

Е.М. Веселова

## АНАЛИЗ СВЯЗАННОЙ СИСТЕМЫ УРАВНЕНИЙ ДЛЯ ДЕФОРМАЦИИ СРЕДЫ И КОНЦЕНТРАЦИИ ДЕФЕКТОВ

*В статье приведено решение связанной системы уравнений для деформации среды и концентрации дефектов в стационарном случае. Проведен анализ решения на устойчивость и показано, что в зависимости от превышения контролируемого параметра над пороговым значением образуются периодические структуры точечных дефектов.*

*Ключевые слова: система уравнений, точечные дефекты, концентрация дефектов, деформация среды.*

## ANALYSIS OF A COUPLED SYSTEM OF EQUATIONS FOR CONTINUUM DEFORMATION AND DEFECT CONCENTRATION

*The article presents a solution of coupled system of equations describing continuum deformation and defect concentration within the stationary approach. The stability analysis of obtained solution was performed to indicate the arising of point defect periodical structure, which depends on control parameter value with respect to estimated threshold.*

*Keywords: the system of equations, point defects, defect concentration, medium deformation.*

### Введение

Системы, в которых происходят диффузионные процессы, относятся к динамическим системам, в которых задание начальных условий полностью определяет их поведение в последующие моменты времени [1]. Под устойчивостью динамической системы понимают реакцию на малые возмущения ее состояния. Если сколь угодно малые изменения состояния системы начинают нарастать со временем, то система является неустойчивой. Если малые возмущения затухают со временем, то система устойчива [1]. Формирование новых структур всегда сопровождается потерей устойчивости предшествующих. Линейный анализ устойчивости позволяет предсказать, при каких значениях параметров состояния системы развивается ее неустойчивость [1, 2].

### Математическое описание

Будем рассматривать случай одномерного кристалла, когда тензор деформации среды  $u_{ij}$  имеет единственную  $x$ -компоненту [3]:

$$u_{xx} = \frac{\partial u_x}{\partial x} \equiv \xi(x), \quad (1)$$

где  $u_x$  – компонента вектора смещения среды, а ось  $x$  направлена вдоль одной из осей типа [100] кубического кристалла.

Выражение для плотности свободной энергии одномерного деформированного ангармонического кристалла с дефектами с учетом нелокальности взаимодействия атомов решетки с друг другом и с дефектами имеет вид:

$$F = \frac{1}{2} \rho c_l^2 \xi^2(x) + \rho c_l^2 l_0^2 \frac{\partial^2 \xi(x)}{\partial x^2} + \frac{1}{2} \alpha \rho c_l^2 \xi^3(x) + \frac{1}{2} \beta \rho c_l^2 \xi^4(x) - \theta_d n_d \xi(x) - \theta_d n_d l_d^2 \frac{\partial^2 \xi(x)}{\partial x^2} - TS. \quad (2)$$

Здесь  $\rho$  – плотность среды;  $c_l$  – продольная скорость звука;  $\alpha, \beta$  – константы упругого ангармонизма;  $l_0$  – характеристическая длина взаимодействия атомов кристалла с друг другом;  $l_d$  – характеристическая длина взаимодействия дефектов с атомами кристалла ( $l_d > l_0$ );  $n_d$  – концентрация точечных дефектов;  $\theta_d = \Omega_d K_d$  – потенциал деформации ( $\Omega_d$  – изменение объема кристалла при создании одного дефекта;  $K_d$  – модуль упругости);  $T$  – температура;  $S$  – энтропия системы,  $\alpha < 0, \beta > 0$ .

Из (2) следует выражение для напряжения в кристалле с дефектами

$$\sigma(x) = \frac{\partial F}{\partial \xi},$$

$$\sigma(x) = \rho c_l^2 \xi(x) + \rho c_l^2 l_0^2 \frac{\partial^2 \xi(x)}{\partial x^2} + \frac{3}{2} \alpha \rho c_l^2 \xi^2(x) + \beta \rho c_l^2 \xi^3(x) - \theta_d n_d. \quad (3)$$

Уравнение для вектора смещения имеет вид:

$$\frac{\partial^2 U}{\partial t^2} = c_l^2 \Delta U + (c_l^2 - c_t^2) \text{grad div} U.$$

Из уравнения для вектора смещения среды  $\frac{\partial^2 u_x}{\partial x^2} = \frac{\partial \sigma}{\partial x}$  и (3) имеем уравнение для  $\xi(x)$ :

$$\frac{\partial^2 \xi}{\partial t^2} = c_l^2 \frac{\partial^2 \xi(x)}{\partial x^2} + c_l^2 l_0^2 \frac{\partial^4 \xi(x)}{\partial x^4} + \frac{3}{2} \alpha c_l^2 \frac{\partial^2 (\xi^2(x))}{\partial x^2} + \beta \rho c_l^2 \frac{\partial^2 (\xi^3(x))}{\partial x^2} - \frac{\theta_d}{\rho} \frac{\partial^2 n_d}{\partial x^2}. \quad (4)$$

Используя выражение для энергии взаимодействия точечного дефекта с упругим континуумом, следующее из (2)

$$H_d(x) = -\theta_d \xi(x) - \theta_d l_d^2 \frac{\partial^2 \xi(x)}{\partial x^2},$$

получим выражение для  $x$ -компоненты нелокальной силы, действующей на дефект

$$F(x) = -\frac{\partial H_d(x)}{\partial x} = \theta_d \frac{\partial \xi(x)}{\partial x} + \theta_d l_d^2 \frac{\partial^3 \xi(x)}{\partial x^3}. \quad (5)$$

Порождаемый этой силой поток дефектов равен

$$j_d(x) = \frac{D_d \theta_d}{k_B T} n_d(x) \left[ \frac{\partial \xi(x)}{\partial x} + \theta_d l_d^2 \frac{\partial^3 \xi(x)}{\partial x^3} \right], \quad (6)$$

где  $D_d$  – коэффициент диффузии дефекта;  $k_B$  – константа Больцмана.

С учетом (6) уравнение для концентрации дефектов запишется в виде

$$\frac{\partial n_d}{\partial t} = D_d \frac{\partial^2 n_d}{\partial x^2} - \frac{D_d \theta_d}{k_B T} \frac{\partial}{\partial x} \left[ n_d(x) \frac{\partial \xi(x)}{\partial x} + l_d^2 \frac{\partial^3 \xi(x)}{\partial x^3} \right] + G_d - \frac{n_d}{\tau_d}, \quad (7)$$

где  $G_d$  – скорость генерации точечных дефектов внешним источником;  $\tau_d$  – время жизни дефекта.

Как видно из (4) и (7), плотность энтропии  $S$ , фигурирующая в (2), в рассматриваемом приближении выпадает из уравнений движений.

Введем пространственно усредненные величины

$$\xi_0 = \frac{1}{L} \int \xi(x) dx, \quad n_{d0} = \frac{1}{L} \int n_0(x) dx,$$

где  $L$  – размер кристалла, и представим деформацию и концентрацию дефектов в виде

$$\xi(x) = \xi_0 + \xi_I(x), \quad n_0(x) = n_{d0} + n_{dI}(x), \quad (8)$$

где  $\xi_I$  и  $n_{dI}(x)$  – пространственно неоднородные части деформации и концентрации дефектов. Пространственно однородная деформация и концентрация дефектов связаны соотношением:

$$\xi_0 = \frac{\theta_d}{K_d} n_{d0}.$$

Система уравнений (4) и (7) имеет пространственно однородное стационарное решение  $n_{d0} = G_d \tau_d$ ,  $\xi = \xi_0$ . Это решение оказывается неустойчивым при превышении определенной критической концентрации дефектов, возникает новое, пространственно неоднородное стационарное состояние [4]. В этом состоянии  $\xi$  и  $n_d$  задаются формулой (8). Из (7) и (8) в пренебрежении рекомбинации дефектов ( $\tau_d^{-1} = 0$ ) получаем уравнение для  $n_{dI}$ :

$$\frac{\partial n_{dI}}{\partial t} = D_d \frac{\partial^2 n_{dI}}{\partial x^2} - \frac{D_d \theta_d n_{d0}}{k_B T} \left[ \frac{\partial^2 \xi_I}{\partial x^2} + l_d^2 \frac{\partial^4 \xi_I}{\partial x^4} \right]. \quad (9)$$

Из (4) и (8) имеем уравнение для  $\xi_I$ :

$$\frac{\partial^2 \xi_I}{\partial t^2} = c_l^2 \frac{\partial^2 \xi_I(x)}{\partial x^2} + c_l^2 l_0^2 \frac{\partial^4 \xi_I(x)}{\partial x^4} + \frac{3}{2} \alpha c_l^2 \frac{\partial^2 (\xi_I^2(x))}{\partial x^2} + \beta \rho c_l^2 \frac{\partial^2 (\xi_I^3(x))}{\partial x^2} - \frac{\theta_d}{\rho} \frac{\partial^2 n_{dI}}{\partial x^2}. \quad (10)$$

Из (10) следует, что

$$\text{sign} \xi_I = \text{sign} \theta_d.$$

Покажем, что (9) и (10) описывают процессы самоорганизации дефектов, взаимодействующих через деформацию упругого континуума, приводящие к образованию стационарных периодических дефектно-деформационных структур.

Рассмотрим систему уравнений (9), (10) в стационарном случае, когда

$$\frac{\partial n_{dI}}{\partial t} = 0, \quad \frac{\partial^2 \xi_I}{\partial t^2} = 0.$$

Интегрируя (9), имеем для пространственно неоднородной концентрации дефектов

$$D_d \frac{\partial^2 n_{dI}}{\partial x^2} - \frac{D_d \theta_d n_{d0}}{k_B T} \left[ \frac{\partial^2 \xi_I}{\partial x^2} + l_d^2 \frac{\partial^4 \xi_I}{\partial x^4} \right] = 0,$$

$$D_d \frac{\partial^2 n_{dI}}{\partial x^2} = \frac{D_d \theta_d n_{d0}}{k_B T} \left[ \frac{\partial^2 \xi_I}{\partial x^2} + l_d^2 \frac{\partial^4 \xi_I}{\partial x^4} \right],$$

$$n_{dI} = \frac{\theta_d n_{d0}}{k_B T} \left[ \xi_I + l_d^2 \frac{\partial^2 \xi_I}{\partial x^2} \right], \quad (11)$$

где полагаем две константы интегрирования равными нулю. Подставляя (11) в (10), получаем уравнение для пространственно неоднородной деформации среды:

$$\frac{\partial^2 \xi_I(x)}{\partial x^2} + l_0^2 \frac{\partial^4 \xi_I(x)}{\partial x^4} + \frac{3}{2} \alpha \frac{\partial^2 (\xi_I^2(x))}{\partial x^2} + \beta \frac{\partial^2 (\xi_I^3(x))}{\partial x^2} - \frac{\theta_d n_{d0}}{\rho c_l^2 k_B T} \left( \frac{\partial^2 \xi_I(x)}{\partial x^2} + l_0^2 \frac{\partial^4 \xi_I(x)}{\partial x^4} \right) = 0.$$

Интегрируя его дважды, имеем следующее уравнение

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial \xi_I}{\partial x} + c_1 + l_0^2 \frac{\partial^3 \xi_I}{\partial x^3} + c_2 + \frac{3}{2} \alpha \frac{\partial(\xi_I^2)}{\partial x} + c_3 + \beta \frac{\partial(\xi_I^3)}{\partial x} + c_4 - \frac{n_{d0}}{n_{dc}} \left( \frac{\partial \xi_I}{\partial x} + c_5 + l_0^2 \frac{\partial^3 \xi_I}{\partial x^3} + c_6 \right) = 0, \\
& \xi_I + c_1 x + c_{11} + l_0^2 \frac{\partial^2 \xi_I}{\partial x^2} + c_2 x + c_{22} + \frac{3}{2} \alpha \xi_I^2 + c_3 x + c_{33} + \beta \xi_I^3 + c_4 x + c_{44} - \\
& - \frac{n_{d0}}{n_{dc}} \left( \xi_I + c_5 x + c_{55} + l_0^2 \frac{\partial^2 \xi_I}{\partial x^2} + c_6 x + c_{66} \right) = 0, \\
& \xi_I \left( 1 - \frac{n_{d0}}{n_{dc}} \right) + \frac{\partial^2 \xi_I(x)}{\partial x^2} \left( l_0^2 - \frac{l_d^2 n_{d0}}{n_{dc}} \right) - \frac{3}{2} \frac{\alpha}{\left( \frac{l_d^2 n_{d0}}{n_{dc}} - l_0^2 \right)} \xi_I^2 - \frac{\beta}{\left( \frac{l_d^2 n_{d0}}{n_{dc}} - l_0^2 \right)} \xi_I^3 + \frac{C_1}{\left( \frac{l_d^2 n_{d0}}{n_{dc}} - l_0^2 \right)} + \\
& + \frac{C_{22}}{\left( \frac{l_d^2 n_{d0}}{n_{dc}} - l_0^2 \right)} = 0, \\
& \xi_I \left( 1 - \frac{n_{d0}}{n_{dc}} \right) + \frac{\partial^2 \xi_I}{\partial x^2} \left( l_0^2 - \frac{l_d^2 n_{d0}}{n_{dc}} \right) - \frac{3}{2} \frac{\alpha}{\left( \frac{l_d^2 n_{d0}}{n_{dc}} - l_0^2 \right)} \xi_I^2 - \frac{\beta}{\left( \frac{l_d^2 n_{d0}}{n_{dc}} - l_0^2 \right)} \xi_I^3 + \frac{C_1}{\left( \frac{l_d^2 n_{d0}}{n_{dc}} - l_0^2 \right)} x + \\
& + \frac{C_{11}}{\left( \frac{l_d^2 n_{d0}}{n_{dc}} - l_0^2 \right)} = 0, \\
& \frac{\partial^2 \xi_I}{\partial x^2} - a \xi_I - \frac{3}{2} f \xi_I^2 - g \xi_I^3 + c_1 x + c_{11} = 0, \tag{12}
\end{aligned}$$

где обозначено

$$a = \left( 1 - \frac{n_{d0}}{n_{dc}} \right) / \left( \frac{l_d^2 n_{d0}}{n_{dc}} - l_0^2 \right), \quad f = \frac{\alpha}{\left( \frac{l_d^2 n_{d0}}{n_{dc}} - l_0^2 \right)}, \quad g = \frac{\beta}{\left( \frac{l_d^2 n_{d0}}{n_{dc}} - l_0^2 \right)}, \tag{13}$$

а также введены критическая концентрация дефектов

$$n_{dc} = \frac{\rho c_l^2 k_B T \theta_d}{\theta_d} \tag{14}$$

и коэффициенты

$$c_1 = \frac{C_1}{\left( \frac{l_d^2 n_{d0}}{n_{dc}} - l_0^2 \right)}, \quad c_{11} = \frac{C_{11}}{\left( \frac{l_d^2 n_{d0}}{n_{dc}} - l_0^2 \right)}.$$

Далее рассмотрим решения уравнения (12), соответствующие случаю  $C_1 = 0$ ,  $C_{11} = 0$  (т.е.  $c_1 = 0$ ,  $c_2 = 0$ ), которые удовлетворяют условиям локализованности (кластерное решение)  $\xi_I \rightarrow 0$  при  $x \rightarrow \pm\infty$  и условию трансляционной инвариантности (периодическая структура)  $\xi_I = \xi_I(x+m)$ , где  $m$  – период трансляции.

Тогда из (12) имеем следующее нелинейное уравнение для самосогласованной деформации

$$\frac{\partial^2 \xi_I}{\partial x^2} - a \xi_I - \frac{3}{2} f \xi_I^2 - g \xi_I^3 = 0,$$

где коэффициенты  $a, f, g$  задаются в (12).

Решение уравнения в виде неявной функции выражается через интеграл

$$\begin{aligned}
\frac{\partial^2 \xi_l}{\partial x^2} &= a \xi_l + \frac{3}{2} f \xi_l^2 + g \xi_l^3, \\
\frac{\partial \xi_l}{\partial x} &= \frac{a}{2} \xi_l^2 + \frac{1}{2} f \xi_l^3 + \frac{g}{4} \xi_l^4 + d, \\
\int dx &= 2 \int \frac{d \xi_l}{a \xi_l^2 + f \xi_l^3 + \frac{g}{4} \xi_l^4 + d}, \\
x &= 2 \int \frac{d \xi_l}{a \xi_l^2 + f \xi_l^3 + \frac{g}{4} \xi_l^4 + d}, \tag{15}
\end{aligned}$$

где  $d$  – постоянная интегрирования. При  $d \neq 0$  решение уравнения (15) выражается через эллиптические функции.

Рассмотрим класс решений, соответствующий случаю  $d = 0$ . Из (15) имеем

$$x = 2 \int \frac{d \xi_l}{a \xi_l^2 + f \xi_l^3 + \frac{g}{4} \xi_l^4}. \tag{16}$$

Интеграл (16) выражается через аналитические функции, тип которых определяется знаками коэффициента  $a$  и  $\Delta$ , и через  $\Delta$  обозначено

$$\Delta = \frac{g}{2} - \frac{f^2}{9a}. \tag{17}$$

Используя (13), запишем  $\Delta$  в виде

$$\begin{aligned}
\Delta &= \frac{\beta}{2 \left( \frac{l_d^2 n_{d0}}{n_{dc}} - l_0^2 \right)} + \frac{\alpha^2}{\left( \frac{l_d^2 n_{d0}}{n_{dc}} - l_0^2 \right)^2} \cdot \frac{\left( \frac{l_d^2 n_{d0}}{n_{dc}} - l_0^2 \right)}{9 \left( 1 - \frac{n_{d0}}{n_{dc}} \right)}, \\
\Delta &= \frac{\beta \left[ \left( 1 - \frac{2}{9} \cdot \frac{\alpha^2}{\beta} \right) - \frac{n_{d0}}{n_{dc}} \right]}{2 l_d^2 \left( \frac{n_{d0}}{n_{dc}} - \left( \frac{l_0}{l_d} \right)^2 \right) \left( 1 - \frac{n_{d0}}{n_{dc}} \right)}. \tag{18}
\end{aligned}$$

Используя связь между  $\alpha$  и  $\beta$ , имеем:  $\left( \frac{l_0}{l_d} \right)^2 < 1 - \frac{2}{9} \cdot \frac{\alpha^2}{\beta} < 1$ .

Можно полагать, что в реальных ситуациях имеет место неравенство

$$\left( \frac{l_0}{l_d} \right)^2 < 1 - \frac{2}{9} \cdot \frac{\alpha^2}{\beta} < 1. \tag{19}$$

Предполагая выполнение неравенства, разобьем область изменения  $n_{d0}$  на два интервала, в которых знаки  $a$  и  $\Delta$  различны:

$$\frac{n_{d0}}{n_{dc}} < \left( \frac{l_0}{l_d} \right)^2, \quad \frac{n_{d0}}{n_{dc}} > 1.$$

а) при концентрациях дефектов ниже пороговой, когда

$$\frac{n_{d0}}{n_{dc}} < \left(\frac{l_0}{l_d}\right)^2, (a < 0, \Delta < 0)$$

интеграл (14) не выражается в действительных функциях, так что  $\xi_l = 0, \frac{\partial^2 \xi_l}{\partial x^2} = 0,$

из (11) имеем  $n_{dl} = 0,$  т.е. процессов самоорганизации дефектов не происходит;

б) при превышении порога по концентрации дефектов в области

$$\frac{n_{d0}}{n_{dc}} > 1, (a < 0, \Delta > 0)$$

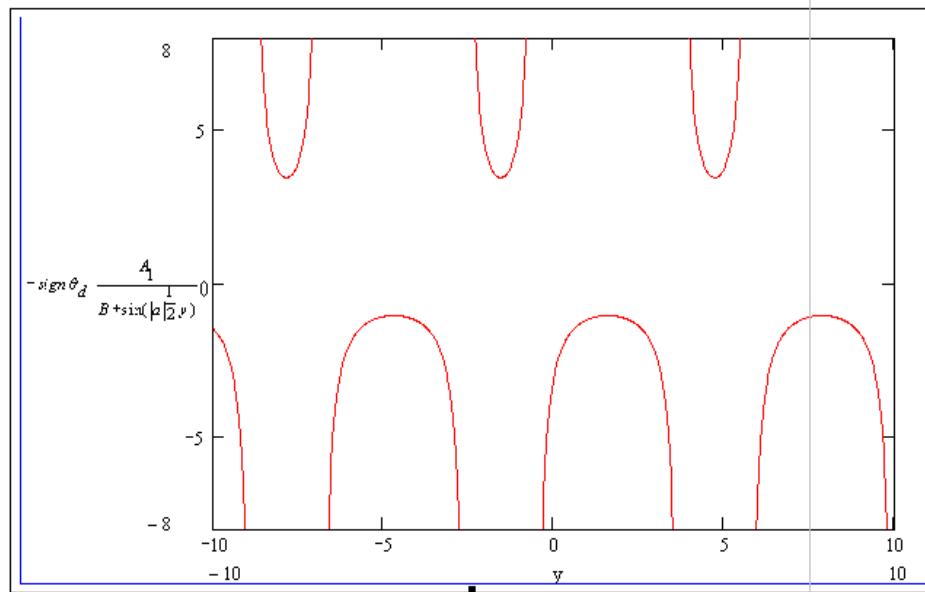
из (16) получаем с использованием ППП Mathcad для самосогласованной деформации следующее выражение:

$$\xi_l = -\text{sign}\theta_d \frac{3\sqrt{2}a}{\sqrt{2}f + \sqrt{9ga - f^2} \sin\left(|a|^{\frac{1}{2}}x\right)}. \quad (20)$$

Полученное выражение запишем в виде  $\xi_l = -\text{sign}\theta_d \frac{A_1}{B + \sin\left(|a|^{\frac{1}{2}}x\right)},$

где  $A_1 = \frac{3\sqrt{2}|a|}{\sqrt{9ga - f^2}}, B = \frac{\sqrt{2}f}{\sqrt{9ga - f^2}}.$

График периодической функции изображен на рисунке.



$$n_0 = 2n_c, \left(\frac{l_0}{l_d}\right)^2 = 0,04, \frac{\alpha^2}{\beta} = 2, \text{sign}\theta_d = 1.$$

Зависимость периодической деформации от пространственной координаты в случае периодической структуры.

Видно, что в области  $\frac{n_{d0}}{n_{dc}} > 1$  решение уравнения (20) описывает периодическую деформаци-

онную структуру. В соответствии с (20), согласованно с ней, образуется периодическая структура

дефектов, причем если  $\theta_d > 0$ , то дефекты локализуются в области  $\xi_l > 0$ , если  $\theta_d < 0$ , то в области  $\xi_l < 0$ .

### Заключение

Проведенный анализ устойчивости решения системы уравнений показывает иерархию процессов мелкомасштабной самоорганизации точечных дефектов, образуемых вследствие воздействия на твердое тело внешним энергетическим пучком. С ростом интенсивности облучения в кристалле усиливается пространственно однородная концентрация дефектов, являющаяся внешним контролируемым параметром. Имеются два пороговых значения контрольного параметра, при достижении которых в системе дефектов, взаимодействующих через поле упругих смещений, отмечаются качественно различные процессы самоорганизации. При малых концентрациях дефектов процессов самоорганизации не происходит и пространственное распределение дефектов остается однородным. При превышении второго порога происходит рост концентрации дефектов, образуется периодическая структура дефектов, описываемая формулой (20) и изображенная на рисунке.

Найдено решение связанной системы уравнений для деформации среды и концентрации дефектов в стационарном случае. Проведен анализ решения и показано, что в зависимости от превышения контролируемого параметра над пороговым значением образуются периодические структуры точечных дефектов.

---

1. Анищенко, В.С. Динамические системы // Соросовский образовательный журнал. № 11. – 1997. – С. 77-84.

2. Николис, Г., Пригожин, И. Самоорганизация в неравновесных системах. – М.: Мир, 1979. – 512 с.

3. Емельянов, В.И., Панин, И.М. Образование нанометровых упорядоченных дефектно-деформационных структур в твердых телах при воздействии на них потоков энергии // Физика твердого тела. – 1997. – Т. 39. – № 11. – С. 2029-2035.

4. Ванина, Е.А., Рокосей, В.А., Веселова, Е.М. Самоорганизация радиационных дефектов в неорганических диэлектриках // Научно-технические ведомости СПбГПУ. – 2009. – №2 (77). – С. 7–11.