Влияние точечных дефектов на пространственную локализацию нелинейных волн, распространяющихся в материалах

В.И. В.И. Ерофеев,* А.В. Леонтьева,† А.О. Мальханов‡
[1]*Институт Проблем Машиностроения РАН — филиал «Федерального исследовательского центра «Институт прикладной физики РАН»
Россия, 603024, Нижний Новгород, ул. Белинского, д. 85*
(Статья поступила 05.07.2017; Подписана в печать 13.09.2017)

Показано, что самосогласованная математическая модель, включающая в себя уравнения теории упругости и кинетические уравнения для плотностей различных типов точечных дефектов, может быть сведена к нелинейному эволюционному уравнению, объединяющему в себе известные уравнения волновой динамики: Кортевега–де Вриза–Бюргерса и Клейна–Гордона. Найдены и проанализированы точные аналитические решения этого уравнения.

PACS: 43.25.Dc, 61.72.Ji УДК: 534.222.
Ключевые слова: эволюционное уравнение, упругая среда, точечные дефекты, усеченное разложение, стационарная ударная волна.

ВВЕДЕНИЕ

При воздействии на материал лазерного излучения или потока частиц (например, при ионной имплантации) в нем создаются точечные дефекты (вакансии, межузлия) [1]. Прохождение интенсивной продольной акустической волны способствует изменению в областях растяжения и сжатия энергии активации образования точечных дефектов, приводя к их пространственному перераспределению. Дефекты, мигрирующие по материалу, рекомбинируют на различного рода центрах. Роль таких центров могут играть дислокации, примеси внедрения и др.

Волновые эффекты в ансамблях дислокаций изучались в работах [2–5]

В [6] показано, что задачу о распространении акустической волны в материале с точечными дефектами следует рассматривать как самосогласованную, включающую в себя, наряду с динамическим уравнением теории упругости, кинетическое уравнение для плотности дефектов.

В [7] исследовано взаимодействие нелинейной волны деформации с полем концентрации точечных дефектов (вакансий, межузлий), приводящее как к рассеянию волны, так и к изменению энергии активации образования дефектов и их пространственному перераспределению.

При этом предполагалось, что основными процессами, определяющими поведение дефектов, являются процессы генерации, рекомбинации и диффузии. Объемная взаимная рекомбинация разноименных дефектов не учитывалась.

Учтем далее объемную взаимную рекомбинацию разноименных дефектов.

*E-mail: erof.vi@yandex.ru
†E-mail: aleonav@mail.ru
‡E-mail: alexey.malkhanov@gmail.com

1. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Самосогласованная задача, включающая в себя динамическое уравнение теории упругости и кинетическое уравнение для плотности дефектов, примет вид [2]:

$$\frac{\partial^2 U}{\partial t^2} - c_l^2 \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} - \frac{\beta_N}{\rho}\frac{\partial U}{\partial x}\frac{\partial^2 U}{\partial x^2} = = -\left(\lambda + \frac{2}{3}\mu\right)\frac{\Omega_V}{\rho}\frac{\partial n_V}{\partial x} - \left(\lambda + \frac{2}{3}\mu\right)\frac{\Omega_i}{\rho}\frac{\partial n_i}{\partial x}, \quad (1)$$

$$\frac{\partial n_V}{\partial t} = q_0 + q_\varepsilon \frac{\partial U}{\partial x} + D_V \frac{\partial^2 n_V}{\partial x^2} - \beta_V n_V - \beta_{iV} n_i, \quad (2)$$

$$\frac{\partial n_i}{\partial t} = q_0 + q_\varepsilon \frac{\partial U}{\partial x} + D_i \frac{\partial^2 n_i}{\partial x^2} - \beta_i n_i - \beta_{Vi} n_V. \quad (3)$$

Здесь $U(x,t)$ — продольное перемещение частиц материала (волна считается плоской); $n_j(x,t)$ — объемная концентрация точечных дефектов ($j = V$ — для вакансий, $j = i$ — для межузлий); $c_l = \sqrt{(\lambda + 2\mu)/\rho}$ — скорость, с которой распространялась бы продольная волна в материале, если бы в нем отсутствовали дефекты; λ, μ — константы Ламе; ρ — плотность материала; β_N — коэффициент нелинейности, $\beta_N = 3\lambda + 6\mu + 2A + 6B + 2C$; A, B, C — модули Ландау третьего порядка; Ω_j — дилатационный параметр, характеризующий изменение объема материала при образовании в нем одного точечного дефекта. Для вакансий $\Omega_j < 0$, для межузлий $\Omega_j > 0$. Через q_0 обозначен темп генерации точечных дефектов в отсутствие деформации; второе слагаемое в правой части (2) представляет собой деформационную поправку в генерацию дефектов; D_j — коэффициент диффузии дефекта типа j; β_j — скорость рекомбинации на стоках. Через β_{iV} и β_{Vi} обозначены скорости взаимной рекомбинации дефектов типа «межузлие–вакансия» и типа «вакансия–межузлие», соответственно.

Если имеется только статическая деформация $U = U(x)$, то система уравнений (1)–(3) сведется к одному уравнению, описывающему динамику точечных дефектов:

$$\frac{\partial^2 n_V}{\partial t^2} - (\beta_V D_i + \beta_i D_V)\frac{\partial^2 n_V}{\partial x^2} + (\beta_i + \beta_V)\frac{\partial n_V}{\partial t} - (D_i + D_V)\frac{\partial^3 n_V}{\partial x^2 \partial t} + D_i D_V \frac{\partial^4 n_V}{\partial x^4} + \\ + \frac{1}{2}\frac{q_\varepsilon \beta_N D_i}{\rho^3 c_l^6}\left(\lambda + \frac{2}{3}\mu\right)^2 \left(\frac{\Omega_i \beta_V}{\beta_{iV}} - \Omega_V\right)^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2}\left(n_V^2\right) + (\beta_i \beta_V - \beta_{iV}\beta_{Vi})\, n_V - \\ - \frac{1}{2}\frac{q_\varepsilon \beta_N}{\rho^3 c_l^6}\left(\lambda + \frac{2}{3}\mu\right)^2 (\beta_i - \beta_{iV})\left(\frac{\Omega_i \beta_V}{\beta_{iV}} - \Omega_V\right)^2 n_V^2 = (\beta_i - \beta_{iV})\left(q_0 - \frac{2 q_\varepsilon \rho c_l^2}{\beta_N}\right). \quad (4)$$

Уравнение (4) получено с учетом того, что скорости рекомбинации на стоках и скорости взаимной рекомбинации дефектов одного порядка.

2. ЭВОЛЮЦИОННОЕ УРАВНЕНИЕ

Решение уравнения (4) ищем в виде асимптотического разложения по малому параметру: $n_V = n_0 + \tilde{\varepsilon} n_1 + \ldots$ ($\tilde{\varepsilon} << 1$). Введем при этом новые переменные: $\xi = x - ct$, $\eta = \tilde{\varepsilon} x$. Такой выбор переменных объясняется тем, что возмущение, распространяясь со скоростью c вдоль оси x, медленно эволюционирует в пространстве из-за нелинейности, дисперсии и диссипации.

В нулевом приближении по $\tilde{\varepsilon}$ получим выражение для скорости: $c = \sqrt{\beta_V D_i + \beta_i D_V}$. Первое приближение по $\tilde{\varepsilon}$ приводит к эволюционному уравнению относительно n_0:

$$\frac{\partial}{\partial \xi}\left(\frac{\partial n_0}{\partial \eta} + a_1 n_0 \frac{\partial n_0}{\partial \xi} + a_2 \frac{\partial^2 n_0}{\partial \xi^2} + a_3 \frac{\partial^3 n_0}{\partial \xi^3} + a_4 n_0\right) = \\ = a_5 n_0 + a_6 n_0^2 + a_0. \quad (5)$$

Здесь приняты обозначения:

$$a_1 = -\frac{q_\varepsilon \beta_N D_i \left(\lambda + \frac{2}{3}\mu\right)^2 \left(\frac{\Omega_i \beta_V}{\beta_{iV}} - \Omega_V\right)^2}{2\tilde{\varepsilon}\rho^3 c_l^6 (\beta_V D_i + \beta_i D_V)},$$

$$a_2 = -\frac{D_i + D_V}{2\tilde{\varepsilon}\sqrt{\beta_V D_i + \beta_i D_V}},$$

$$a_3 = -\frac{D_i D_V}{2\tilde{\varepsilon}(\beta_V D_i + \beta_i D_V)}, \quad a_4 = \frac{\beta_i + \beta_V}{2\tilde{\varepsilon}\sqrt{\beta_V D_i + \beta_i D_V}},$$

$$a_5 = \frac{\beta_i \beta_V - \beta_{iV}\beta_{Vi}}{2\tilde{\varepsilon}(\beta_V D_i + \beta_i D_V)},$$

$$a_6 = -\frac{q_\varepsilon \beta_N (\beta_i - \beta_{iV})\left(\lambda + \frac{2}{3}\mu\right)^2 \left(\frac{\Omega_i \beta_V}{\beta_{iV}} - \Omega_V\right)^2}{4\tilde{\varepsilon}\rho^3 c_l^6 (\beta_V D_i + \beta_i D_V)},$$

$$a_0 = -\frac{(\beta_i - \beta_{iV})\left(q_0 - \frac{2 q_\varepsilon \rho c_l^2}{\beta_N}\right)}{2\tilde{\varepsilon}(\beta_V D_i + \beta_i D_V)}.$$

Заметим, что в уравнении (5) слагаемые с коэффициентами a_1 и a_6 обусловлены наличием нелинейности; слагаемые с коэффициентами a_2 и a_4 отвечают за диссипативные процессы; слагаемые же с коэффициентами a_3 и a_5 отвечают за дисперсионные процессы.

Если в системе рекомбинация дефектов и диффузионные процессы проявляются одинаково сильно, то в уравнении (5) нельзя пренебрегать слагаемыми, необходимо рассматривать уравнение целиком. Считаем, что вынуждающая сила отсутствует ($a_0 = 0$).

Используя безразмерные переменные $\bar{n}_0 = a_2^3 n_0$, $\bar{\xi} = \xi / a_2$, $\bar{\eta} = \eta / a_2$, уравнение (5) можно записать в виде (черта опущена)

$$\frac{\partial^2 n_0}{\partial \xi \partial \eta} + \gamma_1 \left(\left(\frac{\partial n_0}{\partial \xi}\right)^2 + n_0 \frac{\partial^2 n_0}{\partial \xi^2}\right) + \\ + \frac{\partial^3 n_0}{\partial \xi^3} + \gamma_2 \frac{\partial^4 n_0}{\partial \xi^4} + \gamma_3 \frac{\partial n_0}{\partial \xi} = \\ = \gamma_4 n_0 + \gamma_5 n_0^2, \quad (6)$$

где γ_i — безразмерные комплексы, $\gamma_1 = \frac{a_1}{a_2^3}$, $\gamma_2 = \frac{a_3}{a_2^2}$, $\gamma_3 = a_4 a_2$, $\gamma_4 = a_5 a_2^2$, $\gamma_5 = \frac{a_6}{a_2}$.

3. СТАЦИОНАРНАЯ ВОЛНА

Ищем решение в переменных бегущей волны $n_0(\xi, \eta) = y(z)$, $z = \xi - v\eta$ (z — безразмерная бегущая переменная):

$$-vy'' + \gamma_1 (y')^2 + \gamma_1 y y'' + y''' + \gamma_2 y^{IV} + \gamma_3 y' = \gamma_4 y + \gamma_5 y^2. \quad (7)$$

Частное решение уравнения (7) можно найти, используя усеченные разложения [8]. Уравнение имеет полюс второго порядка, поэтому отыскиваем частное решение в виде

$$y(z) = b_0 Y^2 + b_1 Y + b_2, Y_z = -Y^2 + B_0,$$

где постоянные b_0, b_1, b_2 и B_0 определяются после подстановки в уравнение (7):

$$b_0 = -\frac{12\gamma_2}{\gamma_1}, \quad b_1 = \frac{12}{5\gamma_1},$$

$$b_2 = \frac{20\gamma_2\gamma_5}{\gamma_1^2} + \frac{10\gamma_2\gamma_3}{\gamma_1} + \frac{8}{25\gamma_1\gamma_2} + \frac{\gamma_3}{10\gamma_2\gamma_5} - \frac{\gamma_4}{2\gamma_5},$$

$$B_0 = \frac{5}{4}\gamma_3 + \frac{5}{2}\frac{\gamma_5}{\gamma_1} + \frac{1}{100\gamma_2^2}.$$

В уравнении (7) на безразмерную скорость нелинейной волны накладывается ограничение

$$v = \frac{1}{10}\frac{\gamma_1\gamma_3}{\gamma_2\gamma_5} - \frac{1}{2}\frac{\gamma_1\gamma_4}{\gamma_5} + \frac{1}{5\gamma_2} + \frac{2\gamma_2\gamma_5}{\gamma_1}.$$

Кроме того, имеются еще два уравнения, которые связывают параметры уравнения (6). Из одного уравнения получаем

$$\left[\begin{array}{l} \gamma_1 - 50\gamma_2^2\gamma_5 = 0 \\ \gamma_1\gamma_3 + 2\gamma_5 = 0 \end{array}\right. .$$

Решая совместно со вторым уравнением, получаем дополнительные условия, при которых уравнение (7) является интегрируемым:

$$\left\{\begin{array}{l} \gamma_1 = 50\gamma_2^2\gamma_5 \\ \gamma_3 = \dfrac{3125}{36}\gamma_2^4\gamma_4^2 - \dfrac{6}{125\gamma_2^2} \end{array}\right. \tag{8}$$

или

$$\left\{\begin{array}{l} \gamma_1 = -\dfrac{2\gamma_5}{\gamma_3} \\ \gamma_3 = \pm\dfrac{25}{6}\gamma_2\gamma_4 \end{array}\right. . \tag{9}$$

Два параметра исходного уравнения оказываются зависимыми от оставшихся трех, при условии, что вынуждающая сила отсутствует.

Рассмотрим первый случай. Решение уравнения (7) при условии (8) принимает вид:

$$y(z) = -\frac{6}{25\gamma_2\gamma_5}Y^2(z) + \frac{6}{125\gamma_2^2\gamma_5}Y(z) + \\ + \frac{625}{24}\frac{\gamma_2^3\gamma_4^2}{\gamma_5} - \frac{\gamma_4}{2\gamma_5}. \tag{10}$$

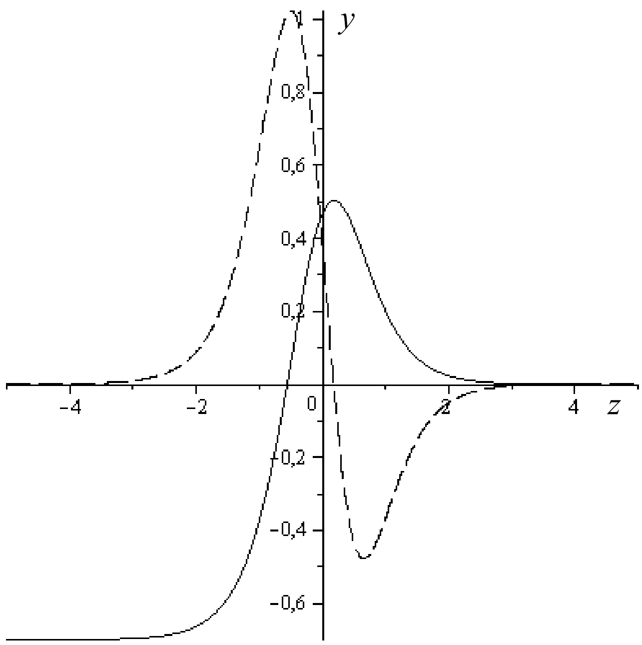

Рис. 1: Зависимости $y(z)$ (сплошная), $y'(z)$ (пунктир)

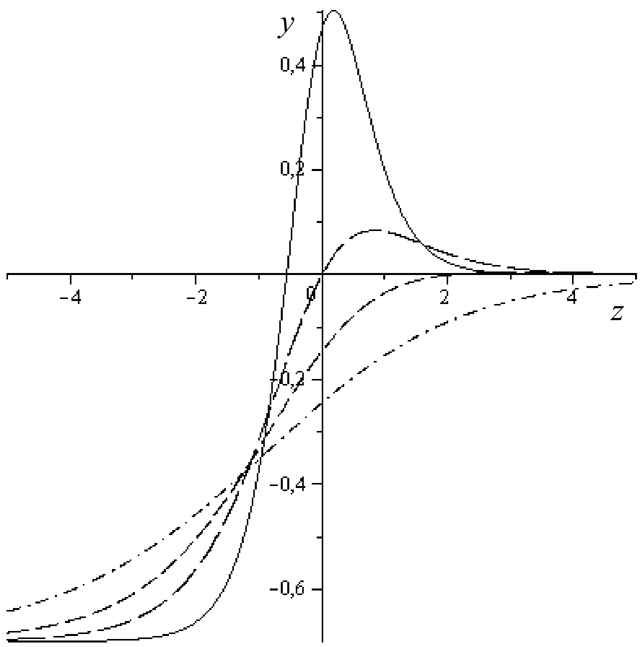

Рис. 2: Зависимости $y(z)$ ($\gamma_2^{(1)} < \gamma_2^{(2)} < \gamma_2^{(3)} < \gamma_2^{(4)}$, $\gamma_2^{(1)}$ — штрихпунктир, $\gamma_2^{(2)}$ — короткий пунктир, $\gamma_2^{(3)}$ — длинный пунктир, $\gamma_2^{(4)}$ — сплошная)

Решение уравнения Рикатти известно. Решение (10) имеет вид немонотонного кинка в области перегиба (рис. 1).

Производная соответственно имеет два солитона разной полярности. Зависимости $y(z)$ при разных значениях параметра γ_2 показаны на рис. 2.

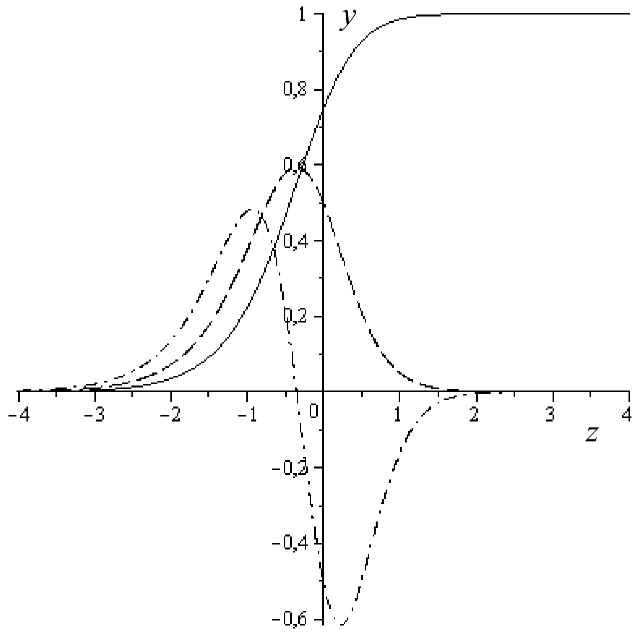

Рис. 3: Зависимости $y\,(z)$ (сплошная), $y'\,(z)$ (пунктир), $y''\,(z)$ (штрихпунктир)

Условие, при котором нарушается монотонность кинка $\left|\gamma_2^3\gamma_4\right| > \dfrac{6}{625}$. Амплитуда и ширина кинка определяются зависимостями $A = \left|\dfrac{\gamma_4}{\gamma_5}\right|$, $\Delta = \dfrac{12}{125\left|\gamma_4\right|\gamma_2^2}$. Скорость кинка с учетом (8) приобретает вид

$$v = \frac{25}{36}\gamma_2^2\gamma_4\left(625\gamma_2^3\gamma_4 - 36\right).$$

Рассмотрим второй случай. Зная решение уравнения Рикатти, решение уравнения (7) при условии (9) принимает вид:

$$y\,(z) = \frac{1}{4}\frac{\gamma_4}{\gamma_5}\left[\left(\operatorname{th}\left(\frac{z}{10\left|\gamma_2\right|}\right) - \operatorname{sign}\left(\gamma_2\right)\right)^2 - 4\right]. \quad (11)$$

Решение (11) представляет собой монотонный несимметричный, относительно точки перегиба, кинк (рис. 3). Для переднего фронта производная убывает быстрее, чем для заднего фронта волны. Амплитуда та же, что и в первом случае. Ширина кинка и его скорость определяются зависимостями $\Delta = 10\left|\gamma_2\right|$ и $v = \dfrac{6}{25\gamma_2} - \dfrac{25}{6}\gamma_4\gamma_2^2$.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

На основе анализа точных аналитических решений эволюционного уравнения для объемной концентрации точечных дефектов в материале показано, что вакансии и межузлия могут способствовать формированию пространственно локализованных нелинейных волн.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проекты № 15-08-01836, № 16-08-00776, № 16-08-00971)

[1] *Мирзоев Ф. Х., Панченко В. Я., Шелепин Л. А.* УФН. 1996. **166**, № 1. С. 3.
[2] *Ерофеев В. И.* Письма в ЖТФ. 2008. **34**, № 4. С. 32.
[3] *Багдоев А. Г., Ерофеев В. И., Шекоян А. В.* Линейные и нелинейные волны в диспергирующих сплошных средах. М.: Физматлит, 2009.
[4] *Ерофеев В. И., Кажаев В. В.* ЖТФ. 2010. **80**, № 4. С. 149.
[5] *Сарафанов Г. Ф.* Коллективные и волновые эффекты в ансамбле дислокаций при пластической деформации металлов. Н. Новгород: Литера, 2010.
[6] *Мирзоев Ф. Х., Шелепин Л. А.* ЖТФ. 2001. **71**, № 8. С. 23.
[7] *Ерофеев В. И., Артамонова О. А.* Влияние точечных дефектов в материале на распространение нелинейной акустической волнрю Труды XXII Сессии Российского акустического общества и Научного совета по акустике РАН. М.: ГЕОС, 2010. **1**. С. 159.
[8] *Кудряшов Н. А.* Аналитическая теория нелинейных дифференциальных уравнений. Москва–Ижевск: Институт компьютерных исследований, 2004.

Influence of point defects on spatial localisation of nonlinear waves propagating in materials

V. I. Erofeyev[a], **A. V. Leonteva**[b], **A. O. Malhanov**[c]

[1]*Mechanical Engineering Research Institute of RAS — Branch of Federal Research Center «Institute of Applied Physics of the RAS»
Nizhny Novgorod, 603024, Russia
E-mail: [a]erof.vi@yandex.ru, [b]aleonav@mail.ru, [c]alexey.malkhanov@gmail.com*

It is shown that the self–consistent mathematical model including the equations of the theory of elasticity and the kinetic equations for density of various types of point defects can be reduced to the nonlinear evolution equation. The equation incorporates the known equations of wave dynamics: the Korteweg–de Vries–Burgers' equation and the Klein–Gordon equation.

PACS: 43.25.Dc, 61.72.Ji
Keywords: evolution equation, elastic medium, point defects, truncated decomposition, stationary shock wave.
Received 05 July 2017.

Сведения об авторах

1. Ерофеев Владимир Иванович — доктор физ.-мат. наук, профессор, директор; e-mail: erof.vi@yandex.ru.
2. Леонтьева Анна Викторовна — канд. техн. наук, ст. науч. сотрудник; e-mail: aleonav@mail.ru.
3. Мальханов Алексей Олегович — канд. физ.-мат. наук, ст. науч. сотрудник; e-mail: alexey.malkhanov@gmail.com.