

PACS: 75.25.-j, 75.40.Cx, 75.10.Lp, 81.40.Vw, 05.70.Ce

Ю.Д. Заворотнев¹, А.Ю. Захаров², Л.С. Метлов^{1,3}, М.А. Захаров²

ВЛИЯНИЕ ДИСЛОКАЦИЙ НА СТРУКТУРНЫЙ ПАРАМЕТР ПОРЯДКА В КРИСТАЛЛЕ ПРИ ИНТЕНСИВНОЙ ПЛАСТИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ КРУЧЕНИЕМ

¹Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина

²Новгородский государственный университет им. Ярослава Мудрого, Новгород Великий

³Донецкий национальный университет

Статья поступила в редакцию 17 ноября 2016 года

В рамках феноменологической теории Ландау рассмотрено взаимное влияние структурных и дефектных параметров порядка (ПП) при наложении интенсивной пластической деформации кручением. Показано, что, варьируя температуру, величину крутящего момента и взаимодействие между этими ПП, можно получить различные распределения модулей структурного ПП и плотности дефектов.

Ключевые слова: структурный фазовый переход, параметр порядка, спиральная структура, интенсивная пластическая деформация кручением, неравновесная эволюционная термодинамика, кинетика, дислокации

У межах феноменологічної теорії Ландау розглянуто взаємний вплив структурних і дефектних параметрів порядку (ПП) при накладанні інтенсивної пластичної деформації крутінням. Показано, що, змінюючи температуру, величину крутячого моменту і взаємодію між цими ПП, можна здобути різні розподіли модулів структурного ПП і щільності дефектів.

Ключові слова: структурний фазовий перехід, параметр порядку, спіральна структура, інтенсивна пластична деформація крутінням, нерівноважна еволюційна термодинаміка, кінетика, дислокації

Введение

В твердых телах имеет место множество фазовых переходов (ФП) различной природы. Наиболее распространенными являются структурные ФП, при которых изменяется, в частности, симметрия кристалла [1,2]. В рамках феноменологической теории Ландау такие ФП описываются с помощью ПП. Последние в случае структурного ФП представляют собой линейные комбинации смещений ионов в элементарной ячейке и преобразуются по некоторому неприводимому представлению группы симметрии кристалла. Структурные ФП в силу существования различных взаимодействий всегда сопро-

вождаются изменениями в других кристаллических подсистемах, в частности магнитной. При рассмотрении таких ситуаций часто затруднительно определить, изменения какой подсистемы являются первичными, а какой – вторичными. На этот вопрос легко ответить, если изменения одной из подсистем вызваны внешним воздействием.

Подобная задача решалась в работах [3–6], где исследовалось взаимодействие структурной и магнитной подсистем при наложении интенсивной пластической деформации кручением. Предполагалось, что все изученные процессы осуществляются в идеальных кристаллах. Однако структурные ФП могут быть осложнены наличием структурных дефектов, например дислокаций. Последние характеризуются плотностью структурных дефектов, играющей роль соответствующего ПП, который в силу определения преобразуется по полносимметричному представлению группы симметрии кристалла. Кинетику дефектной подсистемы можно описать в рамках неравновесной эволюционной термодинамики, развитой одним из авторов [7,8], а взаимодействие структурного ПП с дефектной подсистемой – перекрестными слагаемыми в термодинамическом потенциале.

Представляют интерес влияние структурных дефектов на распределение модуля структурного ПП и обратное влияние кристаллографического ПП на распределение и организацию структурных дефектов. Ниже будет показано, что за счет подобного влияния возможно образование периодического расположения структурных дефектов в пространстве – так называемой сверхрешетки.

Теоретическая модель

Пусть в модельном кристалле с дефектами при понижении температуры имеют место структурные ФП первого или второго рода. Рассмотрим поведение соответствующего ПП вблизи и вдали от этих ФП при наложении винтового крутящего момента вдоль оси OZ . Необходимо отметить, что при таком воздействии не происходит какой-либо ФП, но возникает пространственная периодическая спиральная структура. В силу наличия взаимодействия между структурным ПП и дефектами наложение интенсивной пластической деформации кручением должно оказать воздействие и на плотность дислокаций.

Постановка задачи сводится к изучению взаимодействия между дефектным и структурным ПП. Дефектным ПП является плотность дислокаций, структурным – линейная комбинация отклонений ионов элементарной ячейки (векторная величина). Последний ПП преобразуется по соответствующему неприводимому представлению группы симметрии кристалла. Дефектный ПП – по определению величина скалярная (инвариант относительно любой операции симметрии), поэтому в разложении неравновесного термодинамического потенциала в ряд по данному ПП необходимо оставлять не только четные, но и нечетные слагаемые. Кроме того, необходимо учесть,

что относительно плотности дефектов устойчивые состояния соответствуют максимуму термодинамического потенциала [7,8].

Предположим, что симметрия кристалла разрешает существование инвариантов Лифшица. Тогда в рамках феноменологической теории Ландау плотность термодинамического потенциала запишем в виде

$$\Phi = \frac{\beta_1}{2} q^2 + \frac{\beta_2}{4} q^4 + \frac{\beta_3}{6} q^6 - \gamma_1 M^r \left(q_x \frac{\partial q_y}{\partial z} - q_y \frac{\partial q_x}{\partial z} \right) + \gamma_2 M^s \left[\left(\frac{\partial q_x}{\partial z} \right)^2 + \left(\frac{\partial q_y}{\partial z} \right)^2 \right] + \gamma_3 q^2 h^2 + \varphi_1 h + \frac{\varphi_2}{2} h^2 + \frac{\varphi_3}{3} h^3 + \frac{\varphi_4}{4} h^4, \quad (1)$$

где β_i, γ_i ($i = 1, 2, 3$) – феноменологические коэффициенты; h, q – дефектный и структурный ПП соответственно; M – модуль крутящего момента; r, s – показатели степеней, $r = 6, s = 2$ [3].

В нашей модели описание магнитной спиральной структуры [9] распространено на случай кристаллической структуры, возникающей при интенсивной пластической деформации кручением. Слагаемые с пространственными производными описывают винтовую деформацию (несоизмеримая длиннопериодическая спиральная структура) и содержат пропорциональный моменту множитель, т.е. при $M = 0$ отсутствует пространственная спиральная структура.

В потенциале (1) следует учесть также упругое взаимодействие. Переменные, описывающие это взаимодействие, можно исключить, определяя с помощью уравнений состояний их равновесные значения в зависимости от величины структурного ПП [4]. После подстановки в потенциал (1) найденных выражений получаем новый неравновесный термодинамический потенциал. Он формально совпадает с термодинамическим потенциалом без учета упругого взаимодействия, при этом новые константы зависят от температуры и давления. В дальнейшем будем предполагать, что процедура исключения проведена. При отказе от предположения постоянства модулей неприводимых векторов получаем следующую систему уравнений Эйлера:

$$\begin{cases} 2\gamma_3 M^s \frac{\partial^2 q_x}{\partial z^2} + \gamma_2 M^r \frac{\partial q_y}{\partial z} - q_x (\beta_1 + \beta_2 q^2 + \beta_3 q^4 + 2\gamma_4 h^2) = 0, \\ 2\gamma_3 M^s \frac{\partial^2 q_y}{\partial z^2} - \gamma_2 M^r \frac{\partial q_x}{\partial z} - q_y (\beta_1 + \beta_2 q^2 + \beta_3 q^4 + 2\gamma_4 h^2) = 0, \\ \varphi_1 + \varphi_2 h + \varphi_3 h^2 + \varphi_4 h^3 + 2\gamma_4 q^2 h = 0. \end{cases} \quad (2)$$

Систему (2) решить аналитически затруднительно. Поэтому с помощью математического пакета MathCad 15 выполняем численный анализ. Кроме

того, также проводим фурье-анализ полученных решений, который позволяет выявить наличие кратных и некратных гармоник.

Численный анализ и обсуждение результатов

Будем полагать, что а) для констант, характеризующих дефектную часть системы, типично распределение знаков: $\varphi_1 > 0$, $\varphi_2 < 0$, $\varphi_3 > 0$, $\varphi_4 < 0$; б) для констант, характеризующих структурную часть системы, $-\beta_1 < 0$, $\beta_2 \geq 0$, $\beta_3 > 0$, $\gamma_2 < 0$, $\gamma_3 < 0$, $\gamma_4 < 0$.

В зависимости от знака β_2 структурный ФП будет второго рода ($\beta_2 > 0$) или первого рода ($\beta_2 < 0$). Рассмотрим последовательно оба случая.

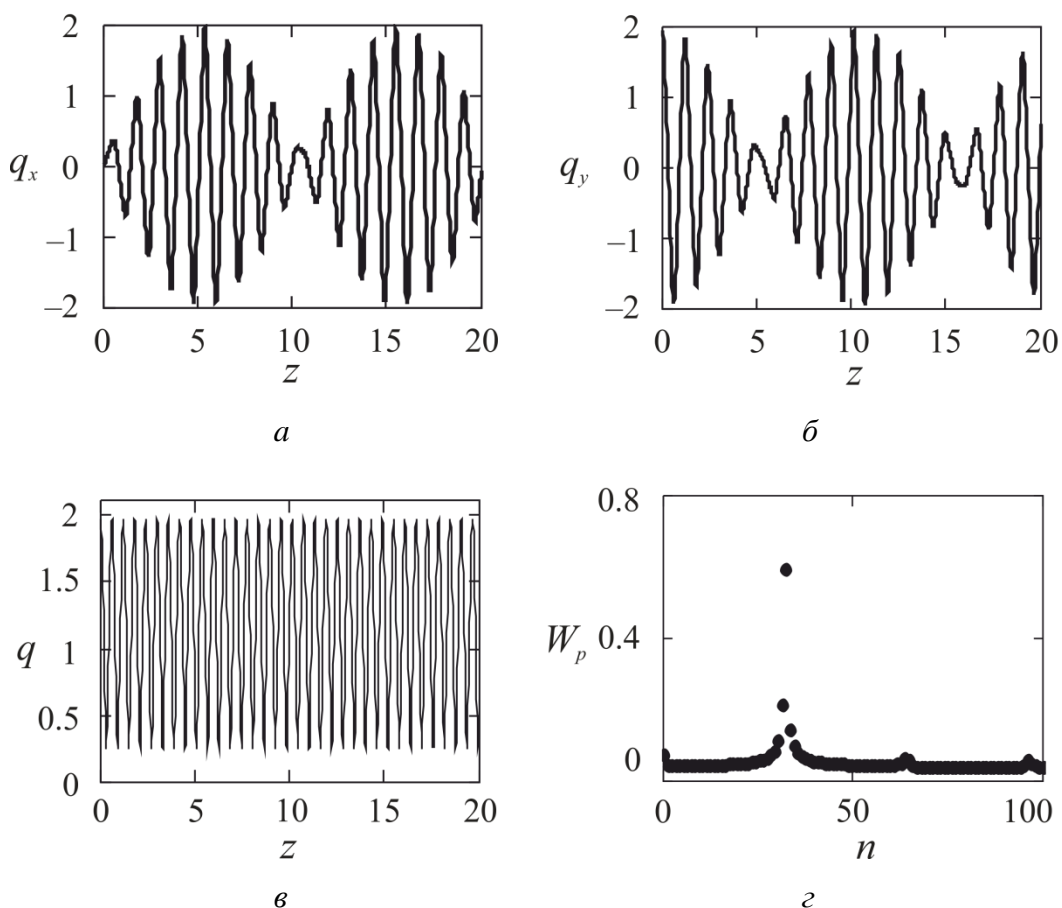


Рис. 1. Пространственные зависимости компонент структурного ПП и его модуля при ФП второго рода в идеальном кристалле: а – $q_x(z)$, б – $q_y(z)$, в – $q(z)$, г – анализ Фурье зависимости $q(z)$, амплитуда первой гармоники уменьшена в 50 раз. Здесь и далее все величины даны в относительных единицах

1. $\beta > 0$. Как следует из третьего (алгебраического) уравнения системы (2), характер изменения величины плотности дислокаций зависит от поведения амплитуды модуля структурного ПП. Поэтому качественное поведение обеих величин одинаково, и иллюстрации в дальнейшем будут приведены

только для зависимости $q(z)$. При данных значениях коэффициентов термодинамического потенциала и при отсутствии дислокаций график зависимости $q(z)$ практически синусоидальный (рис. 1,в), причем имеет место слабая двусторонняя синфазная пространственная амплитудная модуляция.

Анализ Фурье (рис. 1,з) показывает, что существенными являются гармоники, расположенные в 35, 70 и 100-й окрестностях. Поведение составляющих $q_x(z)$ и $q_y(z)$ (рис. 1,а,б) существенно отличается от поведения модуля ПП (рис. 1,в) и представляет собой колебания с большой симметричной противофазной амплитудной модуляцией. При малых значениях крутящего момента появляется колебательный процесс $h(z)$, и уменьшается число колебаний $q_x(z)$ и $q_y(z)$ на протяжении периода амплитудной модуляции. С ростом $|\gamma_4|$ неравномерность колебаний модуля ПП и $h(z)$ уменьшается, что приводит к снижению амплитуд гармоник соответствующих разложений Фурье. Дальнейшее увеличение $|\gamma_4|$ вызывает появление двух сдвинутых по фазе амплитудных модуляций величин $q_x(z)$ и $q_y(z)$ (рис. 2). Эти изменения слабо

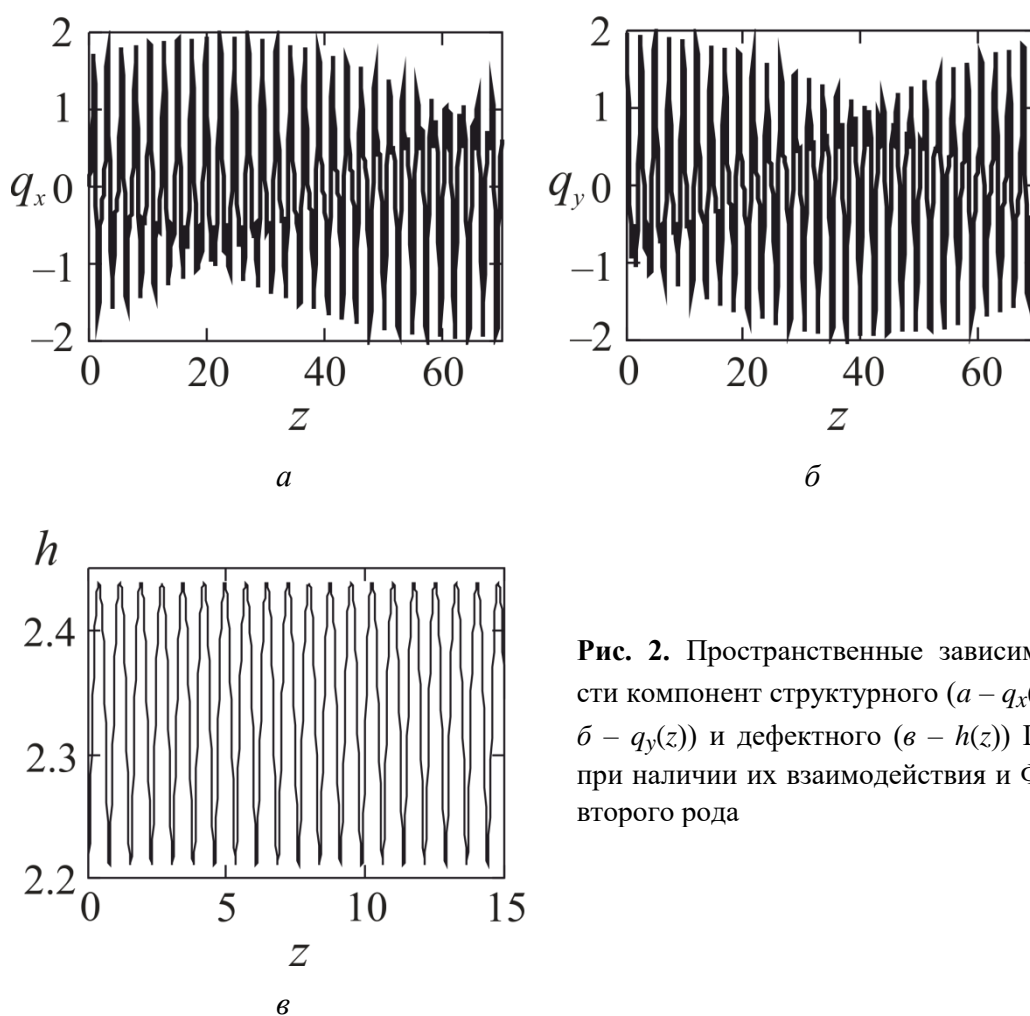


Рис. 2. Пространственные зависимости компонент структурного (а – $q_x(z)$, б – $q_y(z)$) и дефектного (в – $h(z)$) ПП при наличии их взаимодействия и ФП второго рода

вливают на поведение модуля структурного ПП, однако растут постоянная

составляющая h и размах ее колебаний. Анализ Фурье показывает, что самой большой амплитудой обладает 24-я гармоника.

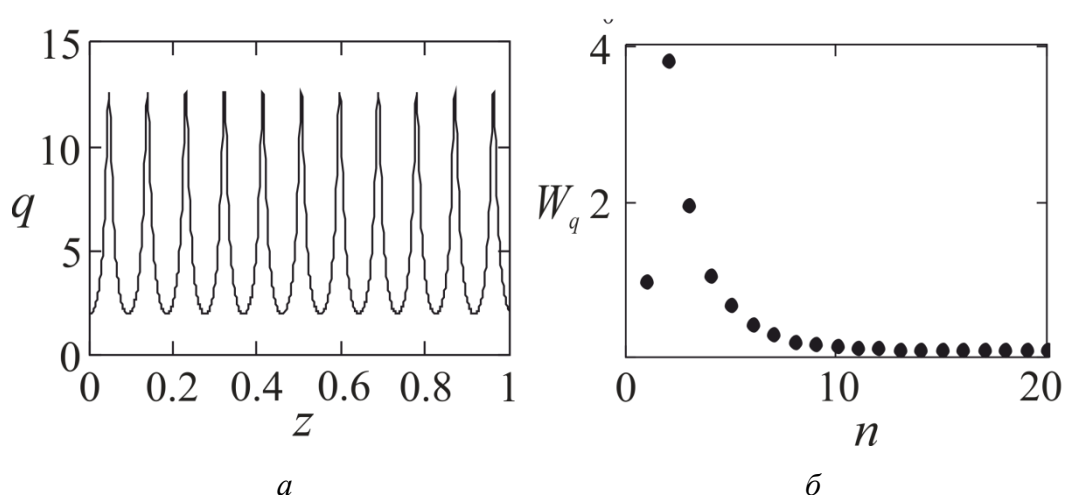


Рис. 3. Пространственная зависимость структурного ПП при наличии дефектов и их слабом взаимодействии (*а*) и анализ Фурье модуля структурного ПП (*б*); амплитуда первой гармоники уменьшена в 10 раз

2. $\beta_2 < 0$. При отсутствии взаимодействия между дислокациями и структурным ПП колебательный процесс его модуля имеет периодический характер с острой вершиной (рис. 3,*а*). График амплитуд анализа Фурье представлен на рис. 3,*б*. Максимумы плотности дефектов приходятся на минимумы колебаний структурного ПП. С ростом величины $|\gamma_4|$ кривая изменений дефектного ПП опускается вниз, и при некоторой величине $|\gamma_4|$ значения минимумов колебаний дефектного ПП становятся равными нулю (рис. 4). Это означает, что дислокации группируются в окрестностях минимумов колебаний структурного ПП. Такие группы образуют периодическую одномерную решетку дислокаций. С увеличением момента M период такой решетки растет, и области концентрации и отсутствия дислокаций увеличиваются в размерах.

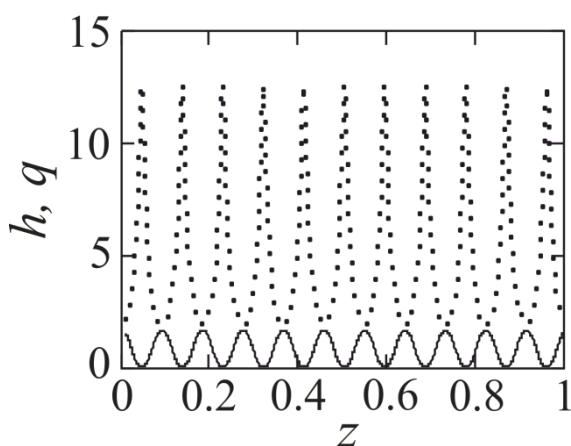


Рис. 4. Поведение структурного (пунктирная линия) и дефектного (сплошная линия) ПП при ФП первого рода и больших значениях модуля их взаимодействия

Заключение

Сочетание двух подходов – классической теории структурных ФП и неравновесной эволюционной термодинамики – позволило учесть взаимное влияние дефектной и магнитной подсистем. Показано, что имеют место различия распределений величин модулей структурного и дефектного ПП в зависимости от рода ФП.

Установлено, что:

- 1) при наложении крутящего момента и давления возникают осцилляции структурного ПП и величины плотности дефектов;
- 2) имеют место одно- или двусторонние пространственные модуляции обоих ПП;
- 3) можно подобрать такие параметры неприводимого термодинамического потенциала, при которых соответствующее ему решение допускает образование одномерной решетки плотности дислокаций.

1. Ю.М. Гуфан, Структурные фазовые переходы, Наука, Москва (1982).
2. Ю.А. Изюмов, В.Н. Сыромятников, Фазовые переходы и симметрия кристаллов, Наука, Москва (2007).
3. Yu.D. Zavorotnev, E.H. Pashinskaya, V.N. Varyukhin, O.Yu. Popova, J. Magn. Magn. Mater. **349**, 244 (2014).
4. Ю.Д. Заворотнев, Е.Г. Пашинская, В.Н. Варюхин, Изв. РАН. Сер. физ. **78**, 1011 (2014).
5. Ю.Д. Заворотнев, Е.Г. Пашинская, ФНТ **40**, 1237 (2014).
6. Ю.Д. Заворотнев, Е.Г. Пашинская, ФТТ **58**, 647 (2016).
7. L.S. Metlov, Phys. Rev. Lett. **106**, 165506 (2011).
8. L.S. Metlov, Phys. Rev. **E90**, 022124 (2014).
9. И.Е. Дзялошинский, ЖЭТФ **46**, 1420 (1964).

Yu.D. Zavorotnev, A.Yu. Zakharov, L.S. Metlov, M.A. Zakharov

EFFECT OF DISLOCATIONS ON THE STRUCTURAL ORDER PARAMETER IN A CRYSTAL UNDER SEVERE PLASTIC DEFORMATION BY TORSION

Mutual influence of the structural and defect order parameter under the loading by severe plastic deformation by torsion is considered in the framework of the phenomenological Landau theory. It is shown that with varying the temperature, the value of torsion moment and the interaction between the order parameters (OP), one can receive different distributions of the modules of the structural OP and the defect density.

Keywords: structural phase transition, order parameter, helix structure, severe plastic deformation by torsion, nonequilibrium evolution thermodynamics, kinetics, dislocations

Fig. 1. Spatial dependences of the of the components of the structural OP and its modulus at the second-order PT in a perfect crystal: $a - q_x(z)$, $b - q_y(z)$, $c - q(z)$, z – Fourier analy-

sis of $q(z)$, the amplitude of the first harmonics is reduced 50-fold. From now on, all parameters are in relative units

Fig. 2. Spatial dependences of the components of the structural OP ($a - q_x(z)$, $b - q_y(z)$) and the defect OP ($e - h(z)$) under the interaction and the second-order phase transition

Fig. 3. Spatial dependences of the components of the structural OP involving defects and their weak interaction (a) and analysis of Fourier modulus of the structural OP (b); the amplitude of the first harmonics is reduced tenfold

Fig. 4. Structural OP (dashed line) and defect OP (solid line) involving the first-order phase transition and high modulus of their interaction