

ARTICLES UNDER DISCUSSION

PACS numbers: 05.65.+b, 05.70.Ln, 61.72.jd, 62.20.F-, 62.50.-p, 81.40.Lm, 89.75.Fb

Умови самоорганізації дисипативних модульованих структур у разі розподілу вакансій у середині циліндричного зразка

О. Е. Засимчук, В. І. Засимчук, Т. В. Турчак

*Інститут металофізики ім. Г. В. Курдюмова НАН України,
бульв. Академіка Вернадського, 36,
03142, Київ, Україна*

Проаналізовано умови утворення синергетичної структури, яка сприяє пластичній деформації без участі дефектів, особливо дислокацій, за рахунок самоорганізації вакансій у реальних кристалічних об'єктах. У даній роботі розглянуто рівняння для концентрації вакансій у циліндричному зразку. Одержано впорядковані рішення у вигляді чергування зон високої і низької концентрації вакансій. Ці рішення зменшуються зі збільшенням часу t і за $t \rightarrow \infty$ прямують до нуля. Зроблено припущення, що якщо зразок знаходитиметься у відповідному механічному полі, часу існування рішень може виявитися достатньо для утворення гідродинамічних каналів. Показано, що такі процеси можуть відбуватися тільки у відкритій системі.

Ключові слова: гідродинамічна течія, самоорганізація, вакансії, кристал, синергетична структура, циліндричний зразок.

The conditions for the formation of a synergistic structure that promotes plastic deformation without the participation of defects, mainly dislocations, are analyzed in real crystalline objects due to the self-organization of vacancies. The equation for the concentration of vacancies in a cylindrical sample is considered in this paper. The ordered solutions obtained are of the form of

Corresponding author: Tetyana Viktorivna Turchak
E-mail: ttv@bigmir.net

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

Citation: E. E. Zasimchuk, V. I. Zasimchuk, and T. V. Turchak, Conditions of Self-Organization of Dissipative Modulated Structures in a case of Vacancies Distribution in Cylindrical Sample, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **42**, No. 10: 1455–1466 (2020) (in Ukrainian), DOI: [10.15407/mfint.42.10.1455](https://doi.org/10.15407/mfint.42.10.1455).

alternating zones of high and low concentration of vacancies. These solutions decrease with increasing time t and tend to zero as $t \rightarrow \infty$. As assumed, if the sample is located in the corresponding mechanical field, the lifetime of the solutions may be sufficient for the formation of hydrodynamic channels. As shown, such processes can only take place in an open system.

Key words: hydrodynamic flow, self-organization, vacancies, crystal, synergetic structure, cylindrical sample.

(Отримано 14 лютого 2020 р.; остаточн. варіант — 3 серпня 2020 р.)

1. ВСТУП

Нині загальноприйнятим механізмом пластичної течії кристалів є переміщення дефектів, які вже знаходилися у кристалах. Проте цей процес неминуче супроводжується утворенням перешкод для переміщення дефектів — так званим утворенням деформаційної структури (коміркової, полігональної та ін.). Тому у процесі пластичної деформації реальних кристалічних об'єктів обов'язково неодмінно настає стадія зміцнення, тобто уповільнення приросту деформації у разі зростання прикладеного механічного навантаження. Коли деформаційне структуроутворення призводить до повного припинення релаксації зовнішнього механічного поля за рахунок пластичної формозміни об'єкта, останній або руйнується, або зазнає синергетичних змін, тобто утворення структури, яка сприяє подальшій пластичній деформації об'єкта.

Численні експериментальні, теоретичні та модельні дослідження [1–5] показали, що такою структурою у випадку твердих кристалічних тіл, є канали гідродинамічної течії речовини з «пухкою» аморфноподібною структурою всередині [3, 6]. Густина речовини цих каналів значно менша густини кристалічного об'єкта, що дозволяє припустити можливість того, що вакансійні дефекти відіграють головну роль в утворенні й розвитку каналів гідродинамічної течії. У цій статті розглянуто самоорганізацію вакансій у процесі пластичної деформації реальних кристалічних об'єктів, та показано можливість їх участі в утворенні синергетичної структури, яка сприяє пластичній деформації без участі дефектів, а саме дислокацій.

У радіаційному матеріалознавстві, зокрема у роботах [7, 8], умови самоорганізації дисипативної модульованої структури аналізують у просторовому розподілі вакансій, що взаємодіють, і на думку авторів, може використовуватися для прогнозування поведінки матеріалів під опроміненням без виконання попередніх випробувань, але у роботах [7, 8] було розглянуто самоорганізацію за рахунок взаємодії між вакансіями (притягання та відштовхування). Ми спробували доповнити це актуальне питання у нашій роботі.

2. РЕЗУЛЬТАТИ РОЗРАХУНКІВ

У рівняннях для концентрації вакансій та їхніх агломератів [9] знехтуємо взаємодією агломератів між собою.

Тоді для концентрації моновакансій (вакансій) v_1 одержуємо рівняння

$$\frac{dv_1}{dt} = B + D\Delta v_1, \quad (1)$$

де t — час, D — коефіцієнт дифузії вакансій; B — швидкість генерації вакансій, зокрема останні можуть генеруватися як за рахунок руху дислокацій, так і за рахунок коливань атомів у кристалі, чи за будь-яким іншим механізмом.

Нехай є циліндричний зразок, у якому перебувають вакансії. Запишемо оператор Δ в циліндричних координатах [10]:

$$\Delta f = \left(\frac{1}{r}\right) \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial f}{\partial r}\right) + \left(\frac{1}{r^2}\right) \frac{\partial^2 f}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial z^2}, \quad (2)$$

де $r^2 = x^2 + y^2$, $\operatorname{tg} \varphi = y/x$, x, y, z — декартові координати.

Розглянемо нескінченно високий циліндр. Тоді складовою $\partial^2 f / \partial z^2$ можна знехтувати. Припустимо, що розв'язок рівняння (1) матиме вигляд

$$v_1 = u(r) + \sum_n G_n W_n(r, \varphi) = u(r) + \sum_n Q_n(r, \varphi), \quad (3)$$

де G_n — довільні сталі, $u(r)$ — невпорядкована частина v_1 , $W_n(r, \varphi)$ — впорядковані частини v_1 . Вважаємо, що $G_n > 0$. Тоді перша складова матиме вигляд

$$u = A - br^2, \quad b = B/(4D). \quad (4)$$

Це можна перевірити, якщо зробити підстановку (4) в (2) і (1). На межі зразка, тобто в області $r = L$ повинна виконуватися умова:

$$v_1(r = L) = 0, \quad (5)$$

оскільки вакансії виходять через поверхню назовні. Відповідно

$$u(r = L) = 0. \quad (6)$$

Звідси одержуємо

$$A = BL^2/(4D). \quad (7)$$

Замість набору подібних доданків $\sum_n Q_n$ обмежимося розглядом одного доданка

$$Q = GW(r, \varphi, t). \quad (8)$$

Шукатимемо W у вигляді

$$W = V(r, \varphi) \exp(-qt). \quad (9)$$

Підставимо (9) в (1) і (2), знехтувавши членом v_{zz} , одержимо

$$\square_r V + V_{\varphi\varphi} + r^2 pV = 0, \quad (10)$$

в якому

$$\square_r V = r^2 V_{rr} + rV_r, \quad (11)$$

$$p = \frac{q}{D} > 0, \quad (12)$$

$$V_r = \frac{\partial V}{\partial r} \text{ і т.д.} \quad (13)$$

Скористаємося методом, аналогічним до того, який використовували для вивчення воднеподібного атома [11]. Знайдемо V у вигляді

$$V(r, \varphi) = R(r)F(\varphi). \quad (14)$$

Поділимо (10) на V та одержимо

$$R_1(r) = -F_1(\varphi), \quad (15)$$

$$R_1(r) = \square_r R/R + r^2 p, \quad (16)$$

$$F_{1(\varphi)} = F_{\varphi\varphi}/F. \quad (17)$$

Права та ліва частини рівняння (15) залежать від різних змінних (r та φ). Це можливо тільки коли вони дорівнюють деякій довільній сталій. Припустимо, що

$$F_1(\varphi) = -n^2. \quad (18)$$

Відповідно

$$R_1(r) = n^2. \quad (19)$$

З (17) та (18) одержуємо

$$F = \cos(n\varphi). \quad (20)$$

Оскільки φ — це кут, має виконуватися умова

$$F(\varphi + 2\pi) = F(\varphi). \quad (21)$$

Це можливо, лише якщо $F_1(\varphi) = -n^2$ і n — ціле число. Тоді з (19) і (16) відносно R одержимо рівняння

$$r^2 R_{rr} + r R_r + (r^2 p - n^2) R = 0. \quad (22)$$

З відомого рівняння Бесселя [10] для нас становить інтерес лише область $r > 0$. Тоді рішення (22) матиме вигляд:

$$R = J_n(rp^{1/2}) + a_1 Y_n(rp^{1/2}), \quad (23)$$

де J_n та Y_n — функції Бесселя відповідно першого та другого роду. Відомо з [10]:

$$\lim_{x \rightarrow 0} Y_n(x) = -\infty. \quad (24)$$

Тобто це рішення не представляє для нас інтересу, та будемо вважати

$$a_1 = 0. \quad (25)$$

Графіки $J_n(x)$ для J_n ($n = 0, 1, 2$) показано на рис. 1.

Очевидно, що це майже періодичні функції з від'ємними мінімумами і додатними максимумами. Тож, як ми бачимо з (23), (20), (14) і (9) можна зробити висновок, що концентрація вакансій розподілена за зразком нерівномірно, а майже періодично як по φ , так і по r . Оскільки ми знехтували залежністю від z , нанесемо на коло ділянки в інтервалах максимального і мінімального F , ($F_{\min} = -1$) та аналогічно \max і $\min J_n(rp^{1/2})$. Ділянки перетину \max з \max , та \min з \min , є зонами максимальних концентрацій вакансій у доданку $W(r, \varphi, t)$. У цих ділянках згодом можуть утворюватися гідродинамічні канали.

2.1. Граничні умови та умови самоорганізації

1. З (5) та (6) маємо

$$V(r = L) = R(r = L) = 0. \quad (26)$$

Відповідно з рис. 1 позначимо через x_j (j — ціле число) такі значення x , за яких функція $J_n(x)$ перетинає вісь OX . Важливо відзначи-

ти, що умова (26) може виконуватися лише за деяких дискретних значень p , а саме

$$p = p_j = \left(x_j/L\right)^2. \quad (27)$$

2. За $r < L$ має виконуватись умова:

$$v_1 > 0, \quad (28)$$

оскільки концентрація вакансій не може бути від'ємною. Враховуючи формули (3), (8), (9), (14) та (20), приходимо до висновку, що

$$u(r) - G|R(r)| > 0 \quad (G > 0) \quad (29)$$

для усіх r . Добираємо G таким чином, щоб нерівність (29) виконувалась.

Можна побачити, що зі збільшенням B , тобто зі зростанням швидкості генерації вакансій (див. формулу (1)) збільшується і максимальне G , тобто самоорганізований доданок. Відповідно, без постійної генерації вакансій неможлива й їх самоорганізація!

2.2. Врахування взаємодії між вакансіями

Запишемо аналогічно [7] рівняння, яке описує розподілення густини

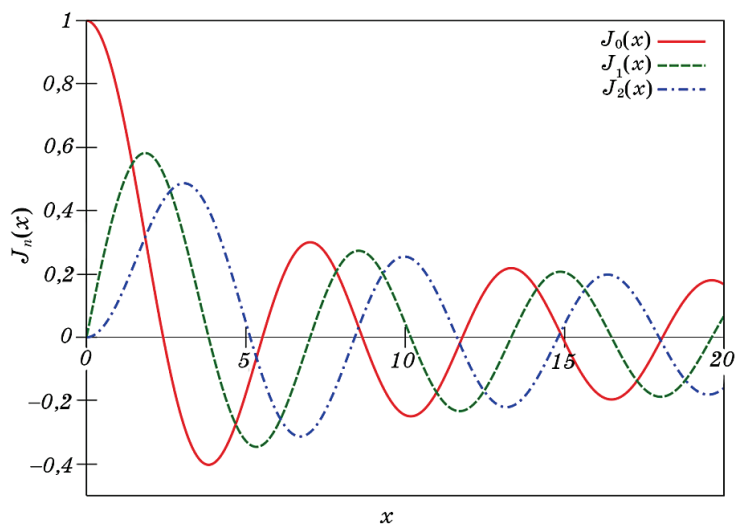


Рис. 1. Функція Бесселя.

Fig. 1. Bessel function.

ни вакансій у зразку в подальших припущеннях:

1. В одномірному припущенні.

2. У стаціонарному припущенні ($\partial v / \partial t = 0$).

$$\left(\frac{1}{D_v} \right) \left(K - \frac{v}{\tau} \right) + \frac{d}{dx} \left(\frac{dv}{dx} + v \frac{dS_a(x)}{dx} \right) = 0. \quad (30)$$

$$S_a(x) = \int_{\Omega} E(x - x') v(x') dx'. \quad (31)$$

Тут $v(x)$ — густина вакансій; τ — тривалість життя вакансій щодо вбирання їх стоками (поверхнею, дислокаційними петлями тощо); $E(R)$ — зведена енергія парної взаємодії вакансій; R — відстань між цими вакансіями. Дійсно, утворення стаціонарних упорядкованих станів відкритої вакансійної підсистеми можливе лише за наявності взаємодії моновакансій, що складається із суми деформаційно-індукованого та електрохімічного внесків [7, 8].

За реалістичних значень модулів пружності, енергій когезії та параметрів ґратниці кристала така сума є чималою за значенням, причому другий (майже ізотропний) внесок у ній домінує, але перший (анізотропний і до певної міри притягальний) визначає симетрію (й орієнтацію щодо кристалографічних осей зразка) дисипативної структури, що утворюється.

В іншому разі, коли міжвакансійною взаємодією можна знехтувати, очікувати стійкого впорядкованого стану підсистеми генерованих вакансій практично безнадійно (очевидно, такий стан «розмоктуватиметься» та зникатиме дуже швидко). Тому автори розглянули найпростіший (майже реалістичний) випадок, коли моновакансії взаємодіють з енергією $E(R)$, що спадає з віддаллю R між парою вакансій (орієнтованою вздовж осі циліндричного стрижня) за степеневим законом:

$$E(R) = \frac{d}{R^3} - \frac{a}{R^4} + \frac{b}{R^8}, \quad (32)$$

$$a = \frac{A}{k_B T}, \quad b = \frac{B}{k_B T}, \quad d = \frac{D}{k_B T}, \quad (33)$$

тобто нехтуючи фактично квазіосцилівним характером залежності $E(R)$ і відповідним рівнянням, (див., наприклад, [7, 8]), та модифікуючи рівняння (1) для вісесиметричного випадку у (30), (31) і (32); що можна побачити далі).

Усі інші позначення, аналогічно, як у роботі [7].

Знайдемо рішення $v(x)$ у вигляді

$$v(x) = C + hf(x) + \dots, \quad (34)$$

де h — стала та C — стала, яку знаходять з (30)

$$|h| \ll 1. \quad (35)$$

Шукаємо умови, за яких $f(x)$ буде впорядкованою коливною функцією. Прирівняємо коефіцієнти при h^1 та одержимо

$$f'' + CS'f' + CS''f - \frac{f}{\tau D_v} = -CS_b'', \quad (36)$$

$$S_b = \int_{\Omega} E(x - x')f(x')dx', \quad (37)$$

де

$$f' = \frac{df}{dx}, \quad S' = \frac{dS}{dx} \text{ і т.д.}$$

$$S = S_3d - S_4a + S_8b, \quad (38)$$

де S_n визначено у (41), n — натуральне число.

Згідно з (31), (32):

$$R = |x - x'|. \quad (39)$$

Вважаємо, що

$$-L < x < L, \quad -L < x' < L, \quad (40)$$

де L — половина довжини зразка.

Вважаємо також, що вакансії не можуть підходити одна до одної на відстань меншу, ніж ξ .

Тоді одержимо

$$S_n = \int_{x+\xi}^L \frac{dx'}{|x' - x|^n} + \int_{-L}^{-\xi+x} \frac{dx'}{|x' - x|^n}. \quad (41)$$

Введемо нову змінну

$$y = x' - x. \quad (42)$$

Одержимо

$$S_n = \int_{\xi}^{L-x} \frac{dy}{|y|^n} + \int_{-L-x}^{-\xi} \frac{dy}{|y|^n}. \quad (43)$$

Звідси

$$S_n = 2 \int_{\xi}^L \frac{dy}{y^n} + \int_L^{L-x} \frac{dy}{y^n} + \int_L^{L+x} \frac{dy}{y^n}. \quad (44)$$

Таким чином, виходить

$$S_n = C_1 + \left(\frac{L^{1-n}}{(n-1)} \right) \left[\left(1 - \frac{x}{L} \right)^{1-n} + \left(1 + \frac{x}{L} \right)^{1-n} \right], \quad (45)$$

де C_1 — стала, яка не представляє для нас інтересу, оскільки ми шукаємо похідні від S_n . Розкладемо S_n у ряд Маклорена за x :

$$\frac{x}{L} \left(\left| \frac{x}{L} \right| < 1 \right)$$

за допомогою [10]

$$S_n(x) = C_1 + L^{1-n} \left(2 + \frac{nx^2}{L^2} + \dots \right). \quad (46)$$

Можна побачити, що наразі відсутні члени з непарними ступенями (x/L) . Тоді з (38) і (46) одержимо рівняння:

$$S' = 2L^{-4}(3d + 8bL^{-5} - 4aL^{-1})x + 0(x^3). \quad (47)$$

$$S'' = 2L^{-4}(3d + 8bL^{-5} - 4aL^{-1}) + 0(x^2) = q^2 + 0(x^2), \quad (48)$$

$$f'' + a_1 f = -CS_b'', \quad (49)$$

$$a_1 = Cq^2 - \frac{1}{\tau D_v}. \quad (50)$$

Припустимо, що

$$f = \cos(px). \quad (51)$$

Тоді з рівняння (37) з урахуванням (42) впливає

$$S_b \approx \int_{\Omega} E(-y) \cos p(y+x) dy = I_1 \cos px - I_2 \sin px, \quad (52)$$

$$I_1 = \int_{\Omega} E(-y) \cos py dy, \quad (53)$$

$$I_2 = \int_{\Omega} E(-y) \sin py dy. \quad (54)$$

Згідно (32) $E(y)$ — мала величина, за виключенням області

$$|y| \ll 1. \quad (55)$$

Але у цьому випадку

$$\sin py \rightarrow 0. \quad (56)$$

Можна легко показати за допомогою інтегрування по частинам, що в інших областях I_1 та I_2 дуже малі величини.

Таким чином

$$|I_2| \ll |I_1|. \quad (57)$$

Із (49), з врахуванням (50)–(52) і (57) можна приблизно записати

$$(p^2 - a_1 - CI_1) \cos px = 0. \quad (58)$$

Звідси знаходимо p .

За $p^2 > 0$ маємо впорядковане коливне рішення. Це можливо як за $d > 0$ так і за $d < 0$. Усе залежить і від інших членів.

Припускаємо, що граничні умови мають вигляд

$$hf(x)(|x| = L) = \eta. \quad (59)$$

З (51)

$$h = \frac{\eta}{\cos(pL)}. \quad (60)$$

Якщо

$$pL \rightarrow \frac{\pi(2j+1)}{2}, \quad (61)$$

де j — ціле число,

$$|h| \rightarrow \infty, \quad (62)$$

тобто одержимо дуже інтенсивні впорядковані коливання концентрації вакансій, а це враховуючи (48), (50) і (58), відбувається за визначених співвідношень L , a , b , d і т.д.

3. ОБГОВОРЕННЯ РЕЗУЛЬТАТІВ ТА ВИСНОВКИ

1. Дослідження процесів самоорганізації передбачає пошук нових

упорядкованих стаціонарних станів, а також умов, за яких система перейде у ці нові стани. Упорядкований стан, який ми розглядаємо, і який відповідає доданку $Gw(r, \varphi, t)$ не є стаціонарним, тому що він пропорційний до $\exp(-qt)$. Він є нестійким, оскільки $q > 0$. Перевіримо, що ж станеться, коли система перейде у цей стан:

Розглянемо випадок, коли на циліндричний зразок не діє зовнішнє навантаження. Тоді впорядкована частина $v_1 = w(r, \varphi, t)$, що видно з (9), є нестійкою функцією та зі збільшенням часу t зменшується і в решті-решт повністю зникає

$$\lim_{t \rightarrow \infty} w(t) = 0. \quad (63)$$

Зовнішнього навантаження, яке діє на зразок уздовж осі OZ , навіть за невеликого часу існування $w(t)$, може виявитися достатньо для утворення нової впорядкованої структури — гідродинамічних каналів (ГК).

2. Збільшення швидкості генерацій вакансій B призводить до росту максимального G , тобто самоорганізованого доданку.

Таким чином, чим більше вакансій за одиницю часу утворюється, тим більше зможе самоорганізуватися. Без генерації вакансій неможлива їх самоорганізація, тобто ми маємо відкриту систему. Можна також сказати, що ми маємо справу з дисипативною структурою [12].

3. Відповідно до рівняння теплопровідності [10], яке має вигляд аналогічний (1), у зразку може виникнути впорядковане розподілення температур. А так як від температури залежать і чимало фізичних властивостей матеріалу зразка, то це може викликати і впорядковане розподілення інших фізичних параметрів.

ЦИТОВАНА ЛІТЕРАТУРА—REFERENCES

1. Yu. G. Gordienko and E. E. Zasimchuk, *Philos. Mag. A*, **70**, No. 1: 99 (1994).
2. E. E. Zasimchuk and L. I. Markashova, *Mater. Sci. Eng. A*, **127**, No. 1: 33 (1990).
3. O. Eh. Zasymchuk, V. I. Zasymchuk, and T. V. Turchak, *Uspehi Fiz. Met.*, **14**, No. 3: 275 (2013) (in Russian).
4. E. Zasimchuk, O. Baskova, O. Gatsenko, and T. Turchak, *J. Mater. Eng. Perform.*, **26**, No. 3: 1293 (2017).
5. O. S. Gatsenko, O. E. Zasymchuk, P. O. Tesel'ko, S. G. Stirenko, and Yu. G. Gordienko, *Metallofiz. Noveishie Tekhnologii*, **36**, No. 9: 1207 (2014) (in Ukrainian).
6. E. Zasimchuk, O. Baskova, O. Gatsenko, and T. Turchak, *J. Mater. Eng. Performance*, **27**, No. 8: 4183 (2018).
7. O. V. Oliinyk and V. A. Tatarenko, *Dopovidi Nats. Akad. Nauk Ukrainy*, No. 3: 55 (2019) (in Ukrainian).
8. O. V. Oliinyk and V. A. Tatarenko, *Radiation Effects and Defects in Solids*,

- 174, Nos. 5–6: 519 (2019).
9. V. I. Zasimchuk, E. Eh. Zasimchuk, and Yu. G. Gordienko, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **36**, No. 4: 445 (2014) (in Russian).
 10. G. Korn and T. Korn, *Spravochnik po Matematike dlya Nauchnykh Rabotnikov i Inzhenerov* (Moscow: Nauka: 1978) (in Russian).
 11. A. A. Sokolov, I. M. Ternov, and V. Ch. Zhukovskiy, *Kvantovaya Mekhanika* [Quantum Mechanics] (Moscow: Nauka: 1979) (in Russian).
 12. G. Nicolis and I. Prigogine, *Self-Organization in Nonequilibrium Systems from Dissipative Structures to Order Through Fluctuations* (New York: Wiley: 1977).