n + 0,5x_{nn} + \dots)^2 + \dots . \end{aligned} \quad (6)$$

Аналогично можно записать $f_{n-1,n}$. По 3-му закону Ньютона [15]:

$$f_{n,n-1} = -f_{n-1,n}. \quad (7)$$

По 2-му закону Ньютона [15]:

$$x_{tt} = f_{n,n+1} + f_{n,n-1}, \quad (8)$$

$$x_{tt} = \partial^2 x / \partial t^2, \quad (9)$$

t — время. Тогда получим уравнение

$$x_{tt} = f^I(a)x_{nn} + f^{II}(a)x_n x_{nn} + \dots \quad (10)$$

с граничными условиями в нулевом приближении:

$$x(N) = x(-N) = 0. \quad (11)$$

2.1. Нахождение x

Полагаем нелинейный член в (10) малой величиной. Будем искать $x(n, t)$ в виде убывающего ряда:

$$x = X + hx^{(1)} + \dots \quad (12)$$

Тогда в нулевом приближении имеем:

$$X_{tt} - k^2 X_{nn} = 0, \quad (13)$$

$$k^2 = f^I(a). \quad (14)$$

С учётом граничных условий (11) ищем решение (13) в виде:

$$X = h \sin(qn) \sin(pt), \quad (15)$$

$$q = \pi m/N, \quad (16)$$

где m — целое число. Из (13):

$$p = kq = k\pi m/N. \quad (17)$$

Тогда относительно $x^{(1)}$ получаем уравнение:

$$x_{tt}^{(1)} - k^2 x_{nn}^{(1)} = -hf^{II}(a)q^3 \sin(qn) \cos(qn) \sin^2(pt) = \\ = -\xi \sin(2qn)(1 - \cos(2pt)), \quad (18)$$

$$\xi = hf^{II}q^3/4. \quad (19)$$

Решение уравнения (18) будет иметь вид:

$$x^{(1)}(n, t) = A_1 \sin(2qn) + B_1 n \cos(2qn) \cos(2pt), \quad (20)$$

$$A_1 = -\pi m h f^{II} / (16 f^I N), \quad (21)$$

$$B_1 N = h f^{II} \pi^2 m^2 / (16 f^I N). \quad (22)$$

Условием убывания ряда (12) является условие:

$$|A_1| \ll 1, |B_1 N| \ll 1. \quad (23)$$

Поскольку

$$\pi m > 1, \quad (24)$$

из (21) и (22) мы получаем условие:

$$h \ll 16f^I N / (\pi^2 m^2 f^{II}). \quad (25)$$

Мы видим, что при больших N (больших размерах цепочки) h может достигать значительных величин.

2.2. Образование упорядоченной структуры из вакансий

Продифференцируем обе части (10) по n и введём переменную

$$z = x_n. \quad (26)$$

Получим

$$z_{tt} = f^I(a)z_{nn} + f_{(N)}, \quad (27)$$

$$f_{(N)} = f^{II}(a)(z_n^2 + zz_{nn}). \quad (28)$$

Решение этого уравнения в 0-ом приближении (линейном), как видно из (15), имеет вид:

$$z = hq\cos(qn)\sin(pt). \quad (29)$$

Полагаем, что колебания столь интенсивны, что в областях

$$qn = \pi l_1, \quad (30)$$

$$pt = \pi/2 + \pi l_2 - s + pt_1, \quad (31)$$

где l_1 и l_2 — целые числа одинаковой чётности;

$$0 < s \ll 1, |pt_1| \ll 1, \quad (32)$$

$$z = H\cos(s - pt_1)a/2, \quad (33)$$

$$H = hq. \quad (34)$$

Следовательно, функцию $f_{n,n+i}$ (см. (1)) можно разложить в ряд

Тейлора уже вблизи точки

$$1,5\alpha = \alpha + \alpha_2. \quad (35)$$

Рассуждая аналогично приведенному выше, получим уравнение:

$$x_{tt} = f^I(a + \alpha_2)x_{nn} + F_1, \quad (36)$$

$$F_1 = f^{II}(a + \alpha_2)(x_n - \alpha_2)x_{nn}. \quad (37)$$

Пренебрежём нелинейным членом F_1 вследствие его малости. Можно показать, что

$$f^I(1,5\alpha) = 0 \quad (38)$$

(см. п. 2.3). Тогда из (36) с учётом (26) получим

$$z_{tt} = 0. \quad (39)$$

Перейдём к новой переменной t_1 (как сделано в (31)). Получаем

$$\partial^2 z / \partial t_1^2 = 0. \quad (40)$$

Решение (40) имеет вид:

$$z = b_0 + b_1 t_1. \quad (41)$$

Полагаем, что при $t_1 < 0$ z имеет вид (33), а при $t_1 > 0$ z имеет вид (41). «Сшиваем» эти решения в точке $t_1 = 0$, как это делалось в [16]:

$$b_0 = H \cos(s), \quad (42)$$

$$b_1 = \partial z / \partial t_1(t_1 = 0) = H p \sin(s) > 0. \quad (43)$$

Таким образом мы видим, что в зонах (30) при выполнении (33), а значит и расстояние между соседними атомами (см. (4) и (26)), будут неограниченно возрастать и образуются вакансии.

Значит, в случае (33) с учётом (30) образуется упорядоченная структура, состоящая из вакансий.

2.3. Приложение

Как известно [17], энергия U одного иона вместе с отделёнными от него электронами определяется выражением

$$U = -A/(a + x) + B/(a + x)^2, \quad (44)$$

где a — расстояние между ионами, соответствующее положению минимума U , $a + x$ — расстояние между ионами, A, B — положительные константы, определяемые в [17]

$$\partial U / \partial x = A/(a+x)^2 - 2B/(a+x)^3. \quad (45)$$

Из определения переменной a (после (44)), получим

$$A/a^2 - 2B/a^3 = 0, \quad a = 2B/A. \quad (46)$$

Из (45), (2) и (3):

$$h - mf^I = \partial^2 U / \partial x^2 = -2A/(a+x)^3 + 6B/(a+x)^4. \quad (47)$$

Отсюда мы видим, что $f^I = 0$ при

$$x = 3B/A - a, \quad (48)$$

а из (46)

$$x = a/2 = a_2. \quad (49)$$

3. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

1. До сих пор рассматривались такие колебания атомов в кристаллической решётке, которые являются достаточно слабыми, чтобы их можно было рассматривать в квазиупругом приближении [5]. В настоящей работе мы рассмотрели более интенсивные колебания и получили для них уравнение (10). Мы предположили, что нелинейный член мал и решили это уравнение методом теории возмущений. Условием правомерности такого подхода является условие:

$$h \ll 16f^I(\alpha)N/(\pi^2 m^2 f^{II}(\alpha)).$$

Отсюда видно, что такие колебания могут быть тем интенсивнее, чем больше атомов в цепочке. Аналогичный результат имеем из условия

$$x_{(n+1)} - x_{(n)} \approx x_n \ll \alpha \quad (50)$$

(см.(1), (4) и (6)). Тогда с учётом (15) и (16):

$$h \ll \alpha N / \pi m. \quad (51)$$

Напомним, что α — межатомное расстояние, соответствующее ми-

нимуму их энергии.

2. Как видно из (20), условие (11) в первом порядке малости выполняться не может. Это означает, что при таких колебаниях образец (цепочка) частично теряет свойства твёрдого тела и приобретает свойства жидкости.

3. Мы видим, что уравнение (10) имеет бесконечное множество стационарных состояний вида:

$$x_n = \text{const.} \quad (52)$$

4. Пусть на нашу цепочку атомов действует механическая нагрузка. Тогда из (10) вместо (15):

$$X = bn + h \sin(qn) \sin(pt). \quad (53)$$

Предположим, у нас нагрузка растяжения и b — положительная константа. Тогда упорядоченная структура из вакансий, описанная в п. 2.2, может возникать при меньших амплитудах колебаний h атомов в цепочке. При достаточно больших нагрузках и b упорядоченная структура (и её «прообраз» — гидродинамический канал [6–10]) может возникнуть с макроскопически ощутимой вероятностью.

5. Возможность рождения вакансий и других дефектов в кристалле за счёт тепловых колебаний рассматривалась и в других работах, в частности в [18]. Однако в [18] искались условия, когда среднее значение квадрата смещений $\langle u^2 \rangle$ стремится к бесконечности, а значит, происходит разрушение материала. Мы же искали условия, когда вакансию периодически располагаются по длине образца, а значит, образуется новая упорядоченная структура.

Безусловно, приведенный расчёт является очень упрощённым и не может описывать поведение атомов в реальном бездефектном кристалле. Однако он показывает, что во внешнем энергетическом поле в кристалле могут возникнуть локальные области, в которых амплитуда колебаний атомов порядка половины межатомного расстояния. Такие области могут рассматриваться как области атом-вакансионных состояний [11], являющихся зародышами участков гидродинамического течения вещества в кристаллическом материале.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В настоящей работе было показано, что достаточно интенсивные колебания атомов в одномерной решётке могут вызывать появление упорядоченной структуры в виде периодически расположенных вакансий. Такое состояние вряд ли может возникнуть самопроизволь-

но, без влияния внешнего энергетического поля. Однако в условиях пластической деформации, когда возможен ряд нелинейных процессов (например, локализация напряжений), некоторые атомы могут оказаться за пределами разрешённых позиций (т.е. могут отклониться на расстояния, большие $a/2$). Результат этого и рассмотрен в данной статье. Такая структура может быть предтечей гидродинамического канала, по которому может осуществляться гомогенный перенос массы (пластическое течение). Такое явление есть иллюстрация известного в неравновесной термодинамике факта: если через некоторую систему пропускать достаточно большой поток энергии, в ней может возникнуть некоторый порядок или самоорганизация [1–4]. Действительно, при прохождении достаточно большого потока энергии через цепочку ионов в ней возникают их колебания, достаточно интенсивные для того, чтобы породить упорядоченную структуру в виде периодически расположенных вакансий, а эта структура в свою очередь эволюционирует в гидродинамический канал.

Следует отметить, что некоторое подобие такой структуры, получившей название атом-вакансионного состояния, наблюдалось при моделировании методом молекулярной динамики с использованием грид-технологии поведения атомов нанокристалла с ГЦК-кристаллической решёткой при одноосном нагружении [12].

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. Г. Николис, И. Пригожин, *Самоорганизация в неравновесных системах* (Москва: Мир: 1979).
2. П. Глендорф, И. Пригожин, *Термодинамическая теория структуры, устойчивости и флуктуаций* (Москва: Мир: 1973).
3. Г. Хакен, *Синергетика* (Москва: Мир: 1980).
4. В. Эбелинг, *Образование структур при необратимых процессах* (Москва: Мир: 1979).
5. А. И. Ансельм, *Введение в теорию полупроводников* (Москва: Наука: 1978).
6. Е. Е. Zasimchuk and L. I. Markashova, *Mater. Sci. Eng. A*, **127**, No. 1: 33 (1990).
7. E. Zasimchuk, Yu. Gordienko, L. Markashova, and T. Turchak, *J. Mater. Eng. Performance*, **18**, No. 7: 947 (2009).
8. В. А. Лихачев, В. Е. Панин, Е. Э. Засимчук и др., *Кооперативные деформационные процессы и локализация деформации* (Киев: Наукова думка: 1989).
9. Yu. Gordienko, R. G. Gontareva, J. S. Schreiber, E. E. Zasimchuk, and I. K. Zasimchuk, *Adv. Eng. Mater.*, **8**, No. 10: 957 (2006).
10. Е. Э. Засимчук, В. И. Засимчук, Т. В. Турчак, *Успехи физики металлов*, **14**, № 3: 275 (2013).
11. Ю. Г. Гордіенко, *Металлофиз. новейшие технол.*, **33**, № 9: 1217 (2011).
12. О. С. Гаценко, О. Е. Засимчук, П. О. Теселько, С. Г. Стіренко, Ю. Г. Гордіенко, *Металлофиз. новейшие технол.*, **36**, № 9: 1207 (2014).
13. Yu. G. Gordienko and E. E. Zasimchuk, *Philos. Mag. A*, **70**, No. 1: 99 (1994).
14. Г. Корн, Т. Корн, *Справочник по математике для научных работников и инженеров* (Москва: Наука: 1978).

15. Б. М. Яворский, А. А. Детлаф, *Справочник по физике для инженеров и студентов вузов* (Москва: Гос. изд. физ.-мат. лит.: 1963).
16. А. А. Соколов, И. М. Тернов, В. Ч. Жуковский, *Квантовая механика* (Москва: Наука: 1979).
17. Я. И. Френкель, *Введение в теорию металлов* (Москва: Гос. изд. физ.-мат. лит.: 1958).
18. А. М. Косевич, *Физическая механика реальных кристаллов* (Киев: Наукова думка: 1981).

REFERENCES

1. G. Nicolis and I. Prigogine, *Samoorganizatsiya v Neravnovesnykh Sistemakh* [Self-Organization in Nonequilibrium Systems] (Moscow: Mir: 1979) (Russian translation).
2. P. Glansdorff and I. Prigogine, *Termodinamicheskaya Teoriya Struktury, Ustoichivosty i Fluktuatsiy* [Thermodynamic Theory of Structure, Stability and Fluctuations] (Moscow: Mir: 1973) (Russian translation).
3. H. Haken, *Sinergetika* [Synergetics] (Moscow: Mir: 1980) (Russian translation).
4. W. Ebeling, *Obrazovanie Struktur pri Neobratimykh Protessakh* [Strukturbildung bei Irreversiblen Prozessen] (Moscow: Mir: 1979) (Russian translation).
5. A. I. Anselm, *Vvedeniye v Teoriyu Poluprovodnikov* [Introduction to Semiconductor Theory] (Moscow: Nauka: 1978) (in Russian).
6. E. E. Zasimchuk and L. I. Markashova, *Mater. Sci. Eng. A*, **127**, No. 1: 33 (1990).
7. E. Zasimchuk, Yu. Gordienko, L. Markashova, and T. Turchak, *J. Mater. Eng. Perform.*, **18**, No. 7: 947 (2009).
8. V. A. Likhachyov, V. E. Panin, E. Eh. Zasimchuk et al., *Kooperativnye Deformatsionnye Protsessy i Lokalizatsiya Deformatsii* [Cooperative Deformation Processes and Localization of Deformation] (Kiev: Naukova Dumka: 1989) (in Russian).
9. Yu. Gordienko, R. G. Gontareva, J. S. Schreiber, E. E. Zasimchuk, and I. K. Zasimchuk, *Adv. Eng. Mater.*, **8**, No. 10: 957 (2006).
10. E. E. Zasimchuk, V. I. Zasimchuk, and T. V. Turchak, *Usp. Fiz. Met.*, **14**, No. 3: 275 (2013) (in Russian).
11. Yu. G. Gordienko, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **33**, No. 9: 1217 (2011) (in Ukrainian).
12. O. S. Gatsenko, O. E. Zasymchuk, P. O. Tesel'ko, S. G. Stirenko, and Yu. G. Gordienko, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **36**, No. 9: 1207 (2014) (in Ukrainian).
13. Yu. G. Gordienko and E. E. Zasimchuk, *Philos. Mag. A*, **70**, No. 1: 99 (1994).
14. G. Korn and T. Korn, *Mathematical Handbook for Scientists and Engineers* (New York: Mc Graw-Hill Book Company: 1968).
15. B. M. Yavorskiy and A. A. Detlaf, *Spravochnik po Fizike dlya Inzhenerov i Studentov Vuzov* [Physical Handbook for Engineers and Students] (Moscow: Gos. Izd. Fiz.-Mat. Lit.: 1963) (in Russian).
16. A. A. Sokolov, I. M. Ternov, and V. Ch. Zhukovskiy, *Kvantovaya Mekhanika* [Quantum Mechanica] (Moscow: Nauka: 1979) (in Russian).
17. Ya. I. Frenkel, *Vvedenie v Teoriyu Metallov* [Introduction to Metal Theory] (Moscow: Gos. Izd. Fiz.-Mat. Lit.: 1958) (in Russian).
18. A. M. Kosevich, *Fizicheskaya Mekhanika Realnykh Kristallov* [Physical Mechanics of Real Crystals] (Kiev: Naukova Dumka: 1981) (in Russian).