

А. В. АНТОНОВ, Ю. П. БОГЛАЕВ, Ч. В. КОПЕЦКИЙ, Л. С. ШВИНДЛЕРМАН

К ДИНАМИКЕ ДВИЖУЩЕЙСЯ ГРАНИЦЫ

(Представлено академиком Г. В. Курдюмовым 12 VIII 1971)

Необходимость определения формы движущейся границы раздела возникает при решении ряда задач теории фазовых превращений и структурных превращений в твердом теле. Если уравнения движения заданы, то основная трудность состоит в определении граничных условий, корректно описывающих процесс. Физическим условием, выделяющим однозначное решение такого класса задач, может служить вводимое представление о промежуточном равновесии. Согласно этому представлению потенциальная термодинамическая функция системы в каждый момент времени минимальна несмотря на то, что в системе протекают необратимые процессы. Естественно, речь идет не об абсолютном минимуме термодинамического потенциала, а о промежуточном, характеризующем наиболее устойчивое (но не метастабильное) состояние в каждый момент времени. Одним из достоинств такого подхода является, в частности, возможность определить параметры переходного процесса.

Отметим двойственность постановки задачи. Изложенный подход может быть сформулирован как процесс определения условного экстремума (минимума) функционала, определяющего термодинамический потенциал системы, уравнениями связи для которого являются уравнения движения. Хотя рассмотренное представление и близко к принципу минимального производства энтропии при стационарных состояниях системы, рассматриваемому в термодинамике необратимых процессов, оно отличается от него и является в определенной степени гипотетическим и должно быть подтверждено сравнением расчета с экспериментом.

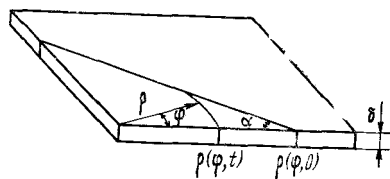


Рис. 1. Схема рассматриваемого бикристаллического образца

В настоящей работе рассматривается задача определения формы межзеренной границы, движущейся под действием собственной кривизны (свободной энергии границы) и некоторого числа других движущих сил. Пренебрегая ориентационной зависимостью ⁽¹⁾, сводим задачу к плоской. В приближении теории абсолютных скоростей реакций уравнение движения в полярных координатах может быть записано ^(2, 3) в виде

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\frac{A}{\rho} \frac{[\rho^2 + 2(\partial \rho / \partial \varphi)^2 + \rho \partial^2 \rho / \partial \varphi^2]}{[\rho^2 + (\partial \rho / \partial \varphi)^2]} - \frac{B}{\rho} \sqrt{\rho^2 + \left(\frac{\partial \rho}{\partial \varphi}\right)^2}, \quad (1)$$

$$A = A_0 \sigma_{gr}, \quad B = A_0 P, \quad 0 \leq \varphi \leq 1/2\pi, \quad 0 \leq t \leq t^*,$$

где A_0 — кинетический коэффициент, определяемый механизмом движения границы, σ_{gr} — удельная свободная энергия границы, P — движущие силы, инвариантные к кривизне; пример таких сил: $P = 2\Delta\sigma_n / \delta$, где $\Delta\sigma_n$ — разность поверхностных энергий на плоскостях образца по обе стороны границы, δ — толщина образца; t — текущее время, t^* — конец рассматриваемого временного интервала.

Для изотермического движения при постоянстве объема системы и равенстве удельных объемных энергий зерен термодинамический потенциал системы — свободная энергия F — может быть представлен следующим функционалом (рис. 1):

$$F = \sigma_{\text{гp}} \delta \int_0^{1/2\pi} \left[\rho^2 + \left(\frac{\partial \rho}{\partial \varphi} \right)^2 \right]^{1/2} d\varphi + \Delta \sigma_n \int_0^{1/2\pi} \rho^2 d\varphi + \\ + \Delta \sigma_{\pi} \delta [\rho_{\varphi=0}(0) - \rho_{\varphi=0}(t)] + \Delta \sigma_{\pi} \delta [\rho_{\varphi=1/2\pi}(0) - \rho_{\varphi=1/2\pi}(t)], \quad (2)$$

где $\Delta \sigma_{\pi}$ — разность удельных свободных поверхностных энергий на торце образца по обе стороны границы.

Решением задачи для момента времени t является, как указывалось, экстремаль функционала (2) из класса кривых, удовлетворяющих уравнению движения (1). Единственное решение выделяется начальным условием (рис. 1)

$$\rho(\varphi, t)_{t=0} = \rho_0(\varphi). \quad (3)$$

Минимизация функционала F с условиями (2), (3) проводилась прямым методом на ЭВМ. Уравнение (1) в рассматриваемой области записывалось в конечно-разностном виде. Для значений

$A = 10^{-9}$ см²/сек, $B = 10^{-10}$ см/сек, $\sigma_{\text{гp}} \delta = 5$ эрг/см, $\Delta \sigma_n = 100$ эрг/см²; $\Delta \sigma_{\pi} \delta = 1$ эрг/см, $\text{tg } \alpha = 0,275$ результаты расчетов приведены на рис. 2.

Экспериментальная часть работы проводилась на плоских бикристаллах цинка. Бикристаллы выращивались в кварцевых лодочках зонной плавкой. Образцы для исследования вырезались из полученных бикристаллов так, чтобы граница между зернами образовывала острый угол α с боковой гранью образца. Движущими силами процесса миграции в наших опытах являлись граничная и поверхностная энергия образца. Миграция границы наблюдалась в высокотемпературной приставке к оптическому микроскопу, фиксация положений границы производилась снижением температуры образца. Точность поддержания температуры $> \pm 0,5^\circ \text{C}$ (3).

На рис. 3 приведены следы движения границы зерен бикристалла цинка, характеристики которого весьма близки к указанным выше. Основные параметры формы движущейся границы хорошо совпадают с расчетными.

Авторы выражают благодарность Л. Н. Ивановой за проведение расчетов.

Институт физики твердого тела
Академии наук СССР
Черноголовка Моск. обл.

Поступило
8 VIII 1971

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

- ¹ Р. А. Свелин, Термодинамика твердого состояния, М., 1968. ² W. W. Mullins, J. Appl. Phys., 27, № 8 (1956). ³ А. В. Антонов, Ч. В. Копецкий, Л. С. Швиндлерман, Физ. мет. и металловед., 32, в. 3 (1971).