МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ УКРАИНЫ
СУМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

На правах рукописи

Скляр Игорь Анатольевич

ТЕОРИЯ ИЕРАРХИЧЕСКИ СОПОДЧИНЕННЫХ СТРУКТУР В ТВЕРДОМ ТЕЛЕ

Специальность 01.04.07 - Физика твердого тела

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук

СУМЫ - 1994

…твенном университете

НАУЧНЫЙ РУКОВОДИТЕЛЬ доктор физико-математических наук, профессор А.И. Олемской

ОФИЦИАЛЬНЫЕ ОППОНЕНТЫ

доктор физико-математических наук С.И. Денисов

кандидат физико-математических наук, ведущий научный сотрудник С.П. Рощупкин

ВЕДУЩАЯ ОРГАНИЗАЦИЯ

Сумский государственный педагогический институт, г.Сумы

Защита состоится "30" июня 1994 г. в 15.00 час.
На заседании специализированного ученого совета К 22.01.01 при Сумском государственном университете

244007, г. Сумы, ул. Римского-Корсакова 2,
ауд. 216, корпус ЭТ

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Сумского государственного университета.

Автореферат разослан "27" мая 1994 г.

Ученый секретарь
специализированного совета,
кандидат физико-математических наук А.Я. Флат

АВ-30.538

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность работы. Современные методы получения новых материалов с контролируемыми микроскопическими параметрами (такими как средняя плотность и пространственное распределение дефектов, размер выделения новой фазы, распределение по размерам выделений и т.д.) основываются на использовании процессов, фиксирующих состояние системы, значительно удаленное от равновесия. В результате возникают метастабильные и лабильные структуры, времена существования которых в нормальных условиях много больше времени эксперимента. Сложность теоретического описания таких систем связана с существенной неравновесностью и многоуровневостью образующихся структур, что обусловлено разбиением системы на статистические подансамбли, отделенные друг от друга потенциальными барьерами. При этом система теряет свои эргодические свойства, а ее эволюция существенно зависит от иерархической связи между различными уровнями. Соответственно, теория, представляющая указанные особенности, приобретает неэргодический характер.

Цель работы состоит в теоретическом исследовании иерархических структур, возникающих в твердом теле вдали от равновесного состояния.

В работе поставлены и решались следующие задачи.

1. На основе метода связанных мод представить переход неустойчивой термодинамической системы из спинодального режима эволюции к бинодальному как появление слабой неэргодичности в гетерофазной макроструктуре, возникающей в результате фазового перехода первого рода.

2. С учетом пространственной дисперсии и размерности системы определить зависимость ширины области неэргодичности на фазовой диаграмме распадающегося бинарного сплава в зависимости от микроскопических параметров.

3. Исследовать иерархическую дефектную структуру, возникающую в процессе пластической деформации кристалла, на основе концепции ультраметрического пространства описать ее эволюцию.

Научная новизна

- Впервые учтена дисперсия параметров неэргодичности и исследовано влияние размерности пространства на неэргодичность.

- Впервые объяснено расхождение результатов машинного моделирования и существующих теорий распада.

- Впервые построена иерархическая теория эволюции многоуровневой дефектной структуры в процессе пластической деформации.

Научные положения, выносимые на защиту

1. Гетерофазная структура, образующаяся на поздних стадиях

эволюции неравновесного твердого раствора представляет двухуровневую неэргодическую систему атомов конденсированной среды, а развитая дефектная структура кристалла, подверженного интенсивному внешнему воздействию - многоуровневую неэргодическую систему.

2. При самосогласованном описании гетерофазной структуры учет пространственной дисперсии и рост размерности пространства приводит к значительному ослаблению неэргодичности.

3. Топологический дефект кристаллического строения представляет автолокализованную область новой фазы, обуславливающую изначальное нарушение эргодичности стохастической системы атомов. Выстраивание дефектов в иерархические структуры приводит к потере эргодичности на более высоких структурных уровнях.

4. Дефект модуля и эффекты памяти упруго-пластической среды определяются микроскопическими эффектами неэргодичности многоуровневой дефектной структуры.

Практическая ценность

Полученные в работе результаты позволяют определить ширину бинодальной области на фазовой диаграмме сплава по параметрам межатомного взаимодействия. Разработанная теория дефектной структуры позволяет представить процесс пластической деформации твердого тела при произвольных степенях приложенной нагрузки.

Апробация работы

Основные результаты работы были доложены и обсуждены на XIII Международной конференции по физике прочности и пластичности металлов и сплавов (Самара 1992); 1 Международном семинаре "Эволюция дефектных структур в металлах и сплавах" (Барнаул 1992); XI Украинской школе-семинаре "Спектроскопия молекул и кристаллов" (Киев 1993); Международной конференции "Физика на Украине" (Киев 1993), за цикл работ "Эволюция дефектной структуры твердого тела" Скляр И.А. 03.03.1993 награжден медалью АН Украины.

Публикации

По материалам диссертации опубликовано 4 оригинальных статьи в центральных журналах.

Структура и объем работы

Диссертация состоит из введения, 3 глав, заключения и списка литературы. Объем диссертации составляет 126 страниц, включая 22 рисунка, 2 таблицы и библиографию из 118 наименований.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении обоснована актуальность темы диссертации, приведено краткое содержание работы, сформулированы цели и задачи исследования и основные положения, выносимые на защиту.

В главе 1 излагается обзор экспериментальных данных по исследованиям структуры твердого тела и приведены сведения о существующих теоретических схемах описания кинетики фазового упорядочения в неравновесных термодинамических системах.

В разделе 1.1 представлены экспериментальные результаты по исследованию пространственных неоднородностей субмикронного масштаба, возникающих в процессе фазового упорядочения неравновесных систем, быстро переведенных из начального равновесного однофазного состояния в неравновесное, расположенное ниже линии спинодали. Анализ данных по распаду пересыщенных твердых растворов, в процессе которого происходит макроскопическое нарушение пространственной однородности и образование гетерофазных структур, позволяют сделать вывод о том, что на поздних стадиях распада наблюдается переход от гомогенного режима к гетерофазному.

Раздел 1.2 посвящен обзору полевых теорий кинетики формирования макроструктуры новой фазы на основе микроскопического подхода. Установлена связь между микроскопическим и макроскопическим уровнями фазового превращения. Поскольку последнее может протекать по двум возможным сценариям, то в разделе 1.2.1 исследуется непрерывный (спинодальный) механизм образования фазы, а в разделе 1.2.2 прерывистый (бинодальный). Рассмотрены случаи несохраняющегося и сохраняющегося параметров порядка. Последовательно изложены методы описания пространственно - временной зависимости поля параметра порядка, развитые Каном, Куком и Лангером. Показано, что соответствующий коррелятор разбивается на флуктуационную и конденсатную составляющие. Первая характеризуется обычной корреляционной длиной, вторая - макроскопическим масштабом L, задающим размер домена (выделения) новой фазы. Из наглядных соображений найден характер временной зависимости $L(t)$ для случаев несохраняющегося и сохраняющегося параметров порядка, а также для процесса коалесценции. Приведена схема, позволяющая представить критический зародыш фазы как солитонное решение полевого уравнения. Показано, что при росте амплитуды гомогенной флуктуации параметра порядка происходит ее замедление в движении как целого, и в бинодальной области образуется пара "кинк - антикинк", т.е. зародыш. Указано, что раздельное описание бинодального и спинодального режимов распада в представленных теориях является неудовлетворительным в том смысле, что в спинодальной области учитывается лишь изменение амплитуды параметра порядка в макроскопически однородной системе. Напротив, в бинодальной области принимается во внимание лишь изменение характерного размера гетерогенной системы при постоянном значении параметра порядка. В разделе 1.2.3 излагается развитая Мазенко полевая схема, позволяющая одновременно учесть указанные особенности. Показано, что важную роль играет наличие резкой межфазной границы. Отмечена явная неполнота подхода Мазенко, который, описывая лишь раннюю и позднюю предельные стадии, не затрагивает переходной.

Раздел 1.3 посвящен рассмотрению процессов формирования иерархически соподчиненной дефектной структуры в твердом теле в ходе пластической деформации. Пластическая деформация твердого тела представляется диффузией дефектной структуры в ультраметрическом пространстве состояний.

Глава 2 содержит микроскопическое описание простейших иерархически соподчиненных систем, содержащих два структурных уровня. Они представляют макроструктуру гетерофазной системы, образующейся при упорядочении или распаде твердых растворов. Здесь неэргодичность отражает наличие неоднородной макроструктуры новой фазы.

В разделе 2.1 изложен формализм, позволяющий представить неэргодичность системы. Он основывается на использовании обобщенной восприимчивости $\chi_k(t)$ для флуктуаций параметра порядка (k - волновой вектор, t - время). Отмечено, что обычная восприимчивость $\chi(t)=\lim_{k\to 0}\chi_k(t)$ имеет при больших t два различных предела: термодинамическое значение $\chi_0=\chi(t=\infty)$ и адиабатическое значение $\chi=\lim_{t\to\infty}\chi(t)$. Разница между ними определяет макроскопическую меру неэргодичности:

$$\Delta = T(\chi_0 - \chi) = T\lim_{z\to i0}\left[\chi(z = i0) - \chi(z)\right], \qquad (1)$$

где z - комплексная частота. В соответствии с данным определением вводится релаксационная функция $\varphi_k(z)$, связанная с параметром неэргодичности равенством

$$\Delta = \lim_{k\to 0}\Delta_k, \quad \Delta_k = T\lim_{z\to i0}\left[z\varphi_k(z)\right]. \qquad (2)$$

Метод связанных мод основан на представлении лапласовского образа коррелятора флуктуаций параметра порядка в виде цепной дроби Цванцига - Мори. Для описания неэргодичности достаточно учесть лишь два звена этой дроби, содержащие функцию памяти $M(t)$. Она представляет коррелятор обобщенной силы f, действующей на коллективную моду параметра порядка.

В разделе 2.2 содержится микроскопическое описание иерархически соподчиненных систем в гетерофазном твердом растворе. Используется анизотропная модель, описываемая гамильтонианом Гинзбурга-Ландау

$$H = \frac{A}{2}|\psi|^2 + \frac{B}{4}|\psi|^4 + \frac{\beta_\alpha}{2}|\nabla_\alpha\psi|^2. \qquad (3)$$

где ψ – комплексное поле параметра порядка, A, B, β_α – положительные параметры, по индексу α производится суммирование от 1 до 3. На основе метода связанных мод для лапласовского образа коррелятора параметра порядка, в пределе $z \to i0$ ($t \to \infty$) найдено уравнение самосогласования, определяющее параметр неэргодичности $\Delta_{\mathbf{k}}$:

$$\left(\frac{T\chi_{0\mathbf{k}}}{\Delta_{\mathbf{k}}} - 1 \right)^{-1} = \frac{6B^2\chi_{0\mathbf{k}}}{T} N^{-2} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \Delta_{\mathbf{k}_1} \Delta_{\mathbf{k}_2} \Delta_{\mathbf{k}-\mathbf{k}_1-\mathbf{k}_2}, \qquad (4)$$

$$\chi_{0\mathbf{k}} = \omega_{0\mathbf{k}}^{-2}, \quad \omega_{0\mathbf{k}}^2 = A + \beta_\alpha k_\alpha^2, \; A = \alpha\varepsilon T_*, \; \varepsilon = T/T_* - 1,$$

где T – температура, $\omega_{0\mathbf{k}}$ – частота мягкой моды.

В разделах 2.2.1 и 2.2.2 проводится исследование условия самосогласования соответственно в одноузельном приближении и приближении хаотических фаз. В рамках первого принебрегается зависимостью параметра неэргодичности от координаты, и задача сводится к определению величины $\Delta \equiv N^{-1}\sum_{\mathbf{k}}\Delta_{\mathbf{k}}$. В результате уравнение самосогласования (4) сводится к алгебраическому

$$x \left\{ x^3 - \frac{b(1+\varepsilon)}{\gamma + \varepsilon} x^2 + \frac{b}{6}(1+\varepsilon)(\gamma+\varepsilon) \right\} = 0, \qquad (5)$$

$$x \equiv (B/\alpha T_*)\Delta s^{-1/2}, \quad b = (B/\alpha^2 T_*)s^{-1/2}, \quad \gamma = \beta k_0^2/\alpha T_*$$

где s – отношение толщины межфазной границы к характерному размеру домена. Его решение показано штриховой линией на рис.1. Параметр неэргодичности и ширина бинодальной области ε_q уменьшаются с ростом величины межатомной связи γ и увеличиваются с ростом константы ангармонизма b.

В приближении хаотических фаз в уравнении (4) принимаем

$$\sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \Delta_{\mathbf{k}_1} \Delta_{\mathbf{k}_2} \Delta_{\mathbf{k}-\mathbf{k}_1-\mathbf{k}_2} = \Delta^2 \Delta_{\mathbf{k}},$$

$$x_q = \frac{\varepsilon + 1}{BT_*} \left(\frac{1}{\varepsilon + \gamma q^2} - \frac{\varepsilon + \gamma q^2}{6x^2} \right), \quad q = \frac{k}{k_0}, \quad x_q \equiv (B/\alpha T_*)\Delta_{\mathbf{k}} \qquad (6)$$

Обычным образом переходя от суммирования по зоне Бриллюэна к интегрированию, получаем уравнение самосогласования для среднего параметра неэргодичности x в пространствах размерностью $d=1,2,3$:

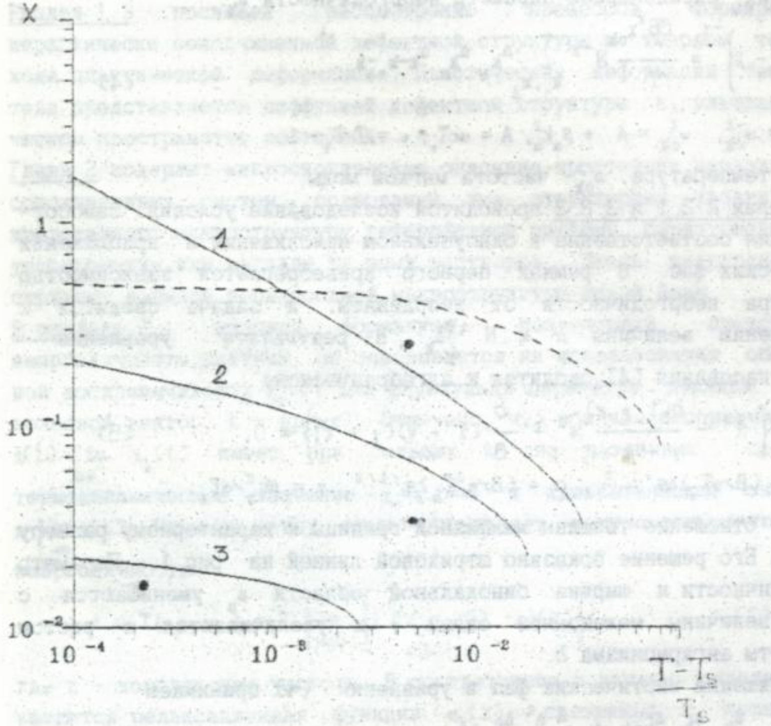

Рис.1. Зависимость безразмерного параметра неэргодичности от удаления от спинодали: штриховая - одноузельное приближение; сплошная - приближение хаотических фаз (цифры у кривых указывают размерность пространства).

$$\frac{x^3}{b(\varepsilon+1)} - x^2 A_d + B_d = 0$$

$$A_1 = \frac{\operatorname{arctg}\sqrt{\gamma/\varepsilon}}{2\pi\sqrt{\gamma\varepsilon}}, \qquad B_1 = \frac{\gamma/3 + \varepsilon}{12\pi};$$

$$A_2 = \frac{\ln(1+\gamma/\varepsilon)}{4\pi\gamma}, \qquad B_2 = \frac{\gamma/3 + \varepsilon/2}{12\pi}; \qquad (7)$$

$$A_3 = \frac{1 - \sqrt{\varepsilon/\gamma}\,\operatorname{arctg}\sqrt{\gamma/\varepsilon}}{2\pi^2\gamma}, \qquad B_3 = \frac{\gamma/5 + \varepsilon/3}{6\pi}$$

Численное исследование показывает (рис. 1), что учет дисперсии и увеличение размерности пространства приводит к существенному уменьшению ширины области неэргодичности. Это согласуется с данными последних работ групп Аксенова и Шиллинга по моделированию динамики распада в одномерной системе, где получена такого же порядка ширина области неэргодичности.

Глава 3 посвящена исследованию иерархических дефектных структур. Отмечено, что в процессе развитой пластической деформации плотность дефектов достигает столь высоких значений, что проявляются коллективные эффекты в их поведении. Это означает установление когерентной связи типа той, что обусловливает фазовые и кинетические превращения. Однако если для последних характерно гомогенное распределение, то установление когерентной связи в ансамбле дефектов одного структурного уровня приводит к автолокализованному образованию, играющему роль исходного структурного элемента на более высоком уровне. Данное отличие в коллективном поведении дефектов от обычной картины фазовых превращений обусловлено сильной неравновесностью ансамбля дефектов, возникающей в процессе развитой пластической деформации, в связи с чем реализуется не термостатическое, а кинетическое превращение.

В разделе 3.1 исследуется кинетика образования нового структурного уровня в рамках синергетической теории. Параметром порядка в данной системе является величина пластической деформации ε, сопряженным полем соответствующая сдвиговая компонента τ тензора напряжений $\hat{\sigma}$, а роль управляющего параметра играет давление p. В простейшем случае скорости изменения этих величин p, ε, τ задаются системой Лоренца

$$\dot{p} = (p_0 - p)/t_p - g_p\varepsilon\tau \ ,$$
$$\dot{\varepsilon} = -\varepsilon/t_\varepsilon + \tau/\eta_0 \ , \qquad (8)$$
$$\dot{\tau} = -\tau/t_\tau + g\,\varepsilon p \ .$$

Здесь первые слагаемые в правых частях представляют автономную релаксацию величин к стационарным значениям $\varepsilon = \tau = 0$, $p = p_0(T, \hat{\sigma}_{ext})$, T- температура, $\hat{\sigma}_{ext}$- тензор внешних напряжений, $t_{p,\varepsilon,\tau}$- характерные времена релаксации соответствующих величин. Последние слагаемые в (8) описывают соответственно уменьшение доли возбужденных структурных единиц при пластической деформации в поле сдвиговых напряжений, течение среды под действием напряжений и их нарастание при возбуждении структурных единиц в процессе пластической деформации ($g_{p,\tau}$, η_0 - положительные постоянные). В рамках принципа соподчинения система (8) сводится к уравнению Ландау-Халатникова $\dot{\varepsilon} = -\partial V/\partial\varepsilon$, где выражение

$$V = C\frac{\varepsilon}{2}\left\{1 - \frac{p_0}{p_c}\left(\frac{\varepsilon}{\varepsilon_g}\right)^{-2} ln\left[1 + \left(\frac{\varepsilon}{\varepsilon_g}\right)^2\right]\right\}, \ p_c = \frac{\mu_0}{A_\tau}, \ \varepsilon_g^{-2} = A_p A_\tau, \qquad (9)$$
$$A_\sigma = t_\sigma g_\sigma, \ \sigma = p, \tau$$

представляет синергетический потенциал (аналог свободной энергии в термодинамике). Из его вида следует, что при давлениях, превышающих критическое p_c, системе выгодно самопроизвольным образом приобрести некоторую спонтанную пластическую деформацию, что и означает образование нового структурного уровня. Стационарная величина спонтанной деформации обычным (корневым) образом зависит от разности $p-p_c$. При образовании нового уровня сдвиговая вязкость понижается от η_0 до значения $\eta = \eta_0(p/p_0 - 1)^{-1}$.

<u>В разделе 3.2.1</u> потенциальная энергия n-уровневой иерархической системы структурных единиц представляется в виде n-спупенчатой функциональной зависимости

$$U_1(r_1) = U_{r_1}\{\rho_0(r_0)\},$$
$$U_2(r_2) = U_{r_2}\{\rho_1(r_1)\}, \ldots, \qquad (10)$$
$$U_n(r_n) = U_{r_n}\{\rho_{n-1}(r_{n-1})\}.$$

Здесь $\rho_{\ell-1}(r_{\ell-1})$- плотность структурных единиц на $(\ell-1)$-ом уровне, иерархическая перестройка которого определяется энергией

$$E_\ell(r_\ell) = \int_{V_\ell} U_{\ell-1}(r_{\ell-1})\rho_{\ell-1}(r_{\ell-1})dr_{\ell-1}, \ \ell = 0, 1, \ldots, n-1 \qquad (11)$$

физически малого объема V_ℓ, положение которого задается гидродинамически определенной координатой r_ℓ следующего уровн ℓ.

Многоступенчатая зависимость (10) означает фрактальный характер потенциального рельефа $U_\ell(r)$. Он отражает иерархическую соподчиненность дефектов, для описания которой удобно использовать не чисто пространственную зависимость, а смешанную: быстрые осцилляции на макрорасстояниях $r_0 \le l_0$, характеризующих нижний уровень, по-прежнему представляются координатной зависимостью в обычном геометрическом пространстве, а дальнодействующие корреляции на длинах l_i, $i=1,2,\ldots n$, отражающие иерархическую связь дефектов, описываются в ультраметрическом пространстве состояний. Его метрика устроена таким образом, что если две скоррелированные области состояний имеют хотя бы одну общую точку, то одна из этих областей целиком входит в другую. Это означает, что точкам ультраметрического пространства, отвечают кластеры чистых состояний (ансамблей) дефектной структуры данного уровня. Они образуют кластер когерентно связанных состояний, соответствующих супердефекту на следующем уровне.

В разделе 3.2.2 строится стохастическая теория иерархической дефектной структуры. В рамках решеточного представления структурная единица, расположенная в узле l, характеризуется потоком j_ℓ^α в долине α. Суммарный поток дает скорость пластической деформации

$$\dot{\varepsilon} = \sum_\alpha w_\alpha \dot{\varepsilon}^\alpha, \quad \dot{\varepsilon}^\alpha = \sum_{\ell=1}^{N} j_\ell^\alpha , \qquad (12)$$

где w_α - вероятность реализации ансамбля α, N - число узлов. Характерно, что иерархические системы не относятся к самоусредняющимся - для макроскопически большого образца распределение w_α случайным образом изменяется от одного образца к другому. Это обстоятельство приводит к тому, что даже в одинаковых макроскопических условиях суммарная величина пластической деформации является невоспроизводимой. Физически это обусловлено случайным характером распределения отношения $l_0^\alpha / l^\alpha \sim w_\alpha$ характерных масштабов l_0^α, l^α на исходном и данном уровнях. В свою очередь эта нерегулярность связана с тем, что в неэргодических системах флуктуации начальных и граничных условий эволюции ансамбля дефектов способны привести к макроскопическим изменениям. Причиной такой чувствительности системы к начальным и граничным условиям является обусловленное потерей эргодичности разбиение конфигурационного пространства на изолированные области. Показано, что с количественной точки зрения поведение такой системы представляется параметром Паризи $q(x)$, задающим степень перекрытия термодинамических подансамблей дефектов с вероятностью x.

В разделе 3.2.3 проводится феноменологическое описание процесса релаксации иерархизованной дефектной структуры. Пространственновременное поведение в процессе ползучести твердого тела представляется коррелятором

$$S(r,t) = \sum_{\alpha\beta} \nu_\alpha \nu_\beta \, S_{\alpha\beta}(r,t), \; S_{\alpha\beta}(r,t) = \langle \dot\varepsilon^\alpha(r,t)\, \dot\varepsilon^\beta(0,0)\rangle . \qquad (13)$$

Удельный коррелятор $S_{\alpha\beta}(r,t)$ чистых состояний представляется динамической составляющей $S^0_{\alpha\beta}(r,t)$, отвечающей процессам, протекающим за микроскопические времена $t_0 \sim t_{p,\tau}$, и релаксационным вкладом $\tilde S_{\alpha\beta}(r,t)$, носящим дебаевский характер:

$$S_{\alpha\beta}(r,t) = S^0(r)\delta_{\alpha\beta}\delta(t) + \tilde S_\alpha(r) exp(-t/t_{\alpha\beta});$$
$$S^0(r) = \varepsilon(r,t_0)\varepsilon(0,0) \;, \quad \tilde S_\alpha(r) = \langle \varepsilon^\alpha(r,t_0)\, \varepsilon^\alpha(0,t_0)\rangle . \qquad (14)$$

Время $t_{\alpha\beta}$ объединения ансамблей α, β определяется расстоянием $d = d_{\alpha\beta}$ между состояниями α, β в ультраметрическом пространстве. Принимая его однородным и переходя к фурье-образу по координате r, получаем

$$\tilde S_k(t) = \tilde S_k \int w(d) exp\,(-t/t(d))\, dd ,$$
$$\tilde S_k = \sum_\alpha \nu_\alpha \tilde S_\alpha(k) \;, \; \tilde S_\alpha(k) = \int d\, r \tilde S_\alpha(k) e^{-ikr} . \qquad (15)$$

При плавном степенном распределении $w(d)$ в ультраметрическом пространстве логарифмическое нарастание $U(d)$ высоты фрактального рельефа дает степенное спадание коррелятора $\tilde S_k(t)$, степенное нарастание рельефа $U(d)$ приводит к более медленной логарифмической зависимости и, наконец, экспоненциальное распределение $U(d)$ дает двойную логарифмическую зависимость. Соответственно, при быстро спадающем экспоненциальном распределении $w(d)$ имеем последовательно закон Колерауша, квазистепенное и логарифмическое спадание. Такая ситуация, по-видимому, не зависит от ветвимости дерева Кейли и сохраняется при случайном ветвлении.

Сильно иерархические системы обнаруживают более замедленную кинетику, чем системы со слабой иерархией. Так, практически полная стабилизация дефектной структуры наблюдается в сильно иерархических системах с экспоненциальным нарастанием высоты рельефа $U(d)$. Если последнее обеспечивается за счет макроскопического размера кластеров дефектов, то сильная иерархическая зависимость реализуется при наличии дальнодействующих сил. Отсюда видно, что включение структурных уровней, отвечающих возрастающим значениям характерного масштаба l_i, способствует усилению иерархической соподчиненности в поведении дефектной структуры и, следовательно, ее стабилизации.

<u>В разделе 3.2.4</u> строится микроскопическая схема, позволяющая единым образом представить эволюцию дефектной структуры в процессе пластической деформации. Показано, что в режиме ползучести р ль

параметра неэргодичности играет необратимый отклик

$$\Delta = \lim_{t\to\infty} \delta\gamma(t) \;, \; \delta\gamma(t)=\gamma_1 - \gamma(t) \;, \tag{16}$$

определяемый разностью между статической восприимчивостью $\gamma_T = \gamma(t=0) = \partial\varepsilon/\partial\tau = \eta_1^{-1}$, сводящийся к обратной вязкости, и динамической $\gamma(t)$, сводящейся к временному коррелятору скоростей пластической деформации $\varepsilon(t)$. Фрактальная структура потенциального рельефа и обусловленное ею разбиение конфигурационного пространства на иерархическую систему кластеров являются причиной различия указанных восприимчивостей. Как и параметр стабильности $q(x)$, необратимый отклик $\Delta(x)$ медленно спадает со временем от максимального значения $\Delta_0 = \Delta(x=1)$, отвечающего разбиению конфигурационного пространства на минимальные кластеры, до минимального значения $\Delta_1 = \Delta(x=0) = 0$, отвечающего объединению всех кластеров. Феноменологическая теория дает описание медленной релаксации параметра стабильности структуры $q(t)$, поскольку его значение $q(x)$ при данной вероятности x определяет исследованный там коррелятор $S(t)$ согласно равенству

$$S(t) = 1 - \int_0^1 q(x)\, dx \;. \tag{17}$$

Эффективный гамильтониан дефектной структуры имеет вид

$$\mathcal{H} = \sum_l V(j_l) - \frac{t_\varepsilon}{2}\sum_{l,m} H_{lm}\, j_l j_m - t_\varepsilon \sum_n \tau_l\, j_l \;, \tag{18}$$

$$V(j) = \frac{A}{2} j^2 + \frac{B}{4} j^4 \;.$$

Первое слагаемое представляет "собственный" вклад каждого дефекта, характеризуемого потоком j_l, в энергию пластической деформации. Он сводится к синергетическому потенциалу, и аппроксимируется разложением Ландау. Второе слагаемое описывает неоднородность узельного распределения потока дефектов, третье - действие полей напряжений τ_l; $j_l = \mathbf{n}\mathbf{j}_l$ - составляющая потока вдоль направления течения $\mathbf{n}$. Существенная черта дефектной структуры состоит в нерегулярности, отражающейся в случайном характере параметров H_{lm} и поля τ_l.

Аналитическое рассмотрение задачи возможно лишь при образовании бесконечно большого числа структурных уровней. В рамках данного предположения исходим из уравнения Ланжевена для потоков j_l. Затем записываем стохастический функционал и усредняем его по разбросу величин H_{lm}. В рамках теории среднего поля в эффективном гамильтониане проводим стандартное расцепление, после чего получается уравнение для единственной величины $\xi(t) = t_\varepsilon j(t)$ в поле флуктуирующих сил $f(t)$ и самосогласованном поле τ:

$$Ct_{\varepsilon}\frac{\partial\xi}{\partial t}-\left(\frac{H}{t_{\varepsilon}}\right)^{2}\int\limits_{-\infty}^{t}G(t-t')\,\xi(t')\,dt'=-\frac{\partial V}{\partial\xi}+\tau(t)+f(t)\qquad(19)$$

$$\overline{\tau(t)\tau(t')}=\left[H/t_{\varepsilon}\right]^{2}S(t-t'),\quad\overline{f(t)f(t')}=\mathcal{X}^{2}t_{\varepsilon}\delta(t-t').$$

Здесь C - характерная упругая энергия, обусловленная внешним воздействием, $G(t)$ - запаздывающая функция Грина, $S(t)=t_{\varepsilon}^{2}\overline{S_{\ell}(k=0,t)=\xi_{\ell}(t)\xi_{\ell}(0)}$, H- характерное значение эффективной вязкости. Второе слагаемое в левой части (19) введено для учета эффектов памяти.

Использование представленой схемы приводит к следующим зависимостям для параметра стабильности q, вязкости γ^{-1} и необратимого отклика Δ от степени возбуждения C и дисперсии управляющего поля τ (см. рис. 2):

$$q_{0}=|\theta|,\quad q_{1}=(\tau/\tau_{k})^{2/3};$$

$$\frac{\gamma}{\gamma_{k}}=\frac{H}{\eta}=1-\frac{\Delta_{k}}{\gamma_{k}}q^{2},\quad\frac{\Delta}{\Delta_{k}}=\left[1-|\theta|^{-1}\left(\frac{\tau}{\tau_{k}}\right)^{2/3}\right]q^{2};$$

$$\frac{C_{c}}{C_{k}}=1-\left(\frac{\tau}{\tau_{k}}\right)^{2/3},\quad C_{k}=\frac{H}{\eta}\mu;\quad\frac{\tau_{c}}{\tau_{k}}=|\theta|^{3/2},\quad\tau_{k}=2\sqrt{3}\,B;\qquad(20)$$

$$\gamma_{k}=\frac{1}{H},\quad\Delta_{k}=\frac{3}{4}\left(\frac{\tau_{k}}{C_{k}}\right)^{2}\frac{1}{H}.$$

Здесь введены масштабы $C_{k},\tau_{k},\gamma_{k},\Delta_{k}$ измерения степени возбуждения, поля, восприимчивости и необратимого отклика (как и следовало, в условиях $\zeta\ll1$ применимости полученных выражений два последних масштаба сильно различаются: $\Delta_{k}/\gamma_{k}=(3B\eta/H\mu)^{2}\approx\zeta^{2}\ll1$ - дефект модуля намного меньше самого модуля). Характерно, что поле $\tau\neq0$ приводит к ненулевому конечному значению q_{1} параметра стабильности макроструктуры во всем интервале возбуждения C. Рост стабильности q, в свою очередь, увеличивает вязкость $\eta=\gamma^{-1}$ и степень неэргодичности Δ. Характерно, что включение внешней нагрузки способствует более интенсивному нарастанию неэргодичности ниже критической степени возбуждения C, хотя рост величины $\tau\neq0$ само значение Δ уменьшает. Такое поведение не имеет аналогов при обычных фазовых превращениях.

Степень возбуждения $\theta=C/C_{k}-1\approx C/\mu-1$ задает разницу между энергией C, запасенной единицей объема, и ее упругим пределом μ. Ее рост приводит к уменьшению эффективной вязкости η, тогда как поле τ ее увеличивает. И наконец, структурная релаксация, приводящая к медленному спаданию параметра q, уменьшает величину η, т.е. способствует пластическому течению. Описанные эффекты неэргодичности должны проявляться на эксперименте как эффекты структурной

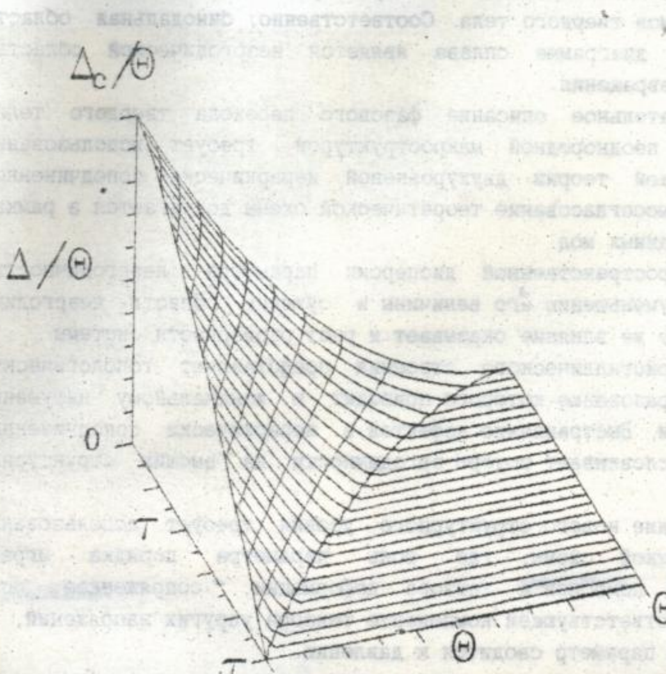

Рис. 2. Зависимость параметра неэргодичности системы дефектов от внешних условий.

памяти.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

1. Переход от спинодальной кин
рода к бинодальной приводит к
системы атомов твердого тела.
на фазовой диаграмме сплава является неэргодической областью фазового превращения.

2. Последовательное описание фазового перехода твердого тела, обладающего неоднородной макроструктурой, требует использования неэргодической теории двухуровневой иерархически соподчиненной системы. Самосогласование теоретической схемы достигается в рамках теории связанных мод.

3. Учет пространственной дисперсии параметра неэргодичности приводит к уменьшению его величины и сужению области неэргодичности. Такое же влияние оказывает и рост размерности системы.

4. Дефект кристаллического строения представляет топологический солитон, образование которого приводит к изначальному нарушению эргодичности. Выстраивание дефектов в иерархически соподчиненные системы обусловливает потерю эргодичности на высших структурных уровнях.

5. Образование нового структурного уровня требует использования синергетической схемы, где роль параметра порядка играет скалывающая компонента тензора деформации, сопряженное поле отвечает соответствующей компоненте тензора упругих напряжений, а управляющий параметр сводится к давлению.

6. Выстраивание дефектов в иерархические структуры объясняет дефект упругого модуля или сдвиговой вязкости, а также позволяет учесть наличие памяти пластически деформируемого твердого тела.

Основные результаты диссертации опубликованы в следующих работах:

1. Олемской А.И., Торопов Е.А., Скляр И.А. Самосогласованная теория перехода неустойчивой термодинамической системы от спинодальной кинетики к гетерофазной. //ЖЭТФ.-1991.- Т.100, вып.3.- С. 987-999.
2. Олемской А.И., Скляр И.А. Эволюция дефектной структуры твердого тела в процессе пластической деформации. //УФН.- 1992.- Т.162, N 6.- С.29-79.
3. Олемской А.И., Коплык И.В., Торопов Е.А., Скляр И.А., Флат А.Я. Синергетика эволюции макроструктуры новой фазы. //Изв.вузов, Физика.-1993.- N 1.- С.90-120.
4. Олемской А.И., Скляр И.А. О применимости метода связанных мод к модели структурного фазового перехода. //Изв.вузов, Физика.- 1993.- N 8.- С.124-125.