

М.И.КУЛАК, канд.физ.-мат.наук,
В.С.ВИХРЕНКО, канд.физ.-мат.наук,
Л.А.РОТТ, докт.физ.-мат.наук (БТИ)

ДИНАМИЧЕСКОЕ ПОВЕДЕНИЕ ПРИМЕСИ ЗАМЕЩЕНИЯ В МОЛЕКУЛЯРНОМ КРИСТАЛЛЕ

Ранее [1—4] исследовались динамические свойства идеального кристалла. Наличие различных несовершенств (вакансий, примесей) привносит качественно новые особенности в его поведение [5]. Ниже для исследования свойств несовершенного кристалла используем подход, развитый в [3,4].

Рассмотрим примесь замещения и ближайшее ее окружение в гранцентрированном кубическом кристалле. В этом случае фактически приходится иметь дело с двухкомпонентной системой — масса и характеристики взаимодействия примесного атома отличаются от таковых для атомов матрицы. Поэтому проведенный в [1,2] переход к безразмерным переменным необходимо соответствующим образом видоизменить. С этой целью систему уравнений, описывающую эволюцию одно- и двухчастичных коррелятивных добавок β_1 и β_2 , представим в исходной форме:

$$\begin{aligned} & \left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\vec{p}^k}{m_k} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{q}^k} + \vec{F}_k \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{p}^k} \right) \beta_1(k; t) = \frac{\vec{p}^k}{\theta m_k A_k} \exp \left\{ -\frac{(p^k)^2}{2\theta m_k} \right\} \cdot \\ & \cdot \sum_{j \neq k}^N \int_{\Omega_j} \int_{\Omega_p} \vec{G}_{kj} \beta_1(j; t) F_{11}^{(1)}(\vec{q}^k / \vec{q}^j) d\vec{q}^j d\vec{p}^j - \sum_{j \neq k}^N \int_{\Omega_j} \int_{\Omega_p} \vec{G}_{kj} \cdot \\ & \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{p}^k} \beta_2(k, j; t) d\vec{q}^j d\vec{p}^j; \\ & \beta_2(k, j; t) = \beta_2^{(0,0)}(\vec{q}^k, \vec{q}^j; t) (A_k A_j)^{-1} \exp \left[-\frac{(p^k)^2}{2\theta m_k} - \frac{(p^j)^2}{2\theta m_j} \right]; \\ & \frac{\partial \beta_2^{(0,0)}(k, j; t)}{\partial t} = -\frac{1}{\theta} [\Delta \vec{G}_{kj} \cdot \hat{\beta}_1^{(1)}(\vec{q}^k; t) F_{11}^{(1)}(\vec{q}^j / \vec{q}^k) + \\ & + \Delta \vec{G}_{jk} \cdot \hat{\beta}_1^{(1)}(\vec{q}^j; t) F_{11}^{(1)}(\vec{q}^k / \vec{q}^j)]; \\ & \hat{\beta}_1^{(1)}(\vec{q}^k; t) = \int_{\Omega_p} \frac{\vec{p}^k}{m_k} \beta_1(k; t) d\vec{p}^k. \end{aligned} \quad (1)$$

Пояснение обозначений приведено в [3,4]. Массу атомов матрицы в дальнейшем будем обозначать m , а массу примеси — m_{II} . Выберем, как и ранее, в качестве параметров обезразмеривания m ,

σ , ϵ и $\tau = \sigma \sqrt{m/\epsilon}$ (σ и ϵ — параметры потенциала взаимодействия частиц матрицы). Тогда после перехода к безразмерной форме система уравнений (1) принимает вид

$$\begin{aligned} & \left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{m}{m_{\pi}} \vec{p}^k \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{q}^k} + \vec{F}_k \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{p}^k} \right) \beta_1(k; t) = \\ & = \frac{m}{m_k} \frac{\vec{p}^k}{\theta A_k} \exp \left\{ -\frac{m}{m_k} \frac{(p^k)^2}{2\theta} \right\} \cdot \sum_{j \neq k}^N \int_{v_j} \int_{\Omega_p} \vec{G}_{kj} \beta_1(j; t) F_{11}^{(1)}(\vec{q}^k/\vec{q}^j) \times \\ & \times d\vec{q}^j d\vec{p}^j - \sum_{j \neq k}^N \int_{v_j} \int_{\Omega_p} \vec{G}_{kj} \frac{\partial}{\partial \vec{p}^k} \beta_2(k, j; t) d\vec{q}^j d\vec{p}^j; \\ & \beta_2(k, j; t) = \beta_2^{(0,0)}(\vec{q}^k, \vec{q}^j; t) (A_k A_j)^{-1} \exp \left\{ -\frac{m}{m_k} \frac{(p^k)^2}{2\theta} - \frac{m}{m_j} \frac{(p^j)^2}{2\theta} \right\}; \\ & \frac{\partial \beta_2^{(0,0)}(k, j; t)}{\partial t} = -\frac{1}{\theta} \left[\frac{m}{m_k} \Delta \vec{G}_{kj} \cdot \hat{\beta}_1^{(1)}(\vec{q}^k; t) F_{11}^{(1)}(\vec{q}^j/\vec{q}^k) + \right. \\ & \left. + \frac{m}{m_j} \Delta \vec{G}_{jk} \cdot \hat{\beta}_1^{(1)}(\vec{q}^j; t) F_{11}^{(1)}(\vec{q}^k/\vec{q}^j) \right]; \\ & \hat{\beta}_1^{(1)}(\vec{q}^k; t) = \frac{m}{m_k} \frac{\sigma}{\tau} \int_{\Omega_p} \vec{p}^k \beta_1(k; t) d\vec{p}^k. \end{aligned} \quad (2)$$

Как и ранее, для безразмерных величин применяем те же обозначения, что и для размерных. Отметим, что в (2) входят безразмерные силы

$$\begin{aligned} \vec{G}_{kj} &= -\partial \Phi(r_{kj}) / \partial \vec{q}^k; \\ r_{kj} &= |\vec{q}^j - \vec{q}^k|, \end{aligned} \quad (3)$$

где потенциал межчастичного взаимодействия определяется соотношением

$$\Phi(r_{kj}) = 4 \frac{\epsilon_{kj}}{\theta} \left[\frac{(\sigma_{kj}/\sigma)^{12}}{r_{kj}^{12}} - \frac{(\sigma_{kj}/\sigma)^6}{r_{kj}^6} \right], \quad (4)$$

причем $\epsilon_{kj} = \epsilon$ и $\sigma_{kj} = \sigma$; если обе частицы принадлежат матрице и

$$\epsilon_{kj} = \sqrt{\epsilon \epsilon_{\pi}}, \quad \sigma_{kj} = \frac{\sigma + \sigma_{\pi}}{2}, \quad (5)$$

если одна из частиц (k или j) является примесью. Соотношения (5) выражают собой обычно применяемые (см. [6]) правила комбинации параметров потенциала, описывающего взаимодействие между частицами разных сортов. Равновесные функции распределения $F_{11}^{(1)}(\vec{q}^j/\vec{q}^k)$ также определяются с учетом того, принадлежат ли обе частицы матрице или одна из них является примесью. Если k частица матрицы соседствует с примесью, то действующая на нее полная равновесная сила \vec{F}_k , определяемая суммой сил взаимодействия с ближайшими соседями, включает взаимодействие с примесью.

Потенциал средней силы, действующей на примесь со стороны частицы матрицы, которая распределена по своей ячейке, определяется с помощью итерационного уравнения (см. [1]) в предположении, что наличие примеси несущественно влияет на потенциал средних сил, действующих между частицами матрицы. Потенциал средней силы, действующей на частицу матрицы со стороны примеси, распределенной в своей ячейке, также определяется с помощью итерационного уравнения при известном потенциале средней силы, действующей на примесь со стороны частицы матрицы. Унарная и бинарная функции распределения определяются через потенциалы средних сил известным образом [1].

В дальнейшем используем развитую в [3,4] технику разложения по полиномам Эрмита. Получающаяся из (2) система уравнений во многом подобна системе (2) работы [4]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \beta_1^{(0)}(\vec{q}^k; t)}{\partial t} &= -\sqrt{\theta} \frac{m}{m_k} \frac{\partial}{\partial \vec{q}^k} \cdot \hat{\beta}_1^{(1)}(\vec{q}^k; t); \\ \frac{\partial \hat{\beta}_1^{(1)}(\vec{q}^k; t)}{\partial t} &= \frac{m}{m_k} \frac{\partial \beta_1^{(0)}(\vec{q}^k; t)}{\partial \vec{q}^k} - \vec{F}_k \beta_1^{(0)}(\vec{q}^k; t) = \\ &= \frac{1}{\sqrt{\theta}} \sum_{j \neq k}^N \int_{v_j} \vec{G}_{kj} \left[\beta_1^{(0)}(\vec{q}^j; t) F_{11}^{(1)}(\vec{q}^k/\vec{q}^j) + \beta_2^{(0,0)}(\vec{q}^k, \vec{q}^j; t) \right] d\vec{q}^j; \\ \frac{\partial \beta_2^{(0,0)}(\vec{q}^k, \vec{q}^j; t)}{\partial t} &= -\frac{1}{\theta} \left[\frac{m}{m_k} \Delta \vec{G}_{kj} \cdot \hat{\beta}_1^{(1)}(\vec{q}^k; t) F_{11}^{(1)}(\vec{q}^j/\vec{q}^k) + \right. \\ & \left. + \frac{m}{m_j} \Delta \vec{G}_{jk} \cdot \hat{\beta}_1^{(1)}(\vec{q}^j/\vec{q}^k) \right]. \end{aligned} \quad (6)$$

Здесь $\beta_1^{(1)}$, $\hat{\beta}_1^{(1)}$ и $\beta_2^{(0,0)}$ являются младшими коэффициентами разложения унарной и бинарной динамических частичных функций по полиномам Эрмита в пространстве импульсов.

После дифференцирования второго уравнения системы (6) по времени и использования в нем первого и третьего уравнений ее можно свести к уравнению второго порядка

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \hat{\beta}_1^{(1)}(k; t)}{\partial t^2} + \left(\frac{m}{m_k}\right)^2 \sqrt{\theta} \frac{\partial^2 \hat{\beta}_1^{(1)}(k; t)}{(\partial \vec{q}^k)^2} + \sqrt{\theta} \left(\frac{m}{m_k}\right) \vec{F}_k \frac{\partial \hat{\beta}_1^{(1)}(k; t)}{\partial \vec{q}^k} = \\ = - \sum_{j \neq k}^N \int_{v_j} \vec{G}_{kj} \frac{\partial \hat{\beta}_1^{(1)}(j; t)}{\partial \vec{q}^j} F_{11}^{(1)}(\vec{q}^k / \vec{q}^j) d\vec{q}^j - \frac{1}{\theta} \sum_{j \neq k}^N \frac{m}{m_k} \langle \vec{G}_{kj} \Delta \vec{G}_{kj} \rangle \hat{\beta}_1^{(1)}(k; t) - \\ - \frac{1}{\theta} \sum_{j \neq k}^N \frac{m}{m_j} \int_{v_j} \vec{G}_{kj} \Delta \vec{G}_{kj} \hat{\beta}_1^{(1)}(j; t) F_{11}^{(1)}(\vec{q}^k / \vec{q}^j) d\vec{q}^j. \end{aligned} \quad (7)$$

Разлагая последнее соотношение по ортогональным полиномам в конфигурационном пространстве, приходим к системе обыкновенных дифференциальных уравнений, описывающей поведение коэффициентов разложения низшего порядка:

$$\begin{aligned} \ddot{\hat{\beta}}(k; t) + \frac{m}{m_k} \left(\sum_{j \neq k}^N \hat{C}_{kj} \right) \hat{\beta}(k; t) = \sum_{j \neq k}^N \frac{m}{m_j} \hat{C}_{jk} \hat{\beta}(j; t); \\ \hat{C}_{kj} = \left\langle \frac{\partial^2 \Phi(r_{kj})}{\partial \vec{q}^k \partial \vec{q}^k} \right\rangle. \end{aligned} \quad (8)$$

Аналогичный вид система уравнений будет иметь и при наличии вакансии вместо примеси. Естественно, что для ячейки, в которой находится вакансия, тензор $\hat{\beta}$ равен нулю, а в уравнениях для ближайших с вакансией частиц тензор \hat{C}_{kj} , определяемый взаимодействием частицы с вакансией, также полагается равным нулю.

Рассмотрим случай, когда в начальный момент возмущается примесный атом и распишем уравнение (8) относительно скалярных инвариантов. Симметрия задачи в этом случае сохраняется такой же, как и при исследовании динамических свойств идеального кристалла. Поэтому в центральной ячейке тензор $\hat{\beta}$ сферически симметричен

$$\hat{\beta}_n = \beta_n(t) \hat{E}, \quad (9)$$

а в других ячейках представим его в виде

$$\begin{aligned} \hat{\beta}(j; t) = \beta_j^E(t) \hat{E} + \beta_j^n(t) \hat{n}_{nj}; \\ \hat{n}_{nj} = \vec{n}_{nj} \vec{n}_{nj} - \frac{1}{3} \hat{E}, \end{aligned} \quad (10)$$

где \hat{E} — единичный тензор; \vec{n}_{kj} — единичный вектор, направленный вдоль линии, соединяющей центры k -ой и j -ой ячеек. В резуль-

тате для примеси и частиц, лежащих на первой координационной сфере, получим уравнения:

$$\begin{aligned} \ddot{\beta}_n + \frac{m}{m_n} \omega_n^2 \beta_n = \omega_n^2 \beta_1^E + \frac{8}{3} C_{1n} \beta_1^n; \\ \beta_1^E + (\omega^2 + C_n^E - C^E) \beta_1^E + \frac{2}{9} (C_n^n - C^n) \beta_1^n = \\ = C^E \sum_{j \neq 1, n}^{12} \beta_j^E + \frac{m}{m_n} C_n^E \beta_n^E + C_1^n E; \\ \beta_1^n + [(\omega^2 + C_n^E - C^E) + \frac{1}{3} (C_n^n - C^n)] \beta_1^n + \\ + (C_n^n - C^n) \beta_1^E = C_1^n + C_1^{nn} + C_1^{En}; \end{aligned} \quad (11)$$

$$\begin{aligned} C_1^{nE} = \frac{1}{9} \sum_{j \neq 1, n}^{12} C^n [3(\vec{n}_{1j} \cdot \vec{n}_{nj})^2 - 1] \beta_j^n; \\ C_1^n = \frac{1}{2} \sum_{j \neq 1, n}^{12} C^n [13(\vec{n}_{1j} \cdot \vec{n}_{n1})^2 - 1] \beta_j^E + 6C_n^n \beta_n^E; \\ C_1^{nn} = \frac{1}{6} C^n \sum_{j \neq 1, n}^{12} \{9(\vec{n}_{nj} \cdot \vec{n}_{1j})(\vec{n}_{n1} \cdot \vec{n}_{1j})(\vec{n}_{nj} \cdot \vec{n}_{n1}) - \\ - 3[(\vec{n}_{nj} \cdot \vec{n}_{n1})^2 + (\vec{n}_{nj} \cdot \vec{n}_{1j})^2 + (\vec{n}_{n1} \cdot \vec{n}_{1j})^2 + 2]\} \beta_j^n; \\ C_1^{En} = \frac{1}{2} C^E \sum_{j \neq 1, n}^{12} [3(\vec{n}_{nj} \cdot \vec{n}_{n1})^2 - 1] \beta_j^n. \end{aligned}$$

Здесь C^E и C^n являются скалярными инвариантами тензора \hat{C}_{kj} :

$$\begin{aligned} \hat{C}_{kj} = C^E \hat{E} + C^n (\vec{n}_{kj} \vec{n}_{kj} - \frac{1}{3} \hat{E}); \\ C^E = \frac{1}{3} \left\langle \frac{\partial^2 \Phi(r_{kj})}{(\partial \vec{q}^k)^2} \right\rangle = \frac{1}{3} \langle [\Phi''(r) + \frac{2}{r} \Phi'(r)] \rangle; \\ C^n = \frac{3}{2} \left\langle \left[\frac{1}{r} \frac{d}{dr} \left(\frac{\Phi'(r)}{r} \right) (\vec{r}_{jk} \cdot \vec{n}_{jk})^2 + \frac{1}{r} \Phi'(r) \right] \right\rangle - \frac{3}{2} C^E. \end{aligned} \quad (12)$$

В качестве Φ необходимо использовать выражение (4), причем при вычислении C^E и C^n — полагать $\epsilon_{kj} = \epsilon$ и $\sigma_{kj} = \sigma$, а при

вычислении C_{Π}^E и $C_{\Pi}^n - \epsilon_{ki} = \epsilon_{\Pi}$ и $\sigma_{ki} = \sigma_{\Pi}$. Усреднение также выполняется при помощи соответствующих функций распределения.

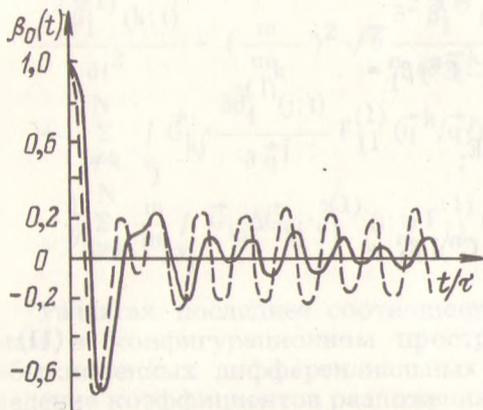


Рис. 1.

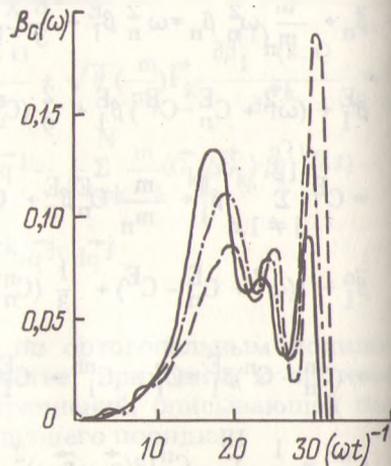


Рис. 2.

Для вторых и более далеких соседей примесной частицы уравнения движения сохраняют такой же вид, как и в совершенном кристалле.

В том случае, когда в начальный момент возбуждается частица матрицы, находящаяся вблизи примеси или вакансии, симметрия задачи существенно понижается, так как появляется выделенное направление, определяемое линией, соединяющей центры возбужденной и примесной ячеек. Поэтому система уравнений, описывающая динамику атомов кристалла вблизи примеси или вакансии, имеет более сложную структуру и здесь не рассматривается.

Для решения системы уравнений (11) применялась численная процедура, аналогичная описанной в [3, 4]. На рис. 1 приведены результаты вычисления временной корреляционной функции импульса более легкого изотопа ^{36}Ag в матрице более тяжелого ^{40}Ag (сплошная кривая) и более тяжелого ^{40}Ag в матрице более легкого ^{36}Ag (штриховая кривая). На рис. 2 представлены спектральные плотности (Фурье-преобразования временных корреляционных функций) в тех же обозначениях, а штрих-пунктирной кривой представлена спектральная плотность совершенного кристалла. Вычисления выполнены при $\theta = 1$ и $\nu = 0,98$ с учетом 50 координационных сфер. Фурье-преобразование выполнено на временном интервале $[0; 1,5\tau]$.

Как следует из сравнения спектральных плотностей, происходит существенное перераспределение удельного веса низко- и высокочастотных колебаний. У более тяжелого изотопа существенно увеличивается доля низкочастотных колебаний, а у более легкого — высокочастотных.

ЛИТЕРАТУРА

1. Ротт Л.А. Статистическая теория молекулярных систем. — М.: Наука, 1979. — 280 с.
2. Вихренко В.С., Кулак М.И., Ротт Л.А. Замкнутая система кинетических уравнений в методе коррелятивных функций условных распределений. — Изв. АН БССР. Сер. физ.-мат. наук, 1977, № 3, с. 97—101.
3. Вихренко В.С., Кулак М.И. Исследование динамического поведения системы многих частиц. — В сб.: Теоретическая и прикладная механика. Минск: Вышэйшая школа, 1982, вып. 9, с. 106—112.
4. Кулак М.И., Вихренко В.С. Временные корреляционные функции частиц молекулярного кристалла. — Изв. АН БССР. Сер. физ.-мат. наук, 1982, № 5, с. 91—97.
5. Марадудин А.А. Дефекты и колебательный спектр кристаллов/Пер. с англ. И.П.Ипатовой. — М.: Мир, 1968. — 432 с.
6. Гришфельдер Дж., Кертис К., Берд Р. Молекулярная теория газов и жидкостей. — М.: ИЛ, 1961. — 930 с.

УДК 531.3+629.11.012.5

М.А.ЛЕВИН, канд.техн.наук (БПИ)

ИССЛЕДОВАНИЕ КАЧЕНИЯ С ПРОСКАЛЬЗЫВАНИЕМ В ОБЛАСТИ КОНТАКТА С УЧЕТОМ АНИЗОТРОПИИ ТРЕНИЯ

В работе рассматривается определение зависимостей для составляющих реакции связи стационарно катящегося деформируемого колеса (продольной силы Q_1 , боковой силы Q_2 и стабилизирующего момента M_3) в функции продольного ϵ_1 и бокового ϵ_2 псевдоскольжений во всем диапазоне изменения области проскальзывания от нуля до величины, равной длине области контакта. При этом принимается во внимание анизотропия трения. Цель такого исследования заключается также в том, чтобы иметь возможность непосредственно использовать указанные зависимости для нахождения переменных коэффициентов, входящих в уравнения нестационарного качения, необходимые при расчетах динамики систем с качением в практически важных случаях движений близких к заносу. На основе полученных на ЭВМ результатов возможно также представление зависимостей для составляющих реакции связи в виде более простых соотношений.

Среди первых аналитических исследований боковой силы следует отметить работы Фромма и Фиала. Зависимости для боковой и продольной сил в отдельности, принимая во внимание большие зоны скольжения и для сложной модели, были рассмотрены, в частности, в [1, 2].

Совместное рассмотрение этих сил с упором на боковую сделано в работе О.Н.Мухина [3]. В отличие от [3] результат здесь получен для безразмерных величин и в том числе и для продольной силы. Одновременно используется одинаково простая модель в продольном и боковом направлениях с учетом анизотропии трения и дан алгоритм расчета широкого класса моделей.