

PACS: 05.70.Ce, 05.70.Ln, 62.20.Mk

Л.С. Метлов

## ВОПРОСЫ НЕРАВНОВЕСНОЙ ТЕРМОДИНАМИКИ ДЕФЕКТОВ

Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина НАН Украины  
ул. Р. Люксембург, 72, г. Донецк, 83114, Украина

*Посредством фильтрации общее тепловое движение в задаче о вдавливании индентора в атомарный образец разбито на равновесную и неравновесную подсистемы. Установлено, что последняя состоит из низкочастотных колебательных пакетов и представляет собой акустическую эмиссию, возникающую вследствие динамических явлений в момент генерации дислокаций. Обнаружено, что энергия неравновесной подсистемы пополняется в момент генерации дислокаций и убывает вследствие рассеяния на высокочастотных колебаниях, переходя в равновесную подсистему. Путем осреднения кинетической энергии введен и исследован некоторый аналог температуры отдельно для равновесной и неравновесной подсистем.*

### Введение

Динамика дефектов в твердых телах под интенсивным внешним воздействием является объектом многочисленных исследований (см., напр., обзоры [1–3]). Неравновесная термодинамика, развиваемая в работах [1–3], базируется на представлениях о дефектной структуре как о дополнительных относительно теплового канала уровнях диссипации энергии. Дефекты не только рассеивают энергию, полученную от внешних источников, в процессах рождения и движения дефектов, но и непосредственно запасают ее, образуя систему промежуточных энергетических уровней. Тепловой канал диссипации энергии рассматривается как единый, однако очевидно, что его свойства зависят от характера и типа дефектов, принимающих участие в рассеянии энергии. В общем случае необходимо рассматривать  $N$  типов каналов тепловой диссипации. Отсюда следует, что баланс внутренней энергии, учитывающий как процессы подкачки от внешних источников, так и преобразование энергии на внутренних степенях свободы, необходимо записать в такой форме:

$$du = \sigma_{ij} d\varepsilon_{ij}^e + Tds + \sum_{i=1}^N \tilde{T}_i \delta \tilde{s}_i + \sum_{i=1}^N \varphi_i \delta h_i, \quad (1)$$

где  $u$  – плотность внутренней энергии;  $\sigma_{ij}$ ,  $\varepsilon_{ij}^e$  – соответственно напряжения и упругие деформации;  $T$ ,  $s$  – температура и энтропия равновесной подсистемы;  $\tilde{T}_i$ ,  $\tilde{s}_i$  – температура и энтропия  $i$ -й неравновесной подсистемы;  $\varphi_i$ ,  $h_i$  – соответственно энергия и плотность дефектов  $i$ -типа;  $N$  – число типов дефектов твердого тела.

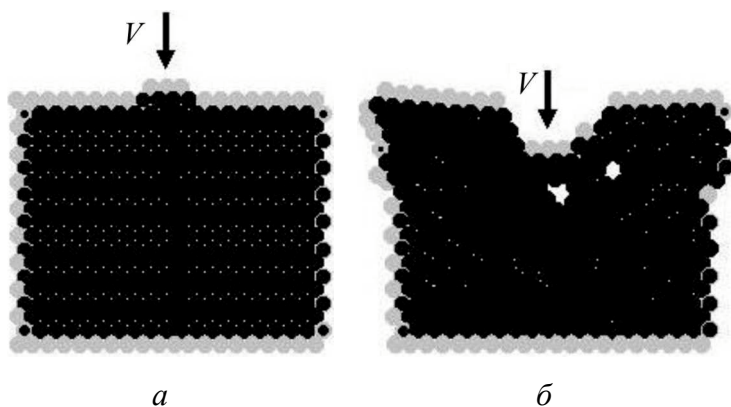
Два первых слагаемых в (1) описывают равновесную подсистему, остальные – неравновесную. Производство энтропии неравновесной подсистемы и дефектов можно записать в форме кинетических уравнений:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \tilde{s}_i}{\partial t} &= \eta_{\tilde{s}_i} \left( \frac{\partial u}{\partial \tilde{s}_i} - \tilde{T}_i \right), \\ \frac{\partial h_i}{\partial t} &= \eta_{h_i} \left( \frac{\partial u}{\partial h_i} - \varphi_i \right), \end{aligned} \quad (2)$$

где  $\eta_{\tilde{s}_i}$ ,  $\eta_{h_i}$  – соответствующие кинетические коэффициенты. Здесь формально не записаны перекрестные слагаемые, однако ясно, что соответствующей процедурой диагонализации произвольную систему эволюционных уравнений можно всегда привести к виду (2).

### 1. Изучение связи динамики дислокаций с тепловым движением

Рассмотрим взаимосвязь динамики дислокаций с тепловым движением на примере задачи о вдавливании индентора в атомарный 3D-образец. Постановку задачи в рамках метода молекулярной динамики можно найти в работах [4–6]. Общая схема компьютерного эксперимента такова: атомарный образец располагается на неподвижной платформе из атомов того же сорта (нижний ряд атомов на рис. 1), а индентор из трех атомов (в сечении) движется с постоянной скоростью 5 m/s в нижнем направлении, сжимая образец. Перпендикулярно плоскости изображения рисунка система содержит 10 плоскостей атомов максимальной упаковки, уложенных в ГПУ (двухслойную) структуру. Боковые грани свободны. На рис. 1,б приведен фрагмент, соответствующий той стадии деформирования образца, когда в нем появилась дислокация.



**Рис. 1.** Геометрия компьютерного 3D-эксперимента: *а, б* – положения атомов соответственно в начальный момент времени и на 2900-м временном шаге (временной шаг равен 10.6 fs)

На рис. 2 представлены графики во времени полной внутренней (кривая 1) и потенциальной (кривая 2) энергии. Изломы на графике соответствуют моменту зарождения в системе дислокаций. На этом же рисунке приведена временная развертка скорости движения одной из произвольно выбранных частиц системы, фактически – запись теплового движения, в котором участвует эта частица (кривая 3). С формальной точки зрения эта запись представляет собой случайный высокочастотный сигнал, частота которого обусловлена собственными колебаниями отдельных межатомных связей. На рис. 2 приведена запись этого же сигнала, усредненного по скользящему среднему с интервалом 100 временных шагов (кривая 4, в увеличенном масштабе – кривая 5). Такое усреднение фактически эквивалентно низкочастотной фильтрации.

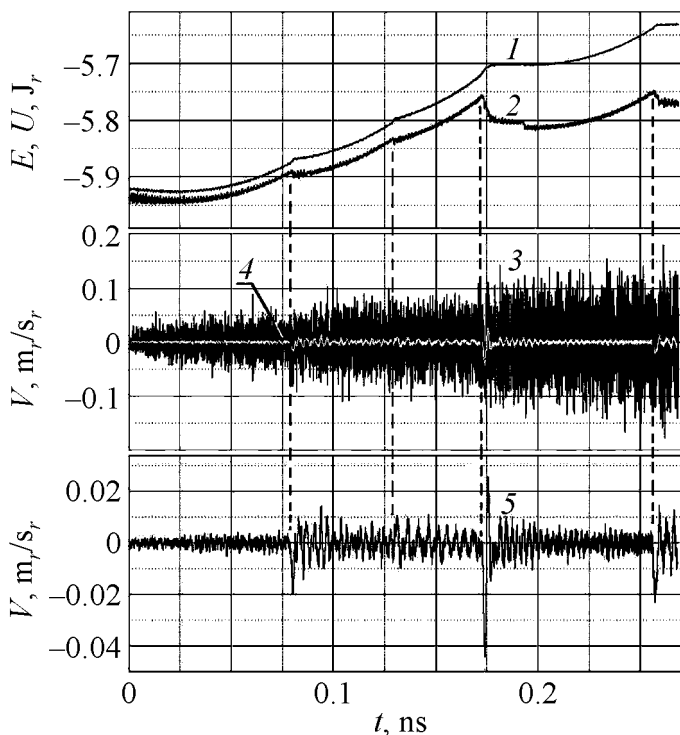


Рис. 2. Временная развертка: 1 – полной энергии; 2 – потенциальной энергии; 3 – скорости произвольной частицы; 4, 5 – отфильтрованные записи скорости частицы

На кривых 4, 5 видны затухающие со временем низкочастотные колебания. Сравнивая кривые 1–5, можем заключить, что начало возбуждения низкочастотных колебаний приурочено к моменту генерации в системе дислокаций. Эти колебания, с одной стороны, представляют собой акустическую эмиссию, обусловленную динамическими эффектами при рождении и движении дислокаций, с другой – являются неравновесным потоком фононов определенной частоты, амплитуда которых значительно превосходит амплитуду этого частотного диапазона для равновесного распределения.

## 2. Равновесная и неравновесная подсистемы

Общую картину динамики твердого тела под интенсивным внешним воздействием можно представить следующим образом. В процессе внедрения

индентора за счет выполняемой им работы происходит увеличение потенциальной и внутренней энергии (возрастающая часть кривых 1 и 2 на рис. 2). Далее в момент рождения дислокации при  $t = 0.075$  ns потенциальная энергия уменьшается скачком (кривая 2). Часть этой энергии идет на обеспечение избыточной энергии дислокации (энергия дефекта). Вторая часть должна перейти в энергию теплового движения, в которую, однако, она переходит не сразу, а сначала излучается в форме низкочастотных колебаний и волн (кривые 4, 5).

Эти колебания и волны можно считать неравновесной частью теплового движения, так как их амплитуда значительно превосходит амплитуду соответствующего частотного диапазона равновесного распределения. Распространяясь как обычные акустические волны (акустическая эмиссия), они рассеиваются на высокочастотных фонах, в результате чего их амплитуда будет затухать. Это затухание и есть процесс релаксации неравновесного состояния. В результате затухания энергия низкочастотных волн переходит в энергию равновесного теплового движения, что приводит к росту равновесной температуры и энтропии. Если бы дислокации больше не возникали, то энергия акустической эмиссии полностью перешла бы в энергию равновесного теплового движения.

В то же время генерация дислокаций в процессе внедрения индентора не прекращается (см. моменты времени  $t = 0.125, 0.175$  и  $0.26$  ns на рис. 2), и в общем поле теплового движения всегда присутствует некоторая доля низкочастотных неравновесных фононов. С одной стороны, они генерируются в результате необратимых процессов рождения и движения дислокаций (в общем случае, дефектов), а с другой – постоянно уходят в равновесную подсистему. Поскольку низкочастотная составляющая волнового движения отличается от поля фононов только пространственным и временным масштабам, для ее описания можно применить те же понятия, что и для фононов. Тепловое поле фононов характеризуется температурой и энтропией. Причем температура понимается как средняя энергия теплового движения, приходящаяся на одну степень свободы, или средняя энергия колебательного движения одной частицы. Ее можно получить путем усреднения квадрата скорости произвольной частицы (кривая 3 на рис. 2), по временному интервалу содержащего большое количество высокочастотных колебаний. Точно так же можно поступить и с квадратом низкочастотной компоненты скорости движения частицы (кривые 4 и 5) с тем, однако, отличием, что интервал осреднения должен быть большим и содержать большое количество низкочастотных колебаний.

С обоснованием понятия энтропии для равновесной и неравновесной подсистем несколько сложнее, поскольку физический смысл энтропии остается не ясным до настоящего времени. В то время как температуру неравновесной подсистемы можно вычислить по результатам компьютерного эксперимента посредством процедуры осреднения, для нахождения энтропии неравновес-

ной подсистемы нет четких физических предпосылок. Поэтому определим ее величину феноменологически как некоторую переменную, термодинамически сопряженную с температурой неравновесной подсистемы. В этом случае эволюционное уравнение для энтропии неравновесной подсистемы (2) описывает баланс ее производства и уничтожения. Производство осуществляется в результате необратимых процессов рождения и движения дефектов, а уничтожение – за счет ее перехода в равновесную форму. Благодаря этому энтропия неравновесной подсистемы не может накопиться до больших значений. Поэтому в разложении внутренней энергии по такой «неравновесной энтропии» можно ограничиться квадратичным приближением:

$$u = u_0 + \tilde{T}_1 \tilde{s} - \frac{1}{2} \tilde{T}_2 \tilde{s}^2 + \dots \quad (3)$$

Здесь нижний индекс опущен. Первое уравнение в системе (2) в этом приближении можно записать в явном виде:

$$\tau_{\tilde{s}} \frac{\partial \tilde{s}}{\partial t} = \tilde{T}_1 - \tilde{T} - \tilde{T}_2 \tilde{s}. \quad (4)$$

Здесь  $\tilde{T}_1$  – постоянные источники энтропии неравновесной подсистемы, приводящие к росту внутренней энергии;  $\tilde{T}$  – постоянные стоки неравновесной энтропии. Величина  $\tilde{T}$  наряду со стационарными значениями других переменных является интегральной характеристикой всей системы и на данном уровне понимания проблемы должна определяться экспериментально. Последнее слагаемое в (4) – релаксационный член, который описывает переход энтропии из неравновесной в равновесную подсистему.

### Заключение

Производство дефектов и энтропии представляют собой взаимосвязанные процессы. При наличии только одного типа дефекта диссипация энергии осуществляется по двум каналам – частично идет на формирование дефектов, частично – переходит в тепло. Однако в тепло энергия переходит не сразу, а вначале излучается в виде низкочастотных колебаний, которые формируют неравновесную подсистему. С привлечением методов обработки сигналов эту подсистему удастся выделить из общего теплового движения. Энергия неравновесной подсистемы пополняется в момент генерации дислокаций и убывает вследствие рассеяния на высокочастотных колебаниях, переходя в равновесную подсистему.

Путем осреднения кинетической энергии отдельно для равновесной и неравновесной подсистем вводится и исследуется некоторый аналог температуры. Энтропии равновесной и неравновесной подсистем определяются как термодинамически сопряженные к соответствующим температурам. Это позволяет для описания производства энтропии неравновесной подсистемы применить кинетическое уравнение (2).

1. Л.С. Метлов, Изв. РАН. Сер. физ. **72**, 1353 (2008).
2. L.S. Metlov, Bulletin of RAS. Physics **72**, 1283 (2008).
3. Л.С. Метлов, Вісник Донецького університету, Сер. А: Природничі науки вип. 1, 250 (2008).
4. Л.С. Метлов, ФТВД **7**, № 3, 89 (1997).
5. L.S. Metlov, cond-mat/0210486.
6. L.S. Metlov, cond-mat/0305129.
7. А.М. Глезер, Изв. РАН. Сер. физ. **71**, 1767 (2007).

*Л.С. Метлов*

### ПИТАННЯ НЕРІВНОВАЖНОЇ ТЕРМОДИНАМІКИ ДЕФЕКТІВ

За допомогою фільтрації загальний тепловий рух в задачі про втиснення індентора в атомарний зразок розбито на рівноважну та нерівноважну підсистеми. Встановлено, що остання складається з низькочастотних коливальних пакетів і являє собою акустичну емісію, яка виникає внаслідок динамічних явищ в момент генерації дислокацій. Знайдено, що енергія нерівноважної підсистеми поповнюється в момент генерації дислокацій і знижується внаслідок розсіяння високочастотних коливальних пакетів, переходячи в рівноважну підсистему. Шляхом осереднення кінетичної енергії введено і досліджено деякий аналог температури окремо для рівноважної та нерівноважної підсистем.

*L.S. Metlov*

### PROBLEMS OF EVOLUTION NONEQUILIBRIUM THERMODYNAMICS FOR DEFECTS

In the problem on indenter forcing into a monatomic specimen, the total thermal motion has been subdivided by filtering into equilibrium and nonequilibrium subsystems. It has been determined that the nonequilibrium subsystem consists of low-frequency oscillatory packets and represents an acoustic emission resulting from dynamic phenomena at the moment of dislocation generation. It has been shown that the nonequilibrium-subsystem energy is replenished at the moment of dislocation generation and diminishes through scattering at high-frequency oscillations going then over into the equilibrium subsystem. By averaging the kinetic energy, a temperature analogue has been introduced and examined for equilibrium and nonequilibrium subsystems separately.

**Fig. 1.** Geometry of computer experiment: *a*, *b* – positions of atoms at zero time and at 2900-th time step (a time step makes 10.6 fs)

**Fig. 2.** Time-base: 1 – total energy; 2 – potential energy; 3 – velocity of a particle; 4, 5 – filtered records of particle velocity