

FIZIK KRISTALLARDA EGRILIK OQIMLARINING TATBIQI

Sodiqova Vazira Yaxyoqul qizi

*O'zbekiston Milliy universiteti Jizzax filiali, Amaliy matematika
yo'nalishi magistranti*

Kristallarning o'sish jarayonlarini, ularning sirt shaklining vaqt bo'yicha o'zgarishini va muvozanat holatiga intilishini matematik jihatdan tavsiflashda egrilik oqimlari (curvature flow) nazariyasi muhim o'rin tutadi. Egrilik oqimlari geometrik evolyutsiya tenglamalari sinfiga kirib, ular sirtning har bir nuqtasidagi harakat tezligini o'sha nuqtadagi egrilikka bog'liq holda aniqlaydi. Kristalografiyada bunday modellar kristall panjarasining anizotropik xususiyatlarini hisobga olgan holda qo'llaniladi, chunki haqiqiy kristallarda sirt energiyasi yo'nalishga bog'liq bo'ladi.

1. Egrilik oqimi tushunchasi

Faraz qilaylik, Σ_t — $\mathbb{R}^n$ fazosida vaqt parametri t ga bog'liq ravishda deformatsiyalanuvchi silliq sirt (yoki egri chiziqlik) bo'lsin. Agar $F: \Sigma \times [0, T) \rightarrow \mathbb{R}^n$ akslantirish quyidagi $\partial F / \partial t = -H(x, t) \cdot N(x, t)$ tenglamani qanoatlantirsa, bunday evolyutsiya o'rtacha egrilik oqimi (mean curvature flow) deb ataladi, bunda H — o'rtacha egrilik, N — sirtga tashqi normal vektor. Bu tenglama sirtning har bir nuqtasi o'z egriligiga proporsional tezlik bilan, egrilik markazi tomon harakatlanishini bildiradi.

Kristalografik masalalarda izotrop bo'lmagan (anizotropik) sirt energiyasi $\gamma(N)$ hisobga olinib, egrilik oqimi umumlashtiriladi: $\partial F / \partial t = -H\gamma(x, t) \cdot N(x, t)$, bunda $H\gamma$ — γ funksiyasi bilan aniqlangan vazniy (weighted) o'rtacha egrilik. Bu tenglama kristalning geometrik shaklini kristall panjaraning simmetriyasi va yo'nalishga bog'liq sirt energiyasi asosida tavsiflaydi.

2. Kristall (Wulff) egrilik oqimi

Haqiqiy kristallarning ko'pchiligi silliq emas, balki qirrali (faceted) shaklga ega bo'ladi, chunki sirt energiyasi $\gamma(N)$ yo'nalish bo'yicha keskin minimumlarga ega bo'lishi mumkin. Bunday holatda klassik egrilik tushunchasi umumlashtirilib, kristalli egrilik (crystalline curvature) va kristalli oqim (crystalline flow) tushunchalari kiritiladi. Bu model Taylor, Almgren va Cahn tomonidan ishlab chiqilgan bo'lib, sirtning chekli sonidagi tekis qirralar (facets) yig'indisi sifatida qaraydi va har bir qirraning parallel siljish tezligini uning yo'nalishidagi γ qiymati orqali aniqlaydi.

Bunday oqimning statsionar (harakatsiz) yechimi Wulff shakli deb ataladi — bu shakl berilgan hajm ostida sirt energiyasini minimallashtiruvchi noyob geometrik shakl bo'lib, kristall o'sishining muvozanat holatini ifodalaydi. Wulff shakli $\gamma(N)$ funksiyasining qutb diagrammasi (Wulff diagrammasi) orqali qurilib, kristallografiyada tajriba natijalarini nazariy model bilan solishtirish uchun ishlatiladi.

3. Egrilik oqimlarining fizik kristallardagi tatbiqlari

1) Kristall o'sish va erishi. Egrilik oqimi tenglamalari orqali kristallning erish (melting) yoki o'sish jarayonida sirt shaklining vaqt bo'yicha qanday o'zgarishini modellashtirish mumkin. Bunda sirt energiyasi gradienti kristall-suyuqlik chegarasining harakatlantiruvchi kuchi sifatida qaraladi (Stefan masalasining geometrik umumlashmasi).

2) Donador (polikristall) materiallarning donalari chegarasi harakati. Ko'p donali metall va keramik materiallarda don chegaralarining harakati o'rtacha egrilik oqimi bilan yaqinlashtiriladi (Mullins tenglamasi), bu esa material mikrostruktura evolyutsiyasini — donalarning yiriklashuvi (grain coarsening) jarayonini — tushunish imkonini beradi.

3) Kristall betaki (dendrit) shakllanishi. Anizotropik egrilik oqimlari dendritik kristall o'sish jarayonlarini, ya'ni barqarorlikni yo'qotish natijasida shoxlanuvchi shakllarning hosil bo'lishini modellashtirishda qo'llaniladi, bu esa metallurgiyada quyma materiallarning mikrostrukturasini nazorat qilishda muhim ahamiyatga ega.

4) Nanokristallar va yupqa plyonkalar. Nanoo'lchamli kristall zarrachalarning shakli va barqarorligini tahlil qilishda kristalli egrilik oqimi modeli qo'llanilib, sirt energiyasi yuqori bo'lgan nano-ob'ektlarning muvozanat shaklini (Wulff shaklini) bashorat qilish mumkin.

5) Raqamli modellashtirish. Egrilik oqimi tenglamalari darajali to'plam (level-set) usuli yoki fazali maydon (phase-field) usullari yordamida sonli yechiladi, bu esa murakkab geometriyaga ega kristall tuzilmalarning kompyuter simulyatsiyasini amalga oshirish imkonini beradi.

4. Matematik xossalari

Egrilik oqimi tenglamasi kvazichiziqli parabolik xususiyatga ega bo'lib, bu uning yechimi mavjudligi va yagonaligini isbotlashda muhim rol o'ynaydi. Yopiq qavariq sirtlar uchun o'rtacha egrilik oqimi cheklangan vaqt ichida nuqtaga siqiladi (Huisken teoremasi), bu esa jarayonning fizik jihatdan barqaror "siqilish" xarakteriga ega ekanligini tasdiqlaydi. Anizotropik holatda esa yechimning barqarorligi γ funksiyasining qavariqlik shartiga (γ ning ikkinchi tartibli hosilasi musbat aniqlanganligiga) bog'liq bo'ladi.

Xulosa

Egrilik oqimlari nazariyasi geometrik analiz va materialshunoslik fanlarini bog'lovchi samarali matematik vosita bo'lib, fizik kristallarning o'sishi, erishi, don chegaralari harakati va muvozanat shaklini aniq matematik modellar asosida tavsiflash imkonini beradi. Anizotropik va kristalli egrilik oqimlari, xususan Wulff shakli nazariyasi, zamonaviy materialshunoslik va nanotexnologiyada kristall tuzilmalarni loyihalashda muhim nazariy asos bo'lib xizmat qiladi.

Foydalanilgan adabiyotlar

1. Taylor J.E. Constructions and conjectures in crystalline nondifferential geometry // Differential Geometry: Proceedings of the Conference, Rio de Janeiro. — 1991.
2. Huisken G. Flow by mean curvature of convex surfaces into spheres // Journal of Differential Geometry. — 1984. — Vol. 20. — P. 237–266.
3. Mullins W.W. Two-dimensional motion of idealized grain boundaries // Journal of Applied Physics. — 1956. — Vol. 27. — P. 900–904.
4. Gurtin M.E. Thermomechanics of Evolving Phase Boundaries in the Plane. — Oxford: Clarendon Press, 1993.