УДК 539.1

РОЛЬ СИНХРОНИЗАЦИИ АТОМНЫХ КОЛЕБАНИЙ И ЭНЕРГЕТИЧЕСКОЙ САМОРЕГУЛЯЦИИ ПРИ ФОРМИРОВАНИИ ЭВТЕКТИК НА НАЧАЛЬНОЙ СТАДИИ КОНТАКТНОГО ПЛАВЛЕНИЯ

[1]Узденов Э.М.*, [1]Ахкубеков А.А., [2]Ахкубекова С.Н.

[1]Кабардино-Балкарский государственный университет им. Х.М. Бербекова
[2]Кабардино-Балкарский государственный аграрный университет им. В.М. Кокова

***uzden.off@yandex.ru**

Предложена гипотетическая модель начальной стадии контактного эвтектического плавления, объясняющая фазовый переход через синхронизацию колебаний атомов на границе фаз при изменении температуры контакта. Эта синхронизация приводит к резонансному росту амплитуд колебаний атомов (молекул), снижению энергии их связи и переходу в жидкую фазу. Модель согласуется с классической фазовой диаграммой, где эвтектическая точка соответствует энергетически выгодному состоянию резонансного плавления. Для анализа эвтектического поведения исследованы разнородные системы: таких как неметаллическая H_2O–NaCl и металлические Ga–In и Al–Cu, в которых образуются интерметаллические фазы. Во всех случаях наблюдается характерное падение температуры и переход в жидкое состояние при достижении эвтектики. Результаты подтверждают, что локальные колебательные процессы играют ключевую роль в образовании жидкого слоя, эвтектического состава, дополняя традиционные термодинамические представления.

Ключевые слова: эвтектика, синхронизация колебаний, резонансное плавление, фононные моды, контактное плавление

THE ROLE OF SYNCHRONIZATION OF ATOMIC VIBRATIONS AND ENERGY SELF-REGULATION IN THE FORMATION OF EUTECTIC MATERIALS UNDER CONTACT MELTING CONDITIONS BY

[1]Uzdenov E.M., [1]Akhkubekov A.A., [2]Akhkubekova C.N.

[1]Kabardino-Balkarian State University
[2]V.M. Kokov Kabardino-Balkarian Agrarian University

A hypothetical model of the initial stage of contact eutectic melting is proposed, explaining the phase transition through the synchronization of oscillations of atoms at the phase boundary, with a change in the contact temperature. Synchronization leads to a resonant increase in the amplitudes of atomic (molecule) oscillations, a decrease in their bond energy, and a transition to the liquid phase. The model is consistent with the classical phase diagram, where the eutectic point corresponds to the energetically favorable state of resonant melting. To analyze the eutectic behavior, heterogeneous systems were studied: non-metallic H_2O–NaCl and metallic Ga–In and Al–Cu, in which intermetallic phases are formed. In all cases, a characteristic drop in temperature and transition to a liquid state upon reaching the eutectic are observed. The results confirm that local oscillatory processes play a key role in the formation of a liquid layer of eutectic composition, complementing traditional thermodynamic concepts.

Keywords: eutectic, oscillation synchronization, resonant melting, phonon modes, contact melting

Введение

Контактное (эвтектическое) плавление (КП) – явление, при котором на границе разнородных фаз возникает жидкость при температуре, ниже точки плавления любого из составляющих компонентов [1, 2]. Несмотря на широкое применение в науке и технике, природа явления КП остаётся дискуссионным. Классическая термодинамика объясняет природу его через фазовые диаграммы, но не учитывает динамику атомных процессов на микроуровне.

Современные исследования подчеркивают роль метастабильных состояний и гетерогенных механизмов при контактном плавлении. Например, в системах с интерметаллидами образование жидкости может происходить при температуре ниже стабильной эвтектики, что связано с локальным пресыщением твердых растворов [3, 4]. Наноразмерные эффекты, такие как возрастание реакционной способности на границах зерен, также играют ключевую роль, так как способны снижать энергетические барьеры фазовых переходов [5, 6].

В данной работе исследуется гипотеза, связывающая КП с резонансной синхронизацией колебаний атомов. Такой подход позволяет интерпретировать эвтектическую точку как условие коллективного перехода в жидкую фазу. Актуальность модели подтверждается экспериментами, где локальное плавление сопровождается аномальным снижением температуры [2].

Теоретическая модель

При контакте двух твёрдых тел с различной структурой колебательных мод возникает несовместимость колебаний. Это выражается во взаимном гашении высоких частот, что снижает колебательную энергию. При синхронизации частот (через явление колебательного резонанса), возможно увеличение амплитуд до уровня, достаточного для перехода атомов в жидкую фазу. Это описывается как переход по минимуму свободной энергии, что также подтверждается и формулой Гельмгольца:

$$F(T)=U(T)-T\cdot S(T), \tag{1}$$

где F – свободная энергия, U – внутренняя, S – энтропия. Система стремится к минимуму F через увеличение энтропии и уменьшение связности при резонансном возбуждении. Амплитуда колебаний атомов (A) [7] при резонансе возрастает по классическому закону вынужденных колебаний:

$$A(\omega)=\frac{F_0/m}{\sqrt{(\omega_0^2-\omega^2)^2+(2\gamma\omega)^2}}, \tag{2}$$

где ω – частота внешнего воздействия, ω_0 – собственная частота атомной решётки, γ – коэффициент демпфирования (внутреннего сопротивления), F_0 – сила взаимодействия между контактирующими атомами, m – масса атома.

В момент синхронизации частот ($\omega\approx\omega_0$) знаменатель стремится к минимуму, а амплитуда резко возрастает. Это может интерпретироваться как порог плавления, при котором атом выходит из потенциальной ямы:

$$E_{пот}=\frac{1}{2}kA^2\geq E_{связи}, \tag{3}$$

где k – эффективная жёсткость межатомной связи, $E_{связи}$ – энергия связи в твёрдой фазе.

Таким образом, синхронизация и резонанс приводят к локальному превышению энергии связи, провоцируя фазовый переход.

Контакт между разнородными кристаллами сопровождается перекрытием фононных спектров. Согласно фононной теории, при совпадении собственных частот колебаний происходит усиление определённых мод (бриллюэновские зоны перекрываются), что может объяснить наблюдаемый резонанс.

Плотность состояний для фононов в твёрдом теле имеет пики в зонах резонанса, и при контакте с другой решёткой возможно усиление этих мод за счёт энергетического перекрытия [8].

Предложенная модель контактного плавления может быть углублена при совместном рассмотрении фононных взаимодействий и теории синхронизации. На границе твёрдых фаз происходит наложение спектров собственных колебаний, что может привести к локальному усилению определённых фононных мод. При совпадении частот возникают резонансные состояния, характеризующиеся ростом плотности фононных состояний, что способствует фазовому переходу.

Кроме резонансной синхронизации, важным фактором является поверхностная энергия на границе фаз. Согласно исследованиям, снижение поверхностной энергии способствует образованию жидкой прослойки даже при температурах ниже эвтектической [6, 9]. Этот эффект можно описать через уравнение:

$$\Delta G = \gamma SL + \gamma LV - \gamma SV, \tag{4}$$

где γSL, γLV, γSV – энергии границ твёрдое-жидкое, жидкое-газовое и твёрдое-газовое соответственно. При $\Delta G < 0$ плавление становится энергетически выгодным [10].

Синхронизацию атомных колебаний можно описать через модель Куромото – классическую модель взаимодействующих осцилляторов*:*

$$\frac{d\theta_i}{dt} = \omega_i + \frac{K}{N}\sum_{j=1}^{N} sin(\theta_i - \theta_i). \tag{5}$$

Здесь θ_i – фаза i-го атома, ω_i – его собственная частота, K – коэффициент связи. При определённом распределении частот и ненулевом K система переходит в состояние синфазного движения. В случае контактного плавления можно предположить, что фазовая синхронизация колебаний на границе фаз приводит к локальному усилению амплитуд и выходу атомов за пределы потенциальной ямы, соответствующей твёрдой фазе.

Увеличение ω вследствие резонанса приводит к снижению энергетического барьера, облегчая фазовый переход. Таким образом, контактное плавление может рассматриваться как результат сочетания классических и квантовых процессов коллективного возбуждения решётки [11].

Экспериментальные наблюдения и подтверждения гипотезы

Система H_2O–NaCl. При контакте соли со льдом происходит быстрое плавление льда даже при отрицательных температурах. Это объясняется тем, что ионы соли нарушают колебательную структуру льда, изменяют жёсткость решётки и стимулируют фазовый переход [12]. Этот переход сопровождается поглощением тепла, что вызывает дополнительное локальное охлаждение – система стремится к устойчивой эвтектической точке воды и хлорида натрия (~ –21.2 °C).

Растворение соли сопровождается снижением химического потенциала воды μ_{H2O} из-за образования солевых комплексов, что смещает равновесие:

$$\Delta G = \Delta H - T\Delta S < 0\ , \tag{6}$$

где, растворение соли приводит к увеличению энтропии $\Delta S > 0$, что способствует фазовому переходу при более низкой температуре.

Система Ga–In. В одном из экспериментов, описанных в работе [2], исследователи приводят в контакт металлы In и Ga при температуре 22 °C. После контакта наблюдается резкое падение температуры до эвтектической точки (15.6 °C), сопровождающееся образованием жидкой фазы. Поскольку система находится в термостате с постоянной температурой 22 °C, далее следует нагрев до исходного значения (*рисунок 1*), что связано с экзотермическим процессом формирования твёрдых растворов. Данный процесс фиксируется на термограмме в виде характерного плато, соответствующего эвтектическому превращению.

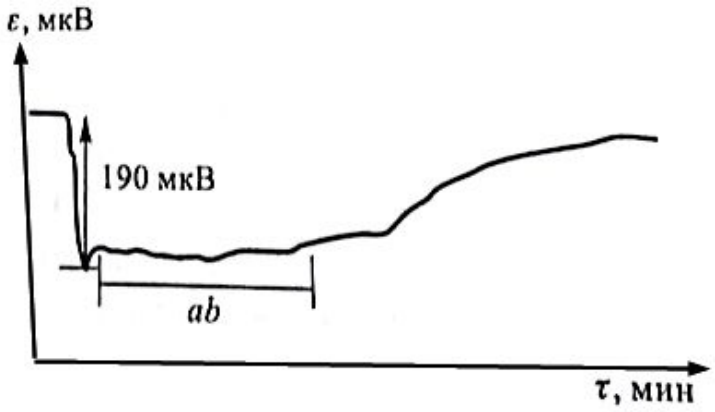

Рисунок 1 – Термограмма измени температуры КП в системе Ga–In [4]

Эвтектическая точка, определяемая по правилу фаз Гиббса

$$F=C-P+1=0F = C - P + 1 = 0F=C−P+1=0, \quad (7)$$

является нонвариантным состоянием: температура и состав строго фиксированы. Это обуславливает высокую чувствительность системы к локальным флуктуациям. Мы полагаем, что именно в этих условиях синхронизация колебаний достигает порога эффективности: система не может «уйти» от возмущения, и происходит фазовый переход. Таким образом, макроскопическая нонвариантность усиливает микроскопическую реализацию резонансного плавления.

Система Cu–Al. При контактном плавлении меди и алюминия образуются интерметаллиды (например, $CuAl_2$), которые дестабилизируют границу раздела, способствуя образованию жидкости при 550 °C, что ниже температуры плавления Cu (1085 °C) [4].

Аналогично, появление жидкой прослойки можно трактовать через локальное снижение энергии связи за счёт возбуждённой фононной моды

$$E_{\text{связи}}^{\text{эфф}} = E_{\text{связи}} - \Delta E_{\text{рез}}, \quad (8)$$

где $\Delta E_{\text{рез}}$ – вклад в энергию системы от резонансного возбуждения, способствующий разрыву решётки и образованию жидкости.

Выводы

Предложенная гипотеза дополняет классическую термодинамику фазовых переходов: диаграмма состояния задаёт координаты (температуру и состав), при которых система достигает энергетически выгодного резонансного состояния. На микроуровне это может выражаться в синхронизации и усилении атомных колебаний, вызывающих локальный фазовый переход. Таким образом, КП есть результат неравновесной реализации равновесного условия диаграммы.

Контактное плавление можно интерпретировать как процесс, в котором колебательная динамика и синхронизация на границе фаз приводят к образованию эвтектической жидкости при строго определённой температуре и составе, что, видимо, заложено природой при формировании реальных веществ.

Если же в контакте взаимодействующих веществ природой не заложена указанная синхронизация между их атомами (молекулами) – контактного плавления не происходит. Эта гипотеза согласуется с экспериментальными наблюдениями и углубляет наше понимание природы фазовых переходов за пределами классических равновесных моделей.

Таким образом, предложенный подход может быть использован как один из возможных критериев объяснения начальной стадии контактного (эвтектического) плавления.

Библиография

1. Саратовкин Д.Д., Савинцев П.А. Образование жидкой фазы в месте контакта двух кристаллов составляющих эвтектическую пару // ДАН СССР. 1941. Т. 33, № 4. С. 303–304.

2. Ахкубеков А.А., Орквасов Т.А., Созаев В.А. Контактное плавление. М.: Физматлит, 2008. 148 с.

3. Ахкубекова С.Н., Найда А.А. О взаимодействии разнородных металлов, приводящем к контактному плавлению // Современные наукоемкие технологии. 2013. № 6. С. 46–48.

4. Саввин В.С. Фазовые переходы первого рода в контакте низкоплавких металлов: дисс. ... докт. физ.-мат. наук. 2009. 303 с.

5. Гаврилов К.Н. Моделирование процесса жидкофазного спекания композиционных материалов, содержащих карбид титана, контактным плавлением и промышленная реализация полученных результатов: дисс. ... канд. техн. наук. Пятигорск, 2005. 140 с.

6. Лайпанов М.З. Контактное плавление и фазообразование макро-, микроразмерных систем медь-алюминий, никель-алюминий, никель-олово: дисс. ... канд. физ.-мат. наук. Нальчик: Кабардино-Балкарский государственный университет им. Х.М. Бербекова, 2019. 103 с.

7. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика. Т. 1: Механика. М.: Наука, 1988. 216 с.

8. Ашкрофт Н., Мермин Н. Физика твёрдого тела: в 2 т. Т. 1 / пер. с англ.; под ред. А.М. Косевича. М.: Мир, 1979. 399 с.

9. Воронова Г.А., Курзина И.А. Процессы на поверхности раздела фаз: учебное пособие. Томск: Изд-во Томского гос. ун-та, 2020. 130 с.

10. Хайрулаев М.Р., Айтукаев А.Д., Дадаев Д.Х., Расулов М.М. Исследование процессов контактного плавления методом автотермоЭДС // Вестник Дагестанского государственного технического университета. Технические науки. 2005. С. 65–72.

11. Ахкубеков А.А., Ахкубекова С.Н., Узденов Э.М**.** О роли влияния квантовых и резонансных взаимодействий атомов на механизм эвтектического контактного плавления // Известия Кабардино-Балкарского государственного университета. 2024. Т. XIV, № 4. С. 24–27.

12. Сытин В.Г. Молекулярная физика в жизни, технике и природе: учебное пособие для вузов. 2-е изд., стер. СПб.: Лань, 2024. 333 с.