Metallophysics and Advanced Technologies
Металофіз. новітні технол.
Metallofiz. Noveishie Tekhnol.
2023, vol. 45, No. 9, pp. 1099–1107
https://doi.org/10.15407/mfint.45.09.1099
Reprints available directly from the publisher

PACS numbers: 02.30.Jr, 02.30.Nw, 05.65.+b, 61.72.Bb, 61.72.jd, 82.40.Ck, 82.40.Np

Утворення упорядковних розподілів температури та вакансій під час деформації металевих кристалів

$\boxed{\text{О. Е. Засимчук}}$, В. І. Засимчук, Т. В. Турчак, О. І. Баскова, О. С. Гаценко

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

У статті розглянуто тривимірні рівняння теплопровідности та дифузії: а) за малої, але впорядкованої функції теплових джерел $f(r,t)$; б) за $f(r,t) \equiv 0$. Розглянуто як стаціонарний, так і нестаціонарний випадки та встановлено, що утворюються, як завгодно складні розподіли температури та концентрації вакансій по координатах. Показано, що всередині зразка можуть виникати нові двовимірні структури, яких не задано крайовими умовами.

Ключові слова: рівняння теплопровідности, дифузія, функція теплових джерел, вакансії, впорядкований розподіл, стаціонарний розв'язок, ряд Фур'є, самоорганізація, гідродинамічні канали.

Three-dimensional equations of heat conduction and diffusion are considered in the article: a) with a small, but well-ordered function for thermal sources $f(r,t)$; b) for $f(r,t) \equiv 0$. Stationary and non-stationary cases are discussed, and the formation of arbitrary complex distributions of temperature and concentrations of vacancies along co-ordinates is established. As shown, new two-dimensional structures not specified by the boundary conditions arise within the sample.

Key words: thermal-conduction equation, diffusion, heat-source function,

Corresponding author: Oleksandr Serhiyovych Gatsenko
E-mail: gats@imp.kiev.ua

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

Citation: $\boxed{\text{O. Eh. Zasymchuk}}$, V. I. Zasymchuk, T. V. Turchak, O. I. Baskova, and O. S. Gatsenko, Formation of Ordering Temperature and Vacancies' Distributions During Deformation of Metal Crystals, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **45**, No. 9: 1099–1107 (2023). DOI: 10.15407/mfint.45.09.1099 vacancies, ordered distribution, stationary solution, Fourier series, self-organization, hydrodynamic channels.

(Отримано 8 вересня 2020 р.; остаточн. варіянт — 10 січня 2023 р.)

1. ВСТУП

Питанням самоорганізації різних структурних параметрів матеріялів за енергетичних впливів займалися у багатьох роботах (див., наприклад, [1, 2]), але досі всі процеси, що відбуваються за цих умов, не було детально описано із врахуванням самоорганізації температури під час впливу на металевий кристал у механічному полі. За такого впливу кристал деформується, і за значної віддалености від рівноваги деформується пластично. Також відомо, що за гальмування дислокаційного ковзання через розвиток деформаційної релаксаційної структури [3, 4] пластична деформація відбувається шляхом гідродинамічної течії по каналах з рідиноподібною структурою — так званих гідродинамічних каналах (ГК), яка збагачена вакансіями [5]. Цей процес супроводжується розігрівом матеріялу та складним розподілом температури кристалу в процесі навантаження [6, 7], що є наслідком деформаційного структуроутворення, зокрема утворення ГК. Враховуючи ці дані, нами було проведено аналітичні розрахунки, які показали зв'язок між розігрівом кристалу в процесі пластичної деформації та розподілом температури, що пов'язано з механізмом деформаційного структуроутворення.

Ці розрахунки проводилися за допомогою розв'язання рівняння теплопровідности, чим займалися здавна [8] й по наш час [9, 10, 11]. У нашій роботі ми знайшли розв'язки з малою чи нульовою функціями теплових джерел (ФТД) $f(r,t)$ та сильним коливанням температури $u(r,t)$. Ця робота цікава також і тим, що такий же вигляд має рівняння дифузії [12].

2. РЕЗУЛЬТАТИ РОЗРАХУНКІВ

Запишемо рівняння теплопровідности:

$$\frac{du}{dt} - a^2\Delta u = f(r,t)\,,\ -L_x \le x \le L_x, -L_y \le y \le L_y, -L_z \le z \le L_z\,, \qquad (1)$$

де $u(r,t)$ задає температуру в точці з координатами $\mathbf{r}$ у момент часу t, a^2 — коефіцієнт теплопровідности, $f(r,t)$ — функція теплових джерел, Δ — Ляплясів оператор [8]. Такий же вигляд має й рівняння дифузії, зокрема дифузії вакансій [12].

Крайові умови див. у (12)–(14) і далі. Початкові умови див. у (44)–(46).

Нехай маємо прямокутній зразок. Тоді функція теплових джерел $f(r,t)$ має вигляд:

$$f(r,t) = A\cos(q_x x)\cos(q_y y)g(z)\,, \tag{2}$$

$$g(z) = D_1\exp(pz) + D_2\exp(-pz)\,, \tag{3}$$

де q_x, q_y, p — дійсні числа, A, D_1, D_2 — деякі константи.

Така функція може виникати, наприклад, на осях Ox й Oy за рахунок теплових коливань атомів у ґратниці [13]. Так, у роботі [13] одержано вираз для зміщення атомів у ланцюжку x_1:

$$x_1 = h\cos(qn)\sin(\omega t)\,, \tag{4}$$

де n — номер атома, h, q, ω — деякі константи. Відповідно, швидкість атома v визначається виразом

$$v = h_1\cos(qn)\cos(\omega t)\,, \tag{5}$$

де $h_1 = h\omega$.

Функція теплових джерел пропорційна кінетичній енергії атомів, тобто

$$f(r,t) = f_1 + f_2 = h_2 m v^2 = H_1\cos^2(qn)\cos^2(\omega t) = H\cos^2(\omega t)(1+\cos(2qn))\,, \tag{6}$$

де m — маса атома, h_2, H_1, H — деякі константи. Таким чином, одна зі складових $f(r,t)$, — функція $f_2(n,t)$, — визначається виразом

$$f_2(n,t) = H\cos^2(\omega t)\cos(2qn)\,, \tag{7}$$

що відповідає (2).

По осі Oz нашу ФТД одержуємо за рахунок внутрішніх напружень, які з'являються, наприклад, як результат циклічного навантаження [14].

Шукаємо u у вигляді

$$u = B\cos(q_x x)\cos(q_y y)g(z) + C_1\,. \tag{8}$$

Підставляємо (8) у (1). Маємо:

$$B = \frac{A}{a^2 c}\,, \tag{9}$$

$$c = q_x{}^2 + q_y{}^2 - p^2\,. \tag{10}$$

Тоді

$$\lim_{|c|\to 0}|B| = \infty . \tag{11}$$

Таким чином, ми бачимо, що для $|c| \to 0$ навіть за малого значення функції теплових джерел $f(r)$ маємо впорядкований розподіл температури $u(r)$ у зразку з великими амплітудами коливань.

Розглянемо зразок у формі прямокутнього паралелепіпеда. Можна записати рівняння для меж зразка:

$$|x| = L_x, \quad |y| = L_y, \quad |z| = L_z , \tag{12}$$

де L_x, L_y, L_z — позитивні константи. Припустимо, що ФТД $f(r,t)$ є такою, що виконуються умови

$$q_x = (\pi + 2\pi j_x)/2L_x , \quad q_y = (\pi + 2\pi j_y)/2L_y , \tag{13}$$

де j_x, j_y — натуральні числа і 0. Тоді розв'язок (8) рівняння (1) має крайові умови:

$$u(|x| = L_x) = u(|y| = L_y) = C_1 , \tag{14}$$

тобто коливання в (1) задаються лише по осі Oz.

Визначимо

$$Bg(L_z) = C_2, \quad Bg(-L_z) = C_3 .$$

Тоді з (8)

$$u(L_z) = C_2\cos(q_x x)\cos(q_y y) + C_1, \quad u(-L_z) = C_3\cos(q_x x)\cos(q_y y) + C_1 ,$$

тобто, щоби описаний в нашій роботі ефект мав місце, обов'язкові періодичні крайові умови по осі Oz.

Розглянемо випадок

$$c \to 0 . \tag{15}$$

Тоді з (10) і (13) маємо

$$p \approx (q_x^2 + q_y^2)^{1/2} = (\pi^2 / 4)((1+2j_x)^2 / L_x^2 + (1+2j_y)^2 / L_y^2)^{1/2} . \tag{16}$$

Це означає, що чим тонше зразок, тим більше p, тобто тим швидше u спадає з глибиною проникнення у середину зразка по вісі Oz.

1. Візьмемо, наприклад, товстий зразок:

$$2L_x = 2L_y = 3{,}14 \text{ см} . \tag{17}$$

Тоді з (13) для

$$j_x = j_y = 0\,, \tag{18}$$

$$q_x = q_y = 1 \text{ см}^{-1} \tag{19}$$

із (16) маємо:

$$p \approx (2)^{1/2} \text{ см}^{-1} = 1,41 \text{ см}^{-1}\,. \tag{20}$$

2. Розглянемо тепер тонкий зразок; наприклад,

$$2L_x = 2L_y = 94,2 \text{ мкм} = 94,2 \cdot 10^{-4} \text{ см}\,. \tag{21}$$

Тоді з (13) із врахуванням (18)

$$q_x = q_y = \left(10^3 / 3\right) \text{ см}^{-1} \tag{22}$$

і з (16)

$$p_1 = 10^2 \left(200 / 9\right)^{1/2} = 471 \text{ см}^{-1}\,, \tag{23}$$

$$p_1 / p = 334,04\,. \tag{24}$$

Таким чином, у тонкому зразку u спадає з глибиною проникнення приблизно у $\cong$ 334 рази швидше, ніж у товстому.

2.1. Випадок $c = 0$

Як ми бачимо з (1), (8) і (10) при

$$c = 0 \tag{25}$$

навіть для $f(r,t) \equiv 0$ ми маємо розв'язок (1) у вигляді (8) (стаціонарний розв'язок). Це ж є слушним для аналогічного рівняння дифузії і т.д. Слушним є також розв'язок

$$u = \sum_n \sum_m B_{nm} \cos(q_{xn} x) \cos(q_{ym}) g_{nm}(z)\,, \tag{26}$$

якщо для всіх n і m слушною є умова

$$c_{nm} = q_{xn}{}^2 + q_{ym}{}^2 - p_{nm}{}^2 = 0\,. \tag{27}$$

Оскільки практично будь-яку функцію можна розвинути в ряд Фур'є [12], ми можемо мати у стаціонарному стані практично любу двовимірну функцію $F_i(x,y)$. Зрозуміло, що такі функції є різними для різних z.

Коефіцієнти B_{nm}, q_{xn}, q_{ym} можна знайти з крайових умов.

2.2. Нестаціонарний випадок

Припустимо, що навантаження діє симетрично вздовж осі Oz. Тоді

$$u = \sum_n \sum_m u_{nm} = \exp(\xi t)\sum_n \sum_m A_{nm}\mathrm{ch}(p_{nm}z)\cos(q_{xn}x)\cos(q_{ym}y)\,. \tag{28}$$

Будемо шукати функцію $u(x,y,z,t)$, що відповідає крайовим умовам

$$u_{|z|=L} = \omega(x,y)\exp(\xi t)\,. \tag{29}$$

Тут ξ, p_{nm}, q_{xn}, q_{ym} — константи, $\omega(x,y)$ — деяка функція. (Ми вважаємо, що маємо прямокутній зразок з $-L_x < x < L_x$, $-L_y < y < L_y$, $-L_z < z < L_z$.)

З (29) одержимо

$$u = A\exp(\xi t)\mathrm{ch}(p_{00}z)\sum_n \sum_m a_{nm}b_{nm}(\mathrm{ch}(p_{nm}z)\,/\,\mathrm{ch}(p_{00}\mathrm{z}))f_{nm}\,, \tag{30}$$

$$f_{nm} = \cos(q_{xn}x)\cos(q_{ym}y)\,, \tag{31}$$

$$b_{nm} = \frac{\mathrm{ch}(p_{00}L)}{\mathrm{ch}(p_{nm}L)}\,, \tag{32}$$

a_{nm} — коефіцієнти розвинення функції $u(x,y,z)$ в ряд Фур'є з прийняттям до уваги крайових умов (29) у припущенні, що для всіх n і m $p_{nm} = 0$. Тоді при $|z| \neq L$ маємо

$$u(z) = A\exp(\xi t)\mathrm{ch}(p_{00}z)(v_0 + v)\,, \tag{33}$$

$$v_0 = \sum_n \sum_m a_{nm}f_{nm}(xy)\,, \tag{34}$$

$$v(z) = \sum_{n=1}^{\infty}\sum_{m=1}^{\infty} a_{nm}(b_{nm}F(z) - 1)f_{nm}\,, \tag{35}$$

$$F(z) = \frac{\mathrm{ch}(p_{nm}z)}{\mathrm{ch}(p_{00}z)} = \frac{\mathrm{ch}(Qz)}{\mathrm{ch}(pz)}\,. \tag{36}$$

Визначимо

$$F_1(z) = \frac{1}{F(z)}\,. \tag{37}$$

У нас

$$Q = p_{nm} >> p = p_{00} . \tag{38}$$

Тому

$$\exp(-Qz) << \exp(Qz)F_1(z) \approx \exp((p-Q)z) + \exp(-(p+Q)z) . \tag{39}$$

Припускаємо

$$F_1(z) \approx \exp((p-Q)z) + \exp(-(p+Q)z) . \tag{40}$$

Звідси

$$\frac{dF_1}{dz} < 0, \ \ \frac{dF}{dz} > 0, \ \ b_{nm}F(z) = \frac{F(z)}{F(L)} < 1 , \tag{41}$$

оскільки $z < L$.

Таким чином,

$$v(x, y, z) \neq 0 . \tag{42}$$

Нагадаємо , що для всіх n і m має виконуватися рівняння

$$\xi - a^2(p_{nm}{}^2 - q_{xn}{}^2 - q_{ym}{}^2) = 0 \tag{43}$$

(див. (1)). Можна побачити, що член $v_0(x,y,z)$ описує клясичний розв'язок (1), а член $v(x,y,z)$ — самоорганізований розв'язок (1), наприклад, розташування вакансій, які потім можуть перетворитися на гідродинамічні канали.

2.3. Початкові умови для (1)

1) Стаціонарний випадок. Як ми бачимо з (8),

$$u_{t=0} = B\cos(q_x x)\cos(q_y y)g(z) + C_1 . \tag{44}$$

2) Нестаціонарний випадок. Як ми бачимо з (28),
а) при $\xi > 0$

$$u_{t=0} \approx 0 , \tag{45}$$

б) при $\xi < 0$

$$u_{t=\infty} = 0 . \tag{46}$$

3. ОБГОВОРЕННЯ РЕЗУЛЬТАТІВ І ВИСНОВКИ

1. Постає важливе питання: як же виникають функції теплових джерел (ФТД) вигляду (2). Ми припускаємо, що по осях Ox й Oy вони виникають за рахунок теплових коливань атомів у ґратниці [13], а по осі Oz — за рахунок внутрішніх напружень, які з'являються, наприклад, як результат циклічного навантаження [14]. У роботах [6, 7] спостерігалися так звані плями оксидів, які виникають за дуже високих температур. Можна зробити припущення, що в цьому випадку ФТД були такими, що набувають малих числових значень (див. (10), (11)).

2. Досі вважалося, що теплопровідність і дифузія приводять до вирівнювання температур і концентрацій вакансій по всьому об'єму зразка. Ми ж одержали стаціонарний розв'язок у вигляді як завгодно складного розподілу цих параметрів по координатах (див. (26)). В усіх випадках ми розглядали поведінку вакансій лише в механічному полі деформації, а не в опроміненому зразку (як у роботах [15, 16]).

3. Нами було одержано явний математичний вигляд опису зародків гідродинамічних каналів.

ЦИТОВАНА ЛІТЕРАТУРА

1. E. Zasimchuk, T. Turchak, and N. Chausov, *Results Mater.*, **6**: 100090 (2020).
2. E. Zasimchuk, L. Markashova, O. Baskova, T. Turchak, N. Chausov, V. Hutsaylyuk, and V. Berezin, *J. Mater. Eng. Perform.*, **22**, No. 7: 3421 (2013).
3. E. Zasimchuk, O. Baskova, O. Gatsenko, and T. Turchak, *J. Mater. Eng. Perform.*, **26**, No. 3: 1293 (2017).
4. Е. Э. Засимчук, В. И. Засимчук, Т. В. Турчак, *Успехи физ. мет.*, **14**, № 3: 275 (2013).
5. Yu. G. Gordienko and E. E. Zasimchuk, *Philos. Mag. A*, **70**, No. 1: 99 (1994).
6. Н. Д. Бега, Е. Э. Засимчук, С. Н. Каверина, С. А. Фирстов, *Металлофизика*, **2**, № 1: 71 (1980).
7. В. Т. Трощенко, Е. Э. Засимчук, Н. Д. Бега, *Физ. мет. металловед.*,**45**, № 4: 850 (1978).
8. Б. М. Яворский, А. А. Детлаф, *Справочник по физике для инженеров и студентов вузов* (Москва: Гос. изд. физ.-мат. лит.: 1963).
9. T. Blomberg, *Byggnadsfysik LTH* (Lunds Tekniska Högskola: 1996).
10. S. Ahmed, P. Singh, and S. Ekkad, *ASME. J. Heat Transfer*, **142**, Iss. 5: 051302 (2020).
11. Г. С. Карслоу, Д. С. Егер, *Теплопроводность твердых тел* (Москва: Наука: 1964) (пер. з англ.).
12. Г. Корн, Т. Корн, *Справочник по математике для научных работников и инженеров* (Москва: Наука: 1978) (пер. з англ.).
13. В. И. Засимчук, Е. Э. Засимчук, *Металлофиз. новейшие технол.*, **41**, № 6: 765 (2019).
14. В. Т. Трощенко, *Деформирование и разрушение металлов при многоцикло-*

вом нагружении (Киев: Наукова думка :1981).
15. О. В. Олійник, В. А. Татаренко, *Допов. Нац. акад. наук Укр.*, № 3: 55 (2019).
16. O. V. Oliinyk and V. A. Tatarenko, *Radiation Effects and Defects in Solids*, **174**, Iss. 5–6: 519 (2019).

REFERENCES

1. E. Zasimchuk, T. Turchak, and N. Chausov, *Results Mater.*, **6**: 100090 (2020).
2. E. Zasimchuk, L. Markashova, O. Baskova, T. Turchak, N. Chausov, V. Hutsaylyuk, and V. Berezin, *J. Mater. Eng. Perform.*, **22**, No. 7: 3421 (2013).
3. E. Zasimchuk, O. Baskova, O. Gatsenko, and T. Turchak, *J. Mater. Eng. Perform.*, **26**, No. 3: 1293 (2017).
4. E. E. Zasimchuk, V. I. Zasimchuk, and T. V. Turchak, *Uspehi Fiz. Met.*, **14**, No. 3: 275 (2013) (in Russian).
5. Yu. G. Gordienko and E. E. Zasimchuk, *Philos. Mag. A*, **70**, No. 1: 99 (1994).
6. N. D. Bega, E. Eh. Zasimchuk, S. N. Kaverina, and S. A. Firstov, *Metallofizika*, **2**, No. 1: 71 (1980) (in Russian).
7. V. T. Troshchenko, E. E. Zasimchuk, and N. D. Bega, *Fiz. Met. Metalloved.*, **45**, No. 4: 850 (1978) (in Russian).
8. B. M. Yavorsky and A. A. Detlaf, *Spravochnik po Fizike dlya Inzhenerov i Studentov Vuzov* [Handbook of Physics for Engineers and University Students] (Moskva: Gos. Izd. Fiz.-Mat. Lit.: 1963).
9. T. Blomberg, *Byggnadsfysik LTH* (Lunds Tekniska Högskola: 1996).
10. S. Ahmed, P. Singh, and S. Ekkad, *ASME. J. Heat Transfer*, **142**, Iss. 5: 051302 (2020).
11. G. S. Carslaw and J. C. Jaeger, *Teploprovodnost Tverdykh Tel* [Conduction of Heat in Solids] (Moskva: Nauka: 1964) (Russian translation).
12. G. Korn and T. Korn, *Spravochnik po Matematike dlya Nauchnykh Rabotnikov i Inzhenerov* [Handbook of Mathematics for Scientists and Engineers] (Moskva: Nauka: 1978) (Russian translation).
13. V. I. Zasimchuk and E. Eh. Zasimchuk, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **41**, No. 6: 765(2019) (in Russian).
14. V. T. Troshchenko, *Deformirovanie i Razrushenie Metallov pri Mnogotsiklovom Nagruzhenii* [Deformation and Destruction of Metals under High-Cycle Loading] (Kiev: Naukova Dumka: 1981) (in Russian).
15. O. V. Oliinyk and V. A. Tatarenko, *Dopov. Nac. acad. Nauk Ukr.*, No. 3: 55 (2019) (in Ukrainian).
16. O. V. Oliinyk and V. A. Tatarenko, *Radiation Effects and Defects in Solids*, **174**, Iss. 5–6: 519 (2019).