УДК 621.373.8

РАСПРОСТРАНЕНИЕ НЕЛИНЕЙНОЙ ВОЛНЫ ПРОДОЛЬНОЙ ДЕФОРМАЦИИ В ТВЕРДОМ ТЕЛЕ С УЧЕТОМ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ С ТОЧЕЧНЫМИ ДЕФЕКТАМИ, ГЕНЕРИРУЮЩИМИСЯ С ПОВЕРХНОСТИ КЛАСТЕРОВ

Ф. Мирзоев, Л. А. Шелепин

Исследуется влияние точечных дефектов, генерирующихся с поверхности кластеров, на распространение нелинейной волны продольной деформации в кристалле. Приведены оценки релаксационных вкладов в линейную скорость звука, а также в диссипативные и дисперсионные свойства решетки.

В работах [1] рассматривается модель распространения нелинейной волны продольной деформации в упругой среде с учетом взаимодействия с точечными дефектами (ТД) – вакансиями и междоузельными атомами, генерирующимися из узлов кристаллической решетки под влиянием внешних потоков энергии. Однако известно, что поверхности различных нанометрических кластеров (пор, дислокационных петель и т.д.) как имеющиеся в кристалле, так и генерирующиеся в процессе лазерного воздействия, также могут служить эффективными источниками ТД в кристалле. Скорость "кластерной" генерации ТД подчиняется активационному закону и возрастает с ростом температуры и с уменьшением активационного барьера Q. При распространении возмущений поля упругой деформации, за счет деформационного потенциала ТД, активационный барьер Q уменьшается, что приводит к деформационно-стимулированному "испарению" кластеров, в результате которого концентрация ТД в матрице увеличивается. Эффективность кластеров как источников ТД особенно значительна при их более высоких начальных объемах и концентрациях.

В данной работе рассматривается влияние кластерной генерации ТД на диссипативные и дисперсионные свойства среды, на характеристики распространяющейся в кристалле нелинейной продольной волны упругой деформации.

Пусть p – объемная доля кластеров в кристалле. Для определенности ограничимся рассмотрением генерации одного типа ТД, например, междоузельных атомов (МА). Если изменение размеров кластеров лимитируется диффузией, то, согласно [2], поведение переменной $p(x,t)$ описывается активационным уравнением, которое с учетом влияния деформации может быть записано в виде

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -\frac{p}{\tau_p}\exp\left[-\frac{Q(e)}{kT}\right], \quad \tau_p = \frac{V(0)}{4\pi R_s N(0) D_0 n_{th}\Omega}. \tag{1}$$

Здесь $N(0)$ – начальная концентрация кластеров, $V(0)$ – начальный объем кластеров, D_0 – коэффициент диффузии МА, $R_s = 2\sigma_0\Omega/kT$ (σ_0 – поверхностное натяжение кристалла, Ω – объем МА, T – температура), n_{th} – равновесная концентрация МА, $Q(e) = Q_0 - \vartheta_d e$ – энергия активации, модулированная деформацией $e = \partial u/\partial x$ ($u(x,t)$ – проекция вектора смещения $\vec{u}$ на ось x), Q_0 – энергия активации в отсутствие деформации, ϑ_d – деформационный потенциал. В принципе, добавка к энергии активации в (1) невелика, но даже малые изменения в Q (порядка 1–5%) могут привести к существенному изменению скорости "деформационного отжига" кластеров.

Соответствующее уравнение для концентрации МА в приближении "генерация – релаксация", имеет вид:

$$\frac{\partial n}{\partial t} = -\frac{V(0)}{\Omega}\frac{\partial p}{\partial t} - \frac{n}{\tau}. \tag{2}$$

Источниковое слагаемое в (2) зависит (согласно формуле (1)) от деформации сплошной среды, от начальных концентрации и объема кластеров, от температуры среды, а также от материальных свойств кристалла. Деформационная зависимость времени релаксации (τ) может быть связана модуляцией энергии миграции МА: $\tau = \tau_0\exp(\vartheta_m e/kT)$, где $\vartheta_m = K\Omega_m$; τ_0 – время релаксации дефектов в отсутствие деформации; K – модуль всестороннего сжатия; Ω_m – дилатационный объем, характеризующий изменение объема кристалла при образовании в нем одного МА [3]. По порядку величины $\Omega_m \approx d_0^3$ (d_0 – период решетки). Время релаксации τ определяет рекомбинацию МА на внутренних неоднородностях (например, границах блоков, дислокациях, примесях внедрения и т.д.), играющих роль нейтральных стоков.

Уравнение для упругих смещений сплошной среды запишем в виде [1, 4]:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - c_s^2\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - \frac{\beta}{\rho}\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\frac{\partial u}{\partial x} - g_1\frac{\partial^4 u}{\partial t^2\partial x^2} + g_2\frac{\partial^4 u}{\partial x^4} = -\frac{K\Omega_m}{\rho}\frac{\partial n}{\partial x}. \tag{3}$$

Здесь c_s – скорость продольных волн в кристалле в отсутствие МА; ρ – плотность среды; g_1 и g_2 – дисперсионные параметры; β – коэффициент нелинейности [5]. Для большинства твердых тел (металлов, многих полимеров) $\beta < 0$. Существуют также и металлы, в которых отклонение упругих свойств решетки от закона Гука незначительно. В этом случае $\beta > 0$. При записи уравнения (3), ограничиваясь в дальнейшем плавными возмущениями деформации, мы учли вклады в пространственную дисперсию модулей упругости в первом неисчезающем приближении.

Совокупность уравнений (1) – (3) образует замкнутую систему уравнений, для описания распространения слабонелинейных возмущений продольных деформаций в средах с квадратичной упругой нелинейностью, с учетом взаимодействия с дефектами, генерирующимися с поверхности кластеров.

Представим решение системы (1) – (2) в виде суммы пространственно однородных (p_0, n_0) и неоднородных решений $(\delta p, \delta n)$: $p = p_0 + \delta p$, $n = n_0 + \delta n$. Подставляя эти решения в (1) и (2), в линейном приближении получим систему уравнений:

$$\frac{\partial \delta n}{\partial t} + \frac{\delta n}{\tau} = -\frac{V(0)}{\Omega}\frac{\partial \delta p}{\partial t} - \frac{n_0|\tau_e|}{\tau^2}\frac{\partial u}{\partial x}, \tag{4}$$

$$\frac{\partial \delta p}{\partial t} = -\frac{\delta p}{\tau_p'} - \frac{p_0}{\tau_p'}\frac{\vartheta_d}{kT}\frac{\partial u}{\partial x}, \tag{5}$$

где

$$\tau_p' = \frac{V(0)\exp(Q_0/kT)}{4\pi R_s N(0) D_0 \Omega n_{th}},$$

τ_e – характерное время релаксации деформации.

Рассмотрим автомодельные решения вида $u = u(\xi)$, $\delta n = \delta n(\xi)$, $\delta p = \delta p(\xi)$, где $\xi = x - vt$, описывающие нелинейные продольные волны деформации, концентрации дефектов и волны отжига кластеров, распространяющиеся с постоянной скоростью v в положительном направлении оси x. Тогда система дифференциальных уравнений в частных производных (3) – (5) переходит в следующую систему обыкновенных дифференциальных уравнений:

$$-v\frac{d\delta n}{d\xi} + \frac{\delta n}{\tau_0} = v\frac{V(0)}{\Omega}\frac{d\delta p}{d\xi} - \frac{n_0|\tau_e|}{\tau_0^2}\frac{du}{dx}, \tag{6}$$

$$-v\frac{d\delta p}{d\xi} + \frac{\delta p}{\tau_p'} = -\frac{p_0\vartheta_d}{\tau_p' kT}\frac{du}{d\xi}, \tag{7}$$

$$\left(v^2 - c_s^2\right)\frac{d^2u}{d\xi^2} - \frac{\beta}{\rho}\frac{d^2u}{d\xi^2}\frac{du}{d\xi} - \left(g_1v^2 - g_2\right)\frac{d^4u}{d\xi^4} + \frac{K\Omega_m}{\rho}\frac{dn}{d\xi} = 0. \tag{8}$$

В качестве граничных условий к уравнениям (6) – (8) примем следующие:

$$u_\xi(-\infty) = e_0, \quad u_\xi(+\infty) = 0,$$

$$\delta n(\pm\infty) = 0, \quad \delta p(\pm\infty) = 0. \tag{9}$$

Граничные условия (9) означают, что распространение волновых возмущений деформации в среде с кластерами переводит рассматриваемую систему из состояния с нулевой деформации в состояние с постоянным значением деформации (e_0).

Комбинируя (6) и (7), приходим к уравнению:

$$-v\frac{d\delta n}{d\xi} + \frac{\delta n}{\tau} = \frac{V(0)}{\Omega}\left[\frac{\delta p}{\tau'_p} + \left(\frac{p_0\vartheta_d}{\tau'_p} - \frac{n_0|\tau_e|\Omega}{\tau^2 V(0)}\right)\frac{du}{d\xi}\right]. \tag{10}$$

Далее учтем, что второе слагаемое в квадратных скобках в правой части (10) значительно больше первого слагаемого, которым можно пренебречь. Решение получающегося в результате неоднородного дифференциального уравнения с учетом граничного условия (9), имеет вид:

$$\delta n(\xi) = \exp\left(\frac{\xi}{\tau v}\right)\int\limits_{\xi}^{+\infty} d\xi' z_p(\xi')\exp\left(-\frac{\xi'}{\tau v}\right), \tag{11}$$

где

$$z_p(\xi) = \left(\frac{V(0)p_0\vartheta_d}{\tau'_p kT\Omega} - \frac{n_0|\tau_e|}{\tau^2}\right)\frac{du}{d\xi} = z_{p0}\frac{du}{d\xi}.$$

Исключив переменную δn с помощью (11), получаем уравнение, описывающее распространение нелинейной волны смещений в среде с учетом кластерной генерации дефектов:

$$(v^2 - c_s^2)\frac{d^2u}{d\xi^2} - \frac{\beta}{\rho}\frac{d^2u}{d\xi^2}\frac{du}{d\xi} - (g_1v^2 - g_2)\frac{d^4u}{d\xi^4} + \frac{K\Omega_m}{\rho}\frac{d}{d\xi}\int\limits_{\xi}^{+\infty}\exp\left(\frac{\xi - \xi'}{\tau v}\right)z_p(\xi')d\xi' = 0. \tag{12}$$

Уравнения типа (12) характерны для сред с деформационной памятью или с релаксацией. На его основе можно провести анализ распространения стационарной волны деформации с учетом влияния как дисперсионных свойств среды, так и упругих свойств решетки и подсистемы кластеров и МА. Рассмотрим анализ этого уравнения при малых временах релаксации МА ($\tau << \tau_0$). В этом случае интегральный член в (12) можно заменить дифференциальным. Для этого функцию $z_p(\xi - z)$ представим в виде разложения в ряд Тейлора в окрестности ξ. Ограничиваясь в этом разложении главными слагаемыми, имеем:

$$\frac{d}{d\xi}\int\limits_{\xi}^{+\infty} d\xi' z_p(\xi')\exp\left(\frac{\xi-\xi'}{\tau v}\right) \approx z_{p0}\left(\tau\frac{d^2u}{d\xi^2} + \tau^2 v\frac{d^3u}{d\xi^3} + \tau^3 v^2\frac{d^4u}{d\xi^4}\right).$$

После постановки этого выражения в (12), получаем:

$$\left(v^2 - \tilde{c}_{sp}^2\right)\frac{d^2u}{d\xi^2} - \frac{\beta}{\rho}\frac{d^2u}{d\xi^2}\frac{du}{d\xi} + \gamma\frac{d^3u}{d\xi^3} - g\frac{d^4u}{d\xi^4} = 0, \tag{13}$$

где $\tilde{c}_{sp} = c_s(1 - K\Omega_m z_{p0}\tau/\rho c_s^2)^{1/2}$ – перенормированная за счет взаимодействия деформационного поля с кластерами скорость звука в кристалле.

В уравнении (13) появление слагаемого с третьей производной от смещения очевидно связано с деформационно-стимулированной генерацией дефектов с поверхности кластеров и процессами их рекомбинации на нейтральных стоках. Кроме того, конечность скорости рекомбинации дефектов (τ^{-1}) приводит к изменению дисперсионных вкладов в нелинейное уравнение, что может сказаться на характеристиках распространяющихся нелинейных волн деформаций.

Коэффициенты диссипации (γ) и дисперсии (g) связаны с генерационно-рекомбинационными параметрами подсистемы МА следующими формулами:

$$\gamma = \frac{K\Omega_m z_{p0}\tau^2 v}{\rho}, \quad g = g_1 v^2 - g_2 - \tau^3 v^2 z_{p0}\frac{K\Omega_m}{\rho}. \tag{14}$$

Уравнение типа (13) возникает во многих физических задачах: о нелинейных продольных волнах в вязкоупругих стержнях и пластинах [4, 6, 7], о нелинейных гравитационных волнах в неглубокой жидкости [8]. Оно имеет решение в виде периодических (кноидальных) волн или ударных фронтов. Анализ структуры этих решений может быть проведен качественно (следуя работе [8]) или количественно (асимптотическими методами [1, 6]).

Как следует из (14), вклад от кластерной генерации дефектов в дисперсионный параметр важен, если относительный объем междоузельных кластеров превышает критическое значение

$$p_0 > p_* = \frac{\rho\tau_p' kT\Omega g_1}{\tau^3 K\Omega_m V(0)(\vartheta_d - \vartheta_m)}.$$

Критическое значение p_* определяется разностью деформационных потенциалов, начальным объемом кластеров, а также температурой и материальными константами среды. Температурная зависимость $p_*(T)$, а также скорости звука $\tilde{c}_{sp}(T)$ и коэффициента диссипации $\gamma(T)$ задается прежде всего аррениусовской зависимостью времени релаксации $\tau(T)$. При характерных значениях параметров $V(0) = 6 \cdot 10^{-3}$, $N(0) = 10^{14}\, cm^{-3}$, $\vartheta_d = 10\, эВ$, $\Omega = 2 \cdot 10^{-22}\, cm^3$, $R_s = 8 \cdot 10^{-7}\, cm$, $T = 700K$, $\tau'_p = 3 \cdot 10^{-11}\, c$, $Q_0 = 1.4\, эВ$ находим, что критическое значение $p_* = 7 \cdot 10^{-2}$.

Таким образом, получено уравнение, описывающее распространение стационарной волны деформации в среде, с учетом взаимодействия с ТД при кластерном механизме их генерации. Приведены оценки вкладов в диссипативные и дисперсионные свойства решетки, обусловленные генерационно-релаксационными процессами в подсистеме ТД.

ЛИТЕРАТУРА

[1] Мирзоев Ф., Шелепин Л. А. Краткие сообщения по физике ФИАН, N 9, 38 (2001); N 5, 42 (2002).

[2] Vandermeer R. A., Ogle J. C. Acta Metallurgica, **28**, 151 (1980).

[3] Косевич А. М. Основы механики кристаллической решетки. М., Наука, 1972, 280 с.

[4] Дрейден Г. В., Островский Ю. И., Самсонов А. М. ЖТФ, **58**, N 10, 2040 (1988).

[5] Лурье А. И. Нелинейная теория упругости. М., Наука, 1980, 350 с.

[6] Porubov A. V., Velarde M. G. Waves motion, **35**, 189 (2002).

[7] Потапов А. И. Нелинейные волны деформаций в стержнях и пластинах. Горький, 1985, 107 с.

[8] Карпман В. И. Нелинейные волны в диспергирующих средах. М., Наука, 1973, 176 с.

Поступила в редакцию 26 июня 2002 г.