

**НАЦИОНАЛЬНАЯ АКАДЕМИЯ НАУК УКРАИНЫ
ДОНЕЦКИЙ ФИЗИКО-ТЕХНИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ
им. А.А. ГАЛКИНА**

На правах рукописи

МЕТЛОВ ЛЕОНИД СЕМЕНОВИЧ

УДК: 536.7:539.219.3

**СТРУКТУРНАЯ ПЕРЕСТРОЙКА
И ДИНАМИЧЕСКИЕ ЭФФЕКТЫ В ТВЕРДЫХ ТЕЛАХ**

01.04.07 – Физика твердого тела

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
доктора физико-математических наук.

Донецк-2010

Диссертация является рукописью.

Работа выполнена в Донецком физико-техническом институте им. А.А. Галкина Национальной академии наук Украины, г. Донецк.

Научный консультант: доктор физико-математических наук,
главный научный сотрудник ДонФТИ
им. А.А. Галкина НАНУ
Филиппов Александр Эльвинович

Официальные оппоненты: доктор физико-математических наук, профессор
Харченко Дмитрий Олегович,
Институт прикладной физики НАНУ, г. Сумы
главный научный сотрудник;

доктор физико-математических наук,
старший научный сотрудник
Мазилова Татьяна Ивановна,
ННЦ «Харьковский физико-технический
институт» НАНУ,
старший научный сотрудник;

доктор физико-математических наук, профессор
Юрченко Владимир Михайлович,
Донецкий физико-технический институт
им. А.А. Галкина НАНУ,
заведующий отделом электронных свойств
металлов

Защита состоится “ 14 ” октября 2010 г. в 14 часов на заседании специализированного ученого совета Д 11.184.01 при Донецком физико-техническом институте им. А.А. Галкина НАН Украины по адресу: 92114, г. Донецк, ул. Р.Люксембург 72.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке физико-технического института им. А.А. Галкина НАН Украины по адресу: 92114, г. Донецк, ул. Р.Люксембург 72.

Автореферат разослан “ 07 ” сентября 2010 г.

Ученый секретарь
специализированного ученого совета
Д 11.184.01, к.ф.-м.н, с.н.с.



Т.Н. Тарасенко

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы. Современные достижения науки во многом вызваны потребностями развития технологий, необходимостью улучшения свойств существующих и создания новых материалов, в том числе и наноматериалов. Прогресс в создании, например, металлов одновременно с высокими прочностными и пластическими свойствами зависит от уровня понимания физических процессов, протекающих при их получении и обработке. Большое значение для развития технологий имеют теоретические методы описания и моделирования физических процессов при интенсивных внешних воздействиях на твердые тела, при которых они находятся в сильно неравновесных условиях.

Важную роль в физических процессах, ответственных за формирование свойств твердых тел, играют структурные дефекты. Они образуют сложную иерархическую организацию твердого тела, начиная с атомарного уровня, например, вакансии, атомы замещения и внедрения, и т.д. и заканчивая макроскопическим уровнем, где образуются микропоры и микротрещины. Описание столь различных объектов трудно осуществить в рамках одной концептуальной системы. Поэтому приходится прибегать к совокупности так называемых минималистических моделей [1*], которые базируются на упрощенных потенциалах взаимодействия и, фокусируясь лишь на наиболее существенных степенях свободы, стремятся воспроизвести наиболее важные черты изучаемых объектов. Не смотря на их простоту, такие модели позволяют объяснить достаточно сложные явления и к настоящему моменту внесли существенный вклад в формирование концепций, на которых основывается описание рассматриваемых в настоящей работе систем.

Исторически одним из первых и простейших минималистических подходов является численное моделирование одномерной нелинейной цепочки. Начиная с классических работ Ферми, Паста, Улама [2*], помимо фундаментальной проблемы «термализации» динамических систем, модель нелинейной цепочки интенсивно используется для исследования устойчивости движения к длинноволновым и коротковолновым тепловым флуктуациям, проявляющихся в специфическом спектре теплового шума.

Согласно общим представлениям кинетической теории [3*] структурная перестройка твердого тела активизируется воздействием высокоэнергетических тепловых флуктуаций, которые присутствуют на периферии тепловых распределений. Их наличие может привести не только к сдвигу точки неравновесного структурно-фазового перехода, но и к появлению качественно новых структурных переходов [4*].

Нелинейная одномерная цепочка проста и удобна для моделирования. Однако, для моделирования большинства реальных, пространственно распределенных систем она оказывается слишком упрощенной и

практически малопригодной. Поэтому прибегают к следующим уровням минималистических моделей, применимых к двух- и трехмерным системам. В частности, большое значение имеет моделирование методами молекулярной динамики (МД) крупных статических дефектов структуры (для краткости ниже, структурные дефекты) таких, как дислокации и границы зерен в наноматериалах [5*]. Энергия дефектов зависит от общего состояния системы и может быть различной в равновесном и неравновесном состоянии. Энергия крупных дефектов может зависеть также от сегрегации на них более мелких дефектов, а кроме того от сегрегации химических компонентов из объемных фаз [6*].

В то же время, методами МД можно охватить относительно небольшие по объему материальные объекты (порядка 100-150нм). Для моделирования более крупных объектов необходимо прибегнуть к дальнейшей редукции описания, а именно – к феноменологическому описанию структурных дефектов методами физической кинетики. Для таких моделей по-прежнему важен учет тепловых флуктуаций. Однако, масштаб учитываемых флуктуаций может зависеть от скорости протекания процессов. В частности, крупномасштабные флуктуации оказываются существенными при относительно медленном протекании изучаемого процесса. Для быстропротекающих процессов (таких, например, как интенсивная пластическая деформация [7*]), в системе не успевают сформироваться флуктуации соответствующего масштаба, и при ее описании можно ограничиться теорией среднего поля.

Простейшим структурным дефектом является *вакансия*. Во многих случаях при статистическом и термодинамическом описании вакансий ограничиваются использованием конфигурационной энтропии [8*] или химического потенциала [9*] в линейном приближении разложения внутренней энергии по плотности вакансий. Это ограничение в некоторых случаях сохраняется и в кинетическом уравнении Ландау-Халатникова [10*]. Получение новой формы кинетических уравнений свободной от этого ограничения является одной из задач настоящей работы.

Таким образом, актуальным является *построения максимально компактного и вместе с тем достаточно общего варианта кинетики, который с единых позиций позволил бы промоделировать различные структурные уровни твердого тела с дефектами и который можно было бы использовать для описания таких явлений, как интенсивная пластическая деформация, автоколебательные переходы в аморфных сплавах, явление stick-slip в смазках и т.д.* Основой такого подхода должно быть построение иерархии минималистических моделей, в которых методы броуновской динамики, физической кинетики и неравновесной термодинамики взаимно дополняли и сменяли друг друга по мере огрубления описания на различных масштабах.

Связь работы с научными программами, планами, темами. Основная часть диссертационной работы выполнена в рамках исследований, проведенных в физико-техническом институте в соответствии с такими государственными научно-исследовательскими работами (НИР):

– НИР 0197U008908 «Формирование структурных гетерогенных тел и управление их свойствами в разных напряженно-деформированных состояниях», 1997-2000pp.;

– НИР Государственного фонда фундаментальных исследований Украины 0197U014943 «Исследование кинетики структурной релаксации, механических свойств и хрупко-пластического перехода в хрупких материалах, обработанных импульсами слабого магнитного поля», 1997-1999pp.;

– НИР 0100U003850 «Закономерности формирования и эволюции наноструктурного состояния твердых тел», 2000-2003pp.;

– НИР 0103U005973 «Физика неравновесных состояний наноструктурных материалов, полученных при высоких давлениях», 2003-2006pp.;

– НИР 0102U003201 «Физика новых состояний конденсированных систем, сформированных в условиях высоких давлений», 2003-2006pp.;

– НИР 0107U005898 Государственного фонда фундаментальных исследований Украины «Статистическая нелинейная теория динамических фазовых режимов граничного трения в наноустройствах», 2007-2008pp. (ответственный исполнитель).

– НИР 0103U005973 «Физика формирования объемных наноматериалов путем структурной перестройки твердых тел при высоких давлениях», 2006-2009pp.;

– НИР 0108U005026 Совместный научный проект НАН Украины и Российского фонда фундаментальных исследований «Деформационные схемы получения и свойства массивных наноструктурных и УМЗ материалов», 2008-2009pp. (ответственный исполнитель).

– НИР 0109U007301 Совместный научный проект Государственного фонда фундаментальных исследований Украины и Российского фонда фундаментальных исследований «Структурное состояние и механическое поведение наноструктурных металлов и сплавов», 2009-2010pp. (научный руководитель).

Диссертационная работа является также частью исследований, выполненных в Украинском государственном научно-исследовательском и проектно-конструкторском институте горной геологии, геомеханики и маркшейдорского дела в соответствии с такими государственными научно-исследовательскими работами (НИР):

– НИР 0102U007319 «Создание теоретической и методологической основы современных технологий шахтной геофизики», 2004-2007pp.; (ответственный исполнитель).

– НИР 0108U003284 Совместный научный проект НАН Украины и Российского фонда фундаментальных исследований «Исследование особенностей распространения природных и наведенных геофизических полей на участках активизации опасных геодинамических процессов для разработки предложений в технологию геофизического мониторинга территорий с повышенным техногенезом», 2007-2009рр. (ответственный исполнитель).

Цель и основные задачи исследований. Целью диссертационной работы является исследование кинетики структурных дефектов различных уровней в условиях интенсивного внешнего воздействия на твердые тела с привлечением методов молекулярной динамики и неравновесной термодинамики.

Для достижения поставленной цели необходимо было решить следующие задачи:

- На примере нелинейной цепочки *исследовать* особенности тепловых флуктуаций в условиях высоких температур и давлений.
- На примере 2D и 3D моделей *исследовать* взаимное влияние генерации структурных дефектов и теплового движения.
- *Исследовать* динамику движения дислокаций при различных способах внешнего воздействия с учетом смены структурных состояний (ширины) их ядер.
- *Исследовать* кинетику структурных дефектов на двух- и трехмерных моделях на атомарном уровне при различных внешних воздействиях на систему (одноосное растяжение, сжатие, сдвиговое деформирование и наноиндентирование кристаллитов различной геометрии).
- *Развить* метод макроскопических частиц и с его помощью *изучить* влияние структурных ослаблений на возбуждение упругих волн при соударении твердых тел.
- На примере модели твердого тела с вакансиями *обобщить* систему кинетических уравнений производства дефектов и энтропии симметричную относительно использования свободной и внутренней энергии.
- *Описать* кинетику структурно-фазовых переходов в металлах при интенсивных воздействиях, автоколебательные переходы в аморфных сплавах, явление stick-slip в сверхтонких смазках, гистерезисные явления в γ - ϵ переходах в армкожелезе, кинетику разрушения квазихрупких материалов.

Объект исследования – физические процессы, которые протекают при интенсивном внешнем воздействии на твердые тела.

Предмет исследования – механизмы структурной перестройки и кинетика разрушения твердых тел, релаксационные явления, возникающие вследствие интенсивного внешнего воздействия на твердые тела.

Методы исследования. Для описания динамических процессов, протекающих при интенсивном воздействии на твердые тела, использованы

численное моделирование на базе молекулярной и броуновской динамики с привлечением метода макроскопических частиц. Кроме того, применены математические методы неравновесной термодинамики и эволюционных уравнений Ландау, а также общие методы теоретической, статистической физики и нелинейной теории необратимых процессов.

Научная новизна полученных результатов состоит в следующем:

1. Методом молекулярной динамики **обнаружено** и **исследовано** явление спонтанной концентрации (локализации) энергии в высокоэнергетических солитоноподобных возбуждениях в нелинейных цепочках, которые при высоких температурах и давлениях определяют другой уровень организации теплового движения.

2. Аналогичные методы распространены на исследование динамики 2D и 3D решеток, для которой впервые **показано**, что при интенсивном внешнем воздействии в тепловом движении за счет динамических переходных процессов в момент генерации дислокаций могут быть выделены равновесная (высокочастотная) и неравновесная (низкочастотная) составляющие.

3. На этих же моделях проанализирована динамика смены состояний дислокационных ядер и **выяснена** возможная роль дислокаций с локализованными ядрами в формировании неравновесных границ нанозерен.

4. С привлечением методов компьютерного моделирования **обнаружена** принципиальная возможность высокоскоростного (до 0.4 от скорости звука) перемещения высокоугловых границ нанозерен при одноосном растяжении нанопроволок до больших степеней деформации, явление текстурного слияния нанозерен и формирования структур близких структурам идеальных кристаллических усюв.

5. **Развита** модель макроскопических частиц, допускающая редуцированное описание ослабленных связей в твердых телах, на масштабах, для которых прямое моделирование методами молекулярной динамики оказывается слишком затратным или практически неосуществимо. С ее помощью осуществлено численное моделирование задачи о возбуждении упругих волн при соударении двух твердых тел.

6. На базе общих положений термодинамики и статистической физики **предложена** и протестирована на конкретных примерах **новая форма уравнений кинетики** структурных дефектов в виде симметричном относительно использования свободной и внутренней энергии.

7. **Установлено** взаимное сходство процесса формирования мелкозернистой стационарной (предельной) структуры в металлах при интенсивном воздействии и структурных фазовых переходов. Используя соответствующие математические аналогии, впервые **построена** полная кривая упрочнения металла, которая включает стадию Холла-Петча,

линейную стадию и стадию с квадратичным упрочнением относительно размера зерна.

8. Впервые *описаны* автоколебательные переходы между нанокристаллическим и аморфным состоянием при интенсивном деформировании аморфных сплавов с учетом их упрочнения и разупрочнения. Развитый подход применен также к построению самосогласованной динамической модели формирования макроскопических периодических зональных структур разрушения вокруг цилиндрических полостей в однородном поле больших гидростатических давлений.

Практическая значимость полученных результатов. Практическая значимость полученных результатов определяется применимостью выводов и рекомендаций теории к более глубокому пониманию закономерностей интенсивной пластической деформации, а также предсказанием возможности существования нескольких стационарных структурных состояний с различным средним размером зерен. Практическая значимость определяется также применимостью выводов теории к разработке рекомендаций существенного повышения устойчивости технических сооружений в условиях больших гидростатических сжатий, а также рекомендаций по оптимизации возбуждения упругих волн в сейсмических приложениях. Результаты работы использовались в государственных и хозяйственных темах, выполнявшихся в соответствии с планами НИР ДонФТИ и УкрНИМИ.

Личный вклад соискателя. Работы [1, 3, 5, 7, 11,16, 17, 19, 20, 22-24, 27, 29-35, 37-44, 46, 47, 49-51, 53-56, 58-63] посвященные созданию программного обеспечения по методу молекулярной динамики, проведению на их основе численных расчетов, постановки компьютерных экспериментов, а также формулированию положений неравновесной эволюционной термодинамики и частных моделей и выводов, которые из нее следуют, выполнены лично автором. В соавторстве с Морозовым А.Ф. выполнена часть исследований по явлению зонального разрушения твердых тел и моделированию методом молекулярной динамики [2, 4, 6, 8-10, 12, 13, 28, 36]. Еремейченковой Ю.В. у работах [14, 28] по нелинейной цепочке выполнена часть компьютерных экспериментов. В соавторстве с Варюхиным В.Н., Ефросом Б.М., Ефрос Н.Б. [52] выполнены исследования по кинетике границ субзерен, где им принадлежит интерпретация экспериментальных данных. У работе [57] совместно с Ефросом Б.М. выполнена постановка задачи по модели γ - ϵ перехода в сплавах железа, и которому принадлежат экспериментальные данные, с которыми сравнивались теоретические гистерезисные кривые. В работе [Метлов Л.С. Квазипериодические процессы при МПД / Л.С. Метлов, Е.Г. Пашинская // Междунар. конф. «Современные проблемы физики металлов», Киев, 7-9 октября 2008 г.: сборн. тез. – Киев: Ин-т металлофизики, 2008. – С. 284] с Пашинской Е.Г. обсуждалась постановка задачи по модели колебательной

эволюции свойств твердых тел с учетом памяти о прошлых состояниях. В работе [15] совместно с Белоусовым Н.Н. проведены исследования на моделях нанопроволок, где Белоусову принадлежит экспериментальная часть исследований. Термодинамическая модель смазки разрабатывалась совместно с Хоменко А.В. и Ляшенко Я.А. в работе [64], где ими выполнена часть расчетов. Ими также предложена важная идея учета в модели сдвиговой дилатансии смазки. С Анциферовым А.В. в работах [18] были совместно выполнены исследования по методу макроскопических частичек, где ему принадлежит выбор параметров модели приближенных к реальным условиям эксперимента. Кроме того, совместно с ним выполнены исследования по термодинамике разрушения квазихрупких тел [21, 45], где с ним обсуждалась общая постановка задачи. В тезисах [48] совместно с Варюхиным В.Н. и Анциферовым А.В. была рассмотрена идея двухуровневой модели с учетом кинетики микротрещин в процессах интенсивной пластической деформации. В диссертацию включена только та часть совместных исследований, которые выполнил или внес существенный вклад лично соискатель. Частично исследования по автоколебательному переходу в аморфных сплавах выполнено с обсуждением с Глезером А.М. и Мышляевым М.М. Из результатов работы [26], выполненной в соавторстве с Мышляевым М.М., в диссертационную вошли только теоретические результаты, выполненные исключительно соискателем. В работе [25], выполненной в соавторстве с Глезером А.М., последнему принадлежит написание экспериментальной части статьи и выводы общего характера. Автором диссертации сформулированы все научные положения, которые выносятся на защиту.

Апробация результатов диссертации. Материалы диссертации докладывались и обсуждались на конференциях: VIII-й Всероссийский съезд по теоретической и прикладной механике (Пермь, 2001); Международная конференция “Бернштейновские чтения по термомеханической обработке металлических материалов” (Москва, 2001); Международный семинар “Структурные основы модификации материалов методами нетрадиционных технологий” (МНТ VIII, Обнинск, 2005, 2007, 2009); Международная конференция “Современное материаловедение: достижения и проблемы” (Киев, 2005); Международная научная конференция “Актуальные проблемы физики твердого тела” (Минск, 2005, 2007); XVI и XVII Петербургские Чтения по проблемам прочности (Санкт-Петербург, 2006, 2007); III-я и IV-я евразийская научно-техническая конференция “Прочность неоднородных структур” (Москва, 2006, 2008); Международная конференция “Физика конденсированного состояния вещества при низких температурах” (Харьков, 2006); IV-я международной конференции “Фазовые превращения и прочность кристаллов” (Черноголовка, 2006); 9-я и 10-я международная конференция “Высокие давления – 2006. Фундаментальные и прикладные аспекты” (Судак, Крым,

2006, 2008); Первая, четвертая и пятая международная конференция “Материалы и покрытия в экстремальных условиях: исследования, применения, экологически чистые технологии производства и утилизация изделий” (Жуковка, Большая Ялта, Крым, 2000, 2006, 2008); 3th international conference on materials science and condensed matter physics (Chisinau, 2006); International meeting clusters and nanostructured materials (CNM's2006, Uzhgorod, 2006); Первая, вторая и третья международная конференция “Деформация и разрушение материалов” (Москва, 2006, 2007, 2009); Международная конференция “Мезоскопические явления в твердых телах” (Донецк, 2007); IV международная школа-конференция “Микромеханизмы пластичности, разрушения и сопутствующих явлений” (MPFP-2000, Тамбов, 2007); International symposium “Bulk nanostructured materials: from fundamentals to innovations”(Ufa, 2007); International conference “Functional Materials” (ICFM'2007, Partenit, Crimea, Ukraine, 2007); Международная конференция HighMatTech (Киев, 2007, 2009); Международная конференции “Наноразмерные системы. Строение, свойства, технологии” (НАНСИС-2007, Киев, 2007); Первая международная конференция “Наноструктурные материалы – 2008: Беларусь-Россия-Украина” (Минск, 2008); Международная конференция «Современные проблемы физики металлов» (Киев, 2008); Всероссийская научно-техническая конференция с международным участием “Ультрадисперсные порошки, наноструктуры, материалы” (Красноярск, 2009).

Результаты, полученные в диссертационной работе, докладывались на объединенных теоретических семинарах Донецкого физико-технического института, на объединенном научном семинаре НИЦ ХФТИ, г. Харьков, на теоретическом семинаре института прикладной физики НАН Украины, г. Сумы.

Публикации. По теме диссертации опубликовано: две монографии, 25 работ в периодической печати, 8 статей в сборнике научных трудов, 32 тезисов докладов.

Структура и объем работы. Диссертация состоит из введения, обзора научной литературы, оригинальной части, общих выводов, списка использованных источников и изложена на 315 страницах машинописного текста. В каждой главе своя нумерация параграфов, пунктов, формул, рисунков. Библиография содержит 425 наименований.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ ДИССЕРТАЦИИ

Во **введении** приведено обоснование актуальности работы, сформулированы цель и задачи исследований. Описана связь проведенных исследований с научными программами Донецкого физико-технического

института, личный вклад соискателя. Изложена научная новизна и практическая ценность полученных результатов, приведены сведения об апробации работы и о публикациях по теме диссертации, указан объем работы.

В первой главе «Анализ физических представлений о механизмах перестройки структуры и разрушении твердых тел» рассмотрены существующие проблемы теоретического описания кинетики дефектов структуры, как неравновесного процесса. Дан анализ современных представлений о структуре твердого тела, которая помимо собственно кристаллографической структуры, включает также иерархию ее дефектов (далее структурные дефекты), – динамические дефекты (фононы, нелинейные волны), точечные дефекты, линейные дефекты (дислокации, дисклинации), планарные дефекты (границы зерен и субзерен) и т.д. Констатировано, что описание всей совокупности перечисленных выше типов дефектов трудно осуществить в рамках одной концептуальной системы, в связи с чем, приходится прибегать к последовательности отдельных соподчиненных «минималистических» моделей [1*]. Отмечено также, что простейшей в этом ряду является нелинейная цепочка.

На примере нелинейных цепочек, а также 2D решеток методами молекулярной динамики проанализированы динамические дефекты – тепловые колебания и флуктуации. Показано, что для перестройки структуры твердого тела важны эффекты самолокализации энергии теплового движения в нелинейных долгоживущих солитоноподобных волнах. Указано, что помимо неподвижных и блуждающих возбуждений возможно существование акустических волн, которые также демонстрируют эффект самолокализации и могут концентрировать в себе значительную долю общей энергии нелинейной цепочки.

Осуществлен последовательный переход к двух- и трехмерным версиям динамических моделей, которые могут быть использованы для более адекватного описания структурных дефектов в реальных телах. Рассмотрены ранее известные примеры анализа методами молекулярной динамики простейших линейных дефектов (дислокаций). Показана важность динамической смены структурных состояний ядер дислокаций для формирования свойств наноматериалов, в том числе их влияние на прочностные свойства. Рассмотрены другие эффекты, которые могут быть изучены методами молекулярной динамики, в числе которых – процессы наноиндентирования и процессы рекристаллизации.

Для исследования кинетики структурных дефектов на больших масштабах рассмотрен последующий ряд минималистических моделей, проанализированы существующие макроскопические теории описания структурных дефектов твердого тела, которые базируются на конститутивных соотношениях, неравновесной термодинамике внутренних

переменных, эволюционных уравнениях Ландау, статистических методах описания и т.д.

Во **второй главе** «Особенности теплового движения в нелинейных цепочках и 2D решетках» методом компьютерного эксперимента показано, что в нелинейных цепочках в условиях близких к тепловому равновесию при высоких температурах и давлениях спонтанно возникают долгоживущие солитоноподобные волны (рис. 1б, в), которые можно рассматривать, как высокоэнергетические тепловые флуктуации. На начальной стадии их амплитуда нарастает, затем эта тенденция сменяется

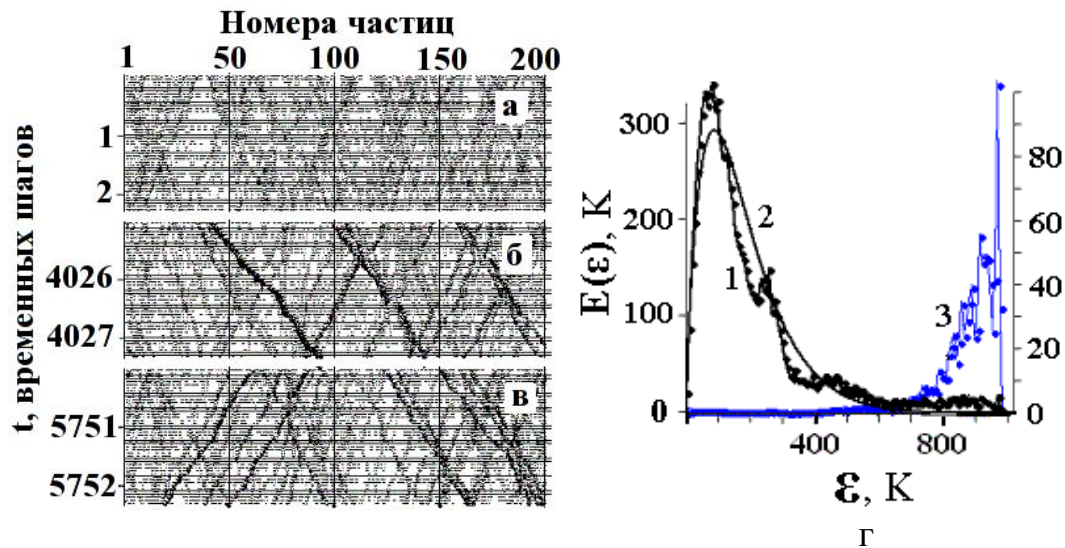


Рис. 1. Пространственно-временное (а-в) и энергетическое (г) распределение частиц в нелинейной цепочке по данным компьютерного эксперимента (1), теоретическая кривая Гиббса (2) и отношение экспериментального распределения к теоретическому (3). Случаи (а-в) относятся к разным временным окнам.

убыванием, но при этом в системе появляются новые волны, так что спектральный состав возмущений непрерывно обогащается и в системе всегда сохраняется некоторое количество высокоэнергетических флуктуаций. Нами была исследована релаксация различных начальных неравновесных состояний, как в форме длиннопериодических возмущений, рассмотренных еще в численных экспериментах Ферми-Паста-Улама и Забуски-Крускала, так и в форме локализованных короткопериодических начальных возмущений, – π -сигнал и «белый шум». Наиболее интересные результаты получены в последнем случае, для которого в плотности распределения по энергиям наблюдается формирование дополнительных пиков в высокоэнергетической области (кривая 1 на рис. 1г). Наличие таких пиков свидетельствуют о регулярном отклонении системы от равновесного распределения Гиббса (кривая 2 на рис. 1г). Относительное отличие может достигать одного-двух порядков (кривая 3 на рис. 1г).

Возникновение пиков в области высоких энергий было ассоциировано со сменой закона распределения частиц по энергиям с экспоненциального (кривая 1, рис. 2а) на степенной (кривые 2). В двойном логарифмическом масштабе этот участок хорошо аппроксимируется прямой линией (прямая 3, рис. 2б).

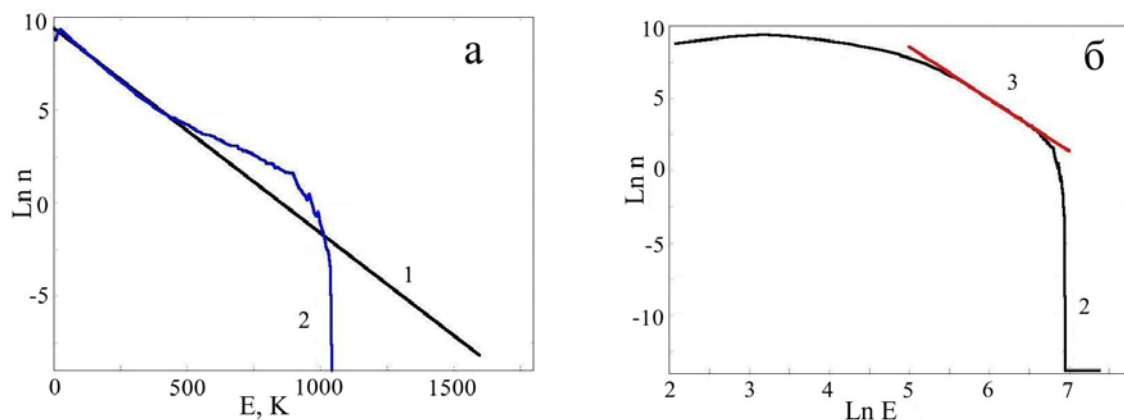


Рис. 2. Распределение частиц по энергиям в логарифмическом масштабе (а) и в логарифмическом масштабе по обеим переменным (б) для теоретического распределения Гиббса (1), по данным компьютерного эксперимента (2), по степенному закону распределения (3).

В третьей главе «Структурные перестройки на атомарном и макроскопическом уровне» рассмотрен следующий уровень минималистических моделей размерности 2D и 3D. В качестве конкретного приложения изучен один из вариантов разделения системы на равновесную и неравновесную подсистемы. А именно, промоделировано вдавливание с постоянной скоростью 5м/с трехатомного индентора в атомарный 3D кристаллит меди ГЦК структуры. Было обнаружено, что в такой системе периодически (во времени) возникают дислокации, о появлении которых можно судить по изломам на графике полной внутренней энергии (кривая 1, рис. 3а), а также по скачкам на графике полной потенциальной энергии (кривая 2, рис. 3а).

На рис. 3а приведен также график скорости одной из произвольно выбранных частиц системы, который можно рассматривать как запись теплового движения данной частицы (кривая 3). Тепловое движение представляет собой высокочастотный сигнал, частота которого близка частотам собственных колебаний отдельных межатомных связей. Спектр сигнала формируется интерференцией большого количества высокочастотных волновых пакетов (область б на рис. 3б.). В области низких частот в нем выделяется интенсивный пик 7, который заметно нарушает в среднем равномерное распределение тепловых колебаний в частотной области.

Низкочастотная цифровая фильтрация этой записи методом скользящего среднего с интервалом осреднения 100 временных шагов позволяет выделить низкочастотные затухающие со временем колебательные пакеты (кривые 4, 5 на рис. 3а). Возникновение этих пакетов совпадает с моментом генерации в системе крупномасштабных возбуждений (см. кривые 1, 2 для полной внутренней и потенциальной энергии), которым при визуальном анализе кристаллической структуры могут быть сопоставлены акты рождения новых дислокаций.

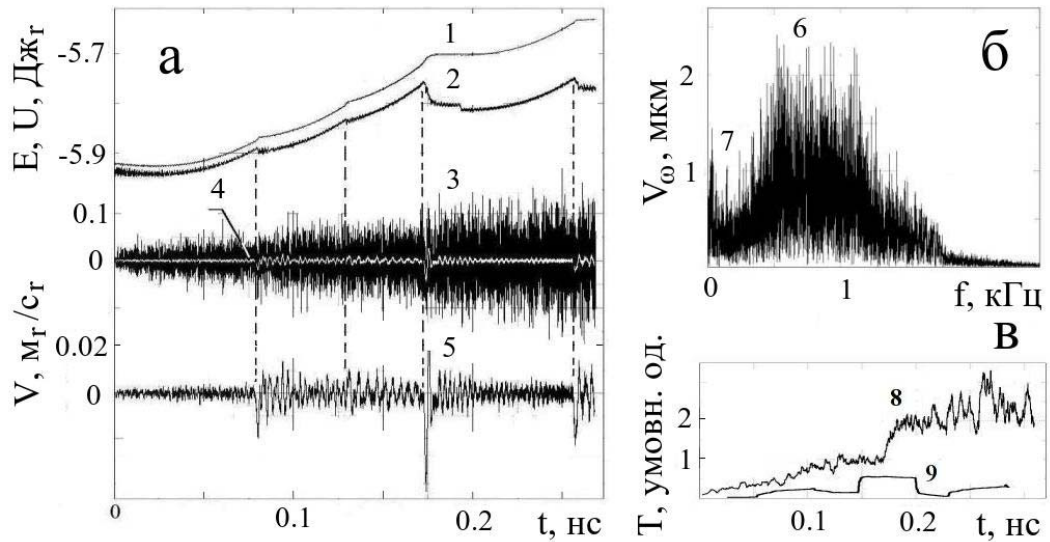


Рис. 3. Временная развертка (а, в) внутренней энергии (1), потенциальной энергии (2), скорости движения частицы (3), скорости частицы после низкочастотной фильтрации (4, 5), аналога равновесной температуры (8), аналога неравновесной температуры (9) и спектр скорости частицы (б) в области равновесного (6) и неравновесного (7) распределения.

Описанные колебания представляют собой акустическую эмиссию, обусловленную динамическими переходными процессами при рождении и движении дислокаций. С другой стороны, их можно рассматривать, как неравновесные низкочастотные фононы, амплитуда которых значительно превосходит амплитуду равновесных фононов того же частотного диапазона (пик 7 на рис. 3б). Таким образом, низкочастотные колебательные пакеты, наблюдаемые на кривых 4 и 5, могут быть проинтерпретированы как вклад неравновесной подсистемы в тепловое движение системы.

В результате рассеяния энергия низкочастотных колебаний переходит в энергию равновесной подсистемы, и соответствующие колебания экспоненциально затухают. Это есть процесс релаксации неравновесного состояния, в итоге которого энергия низкочастотных волн переходит в энергию равновесного теплового движения, что приводит к росту

равновесной температуры и энтропии. Вычитая из общего сигнала для скорости вклад неравновесных колебаний и усредняя квадрат полученной относительной скорости (кинетической энергии) по характерному времени релаксации, можно вычислить температуру равновесной подсистемы. Из полученной кривой δ на рис. 3в видно, что полученная таким образом температура (энергия) растет по мере перехода неравновесных низкочастотных колебаний в равновесное высокочастотное движение. Поскольку низкочастотное волновое или колебательное движение отличается от высокочастотного только масштабом, то, повторяя аналогичную процедуру для большего временного интервала, можно определить среднюю неравновесную температуру. Из графика 9 на рис. 3в видно, что хотя при таком интервале осреднения на графике еще остаются значительные пульсации в распределении неравновесной температуры, в среднем ее уровень (в пределах каждого пика) остается приблизительно постоянным. Это соответствует постоянству действующих источников теплового движения, в данном случае – процессов генерации и движения дислокаций.

Неравновесную энтропию можно определить, как термодинамически сопряженную к неравновесной температуре переменную. Производство неравновесной энтропии осуществляется в результате генерации неравновесных волновых пакетов в процессе рождения и движения дефектов, а ее уничтожение – за счет перехода в равновесную форму в процессе затухания неравновесных волновых пакетов.

Исследование задачи о вдавливании индентора может иметь и самостоятельное значение. Речь идет о следующем явлении, обнаруженном в компьютерных экспериментах, которое может быть полезным для понимания некоторых особенностей процессов индентирования. При вдавливании индентора максимальное давление достигается непосредственно в области под индентором и снижается при удалении от него. Дефекты (дислокации), для возникновения и поддержания которых напряжение было достаточным непосредственно под индентором, в процессе движения оказываются в области меньших напряжений, недостаточных для их дальнейшего перемещения, и стопорятся (рис. 4). В этих условиях внутренние напряжения организуются таким образом, что цепочка дислокаций запасает энергию. Численный эксперимент показывает, что при наличии достаточно большой флуктуации, дислокации могут вернуться в область индентора. В результате, «бомбардировка» индентора дислокациями существенно повышает среднюю температуру, а также максимальную кинетическую энергию атомов, принадлежащих этой области.

Дислокации и их ассоциации занимают важное место в общей кинетике дефектов. Многие особенности кинетики зависят от подвижности дислокаций, то есть, от атомарной структуры или ширины дислокационного

ядра. В рамках предложенного в диссертации подхода, влияние структуры дислокационного ядра на динамику дислокаций изучено при различных внешних воздействиях. Наиболее эффективным, из использованных автором способов анализа динамики двумерных дислокаций, оказалось построение распределений энергии, совмещенных с их пространственно-временной разверткой. В этом случае пространственное положение атомов 2D системы воспроизводится «по кадрам» в различные моменты времени, а энергетическое распределение отображается посредством тоновой шкалы (градаций серого, показанных на рис. 5).

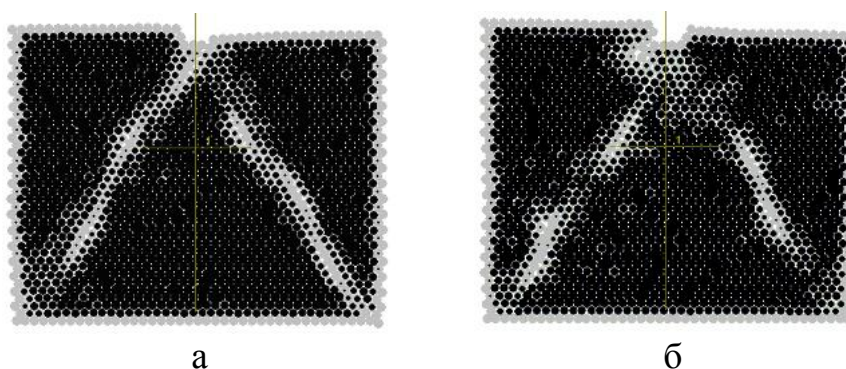


Рис. 4. Генерация дислокаций в 2D кристаллите при вдавливании трехатомного индентора в произвольный момент времени (а) и в момент возврата дислокаций в область индентора (б).

В результате компьютерных экспериментов обнаружено, что при интенсивном внешнем воздействии на образцы одного и того же типа твердого тела могут возникать дислокации, которые находятся в разных структурных состояниях. А именно, часть дислокаций могут иметь большую ширину дислокационного ядра порядка пяти-шести межатомных расстояний (нелокализованное состояние), тогда как другие могут иметь меньшую ширину дислокационного ядра порядка одного межатомного расстояния (локализованное состояние). Дислокации с широким дислокационным ядром обладают более высокой подвижностью по сравнению с дислокациями с узким дислокационным ядром. В процессе движения дислокации могут менять свое структурное состояние – часть времени проводить в одном структурном состоянии, часть в другом (см. дислокацию 1 на рис. 5б и 5в).

Существование, по крайней мере, двух структурных состояний ядер дислокаций может служить одним из возможных объяснений причины сравнительно высокой стабильности неравновесных границ нанозерен, и сочетания высоких прочностных и пластических свойств наноматериалов. Например, в компьютерных экспериментах при моделировании сдвиговой деформации была получена межзеренная граница, разделяющая области кристаллита с различной ориентацией осей симметрии (рис. 6). Она состоит

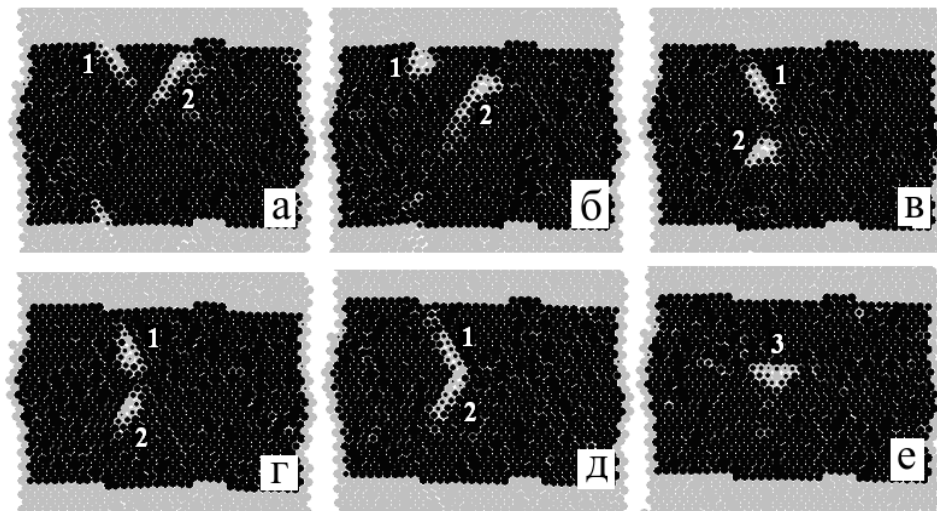


Рис. 5. Энергетическое распределение в плоскости модели при одноосном сжатии кристаллита мягкими гранями ($\approx 10^3$ атомов) в различные моменты времени (а-е).

преимущественно из дислокаций, находящихся в локализованном структурном состоянии. Вследствие низкой подвижности дислокаций в этом состоянии они более устойчивы к внешним механическим воздействиям, и вследствие этого твердое тело обладает более высокой прочностью – для того, чтобы уничтожить границу, необходимо привести дислокации в движение, для чего необходимо приложить большие напряжения. При превышении напряжениями некоторого (более высокого) предельного значения дислокации перейдут в движение, обеспечивая пластическое деформирование твердого тела без нарушения сплошности (см. рис. 6).

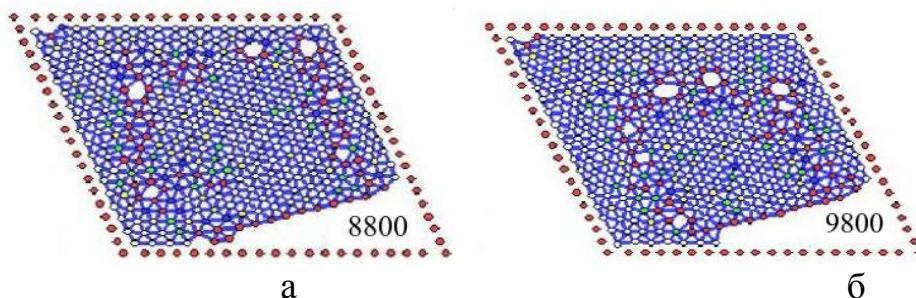


Рис. 6. Граница нанозерна, возникшая при сдвиговом деформировании в разные моменты времени (а, б). Числа на рисунке указывают временной шаг.

Полезным с точки зрения поиска новых подходов к исследованию механизмов деформирования представляется применение численного моделирования к проблеме бездиффузионной взрывной рекристаллизации,

осуществляемой в результате перемещения границ зерен (или субзерен) по сценарию ударных волн. Теоретическая возможность такого сценария подтверждается выполненным в работе компьютерным экспериментом по растяжению двухзеренной нанопроволоки с дислокационной стенкой в качестве границы между зернами (рис. 7а). Было обнаружено, что на определенном этапе деформирования в системе возможно формирование высокоугловой межзеренной границы (вертикально ориентированная область на рис. 7), которая перемещается справа налево со скоростью порядка 0.4 от скорости звука (рис. 7б-г).

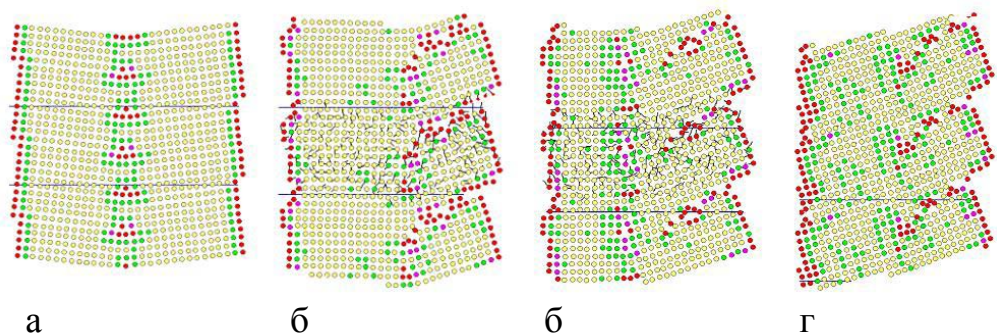


Рис. 7. Стадии деформирования дислокационной стенки в начальный момент времени (а) и в моменты времени соответствующие движению ударного фронта динамической рекристаллизации (б-г).

Структура предопределяет свойства твердого тела. В свою очередь, о структурных изменениях можно судить по изменению свойств твердых тел. Такой характеристикой в частности могут быть упругие модули. Зоны разрушений и контактов (с которыми ассоциируются структурные ослабления) характеризуются пониженными значениями упругих модулей. Наличие ослабленных зон может существенно влиять на протекание быстрых процессов при соударении твердых тел с ослабленной границей контакта. Для изучения таких процессов в диссертации была предложена модификация так называемого «метода эффективных частиц». В случае изотропных сред данная модификация дает правильный предельный переход к уравнениям механики сплошных сред. Путем изменения характеристик взаимодействия «частиц» (их массы и силовых констант) можно конструировать редуцированные модели со структурными неоднородностями (ослаблениями).

В частности, описанный метод был применен для численного решения задачи возбуждения упругих волн при соударении твердых тел. В стандартном подходе задача решается путем введения, так называемой «функции источника», которая задает воздействие источника на среду, но не учитывает обратного воздействия среды на источник. Такой подход не позволяет описать эффекты резонансного возбуждения упругих волн. Предложенная в работе модификация «метода частиц» позволяет ввести в

рассмотрение структурные ослабления в месте контакта соударяющихся тел и решить задачу источника для упругих однофазных волн с регулируемым спектром. Было установлено, что если без учета структурных ослаблений в области контакта возбуждаются в основном высокочастотные собственные колебания упругих межчастичных связей (см. рис. 8а), то учет ослаблений приводит к практически полному исчезновению высокочастотных вкладов (рис. 8б).

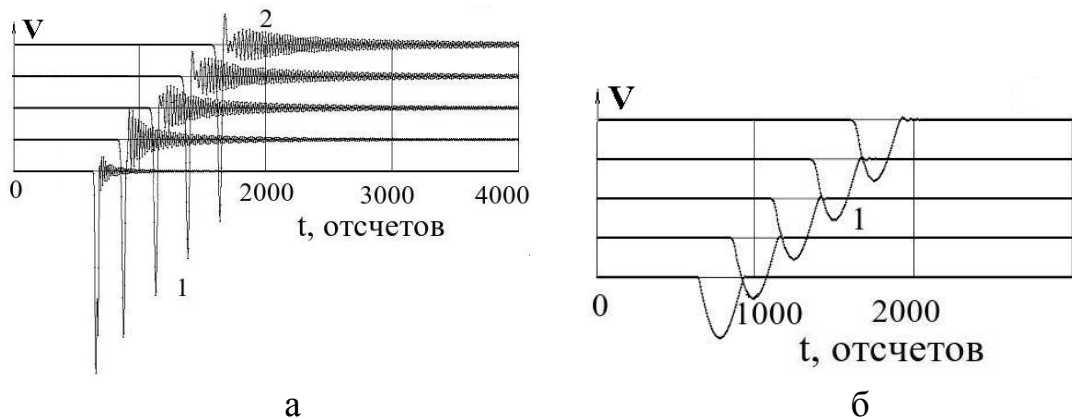


Рис. 8. Временные развертки скоростей частиц V без учета ослаблений (а) и с учетом ослаблений (б). Основная часть волны (1) и хвостовая часть (2).

В четвертой главе «Кинетика структурных дефектов в металлах» рассматривается кинетика структурных дефектов в приложении к твердым телам с вакансиями и к исследованию формирования мелкозеренной структуры металлов при интенсивных механических воздействиях.

При современном развитии компьютерной техники рассмотренными в предыдущих разделах методами молекулярной динамики и ее модификациями удастся исследовать численно лишь небольшие по объему материальные объекты (с характерным размером не более 100-150 нм). Для моделирования более крупных объектов необходимо прибегнуть к дальнейшему, более адекватному на данном масштабе упрощению моделей, а именно – к феноменологическому описанию кинетики структурных дефектов.

Рассмотрим уравнение состояния твердых тел с вакансиями:

$$n = N \exp\left(-\frac{u_V}{kT}\right) \quad (1)$$

для n вакансий в решетке из N атомов. Это уравнение может быть получено различными способами, например, посредством приравнивания связанной энергии, записанной в альтернативных формах, – через конфигурационную энтропию и через плотность (количество) дефектов [66]:

$$U_b \equiv TS_c \approx nu_V. \quad (2)$$

Здесь и выше u_v – энергия вакансии, T – температура, k – постоянная Больцмана, S_c – конфигурационная энтропия, U_b – связанная энергия. Для получения из условия (2) уравнения состояния (1) используется известное соотношение статистической физики, связывающее конфигурационную энтропию с числом дефектов $S = kn(\ln(N/n)+1)$. Для сравнения, в диссертации то же уравнение состояния (1) получено стандартными методами статистической физики, а равновесное состояние определено из условия максимума функции распределения вероятности. В отличие от процедуры минимизации свободной энергии, в которой предполагается, что энергия вакансий является величиной постоянной, в данном подходе это предположение не используется. Последнее позволяет адекватно учесть зависимость энергии вакансий от их плотности (количества). В квадратичном приближении внутренняя энергия тела с вакансиями принимает вид:

$$U = U_0 + u_{v0}n - \frac{1}{2}u_{v1}n^2 \quad (3)$$

Знак минус перед последним слагаемым отражает тот факт, что энергия необходимая для образования вакансии в условиях, когда уже существует какое-то количество других вакансий, должна быть меньше, чем в бездефектном кристалле (поскольку другие вакансии эффективно ослабляют среднюю энергию связи).

В квадратичном приближении график внутренней энергии представляет собой параболу с максимумом (рис. 9а), а равновесному значению концентрации отвечает точка, в которой тангенс угла наклона

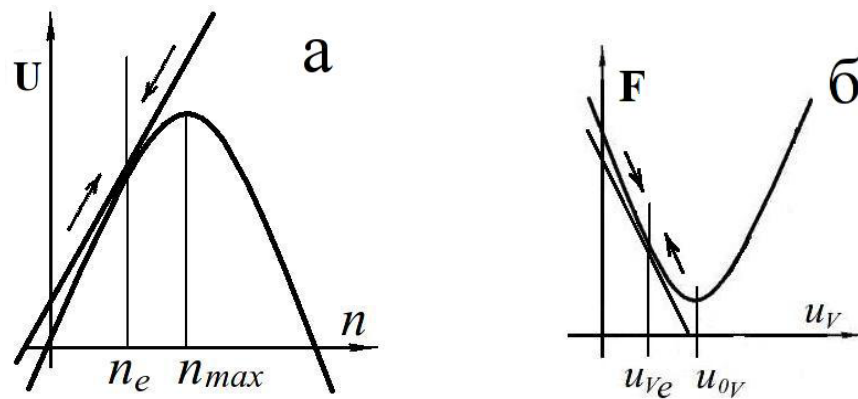


Рис. 9. Вид зависимости внутренней энергии от количества вакансий (а) и свободной энергии от энергии вакансии (б).

касательной к графику внутренней энергии равен энергии вакансии, определенной из уравнения состояния (1). Для энергии вакансии выполняется дифференциальное соотношение $u_v = \partial U / \partial n$. С другой стороны, конфигурационная свободная энергия, определенная как

$F_c = U - u_v n$, имеет минимум (рис. 9б), тогда как равновесному значению соответствует та же концентрация, которая получается при описании посредством внутренней энергии: $n = -\partial F / \partial u_v$.

Кинетические уравнения для вакансий можно записать равноправно как в терминах внутренней, так и свободной энергии:

$$\begin{aligned} \frac{\partial h_l}{\partial t} &= \gamma_{h_l} \left(\frac{\partial u}{\partial h_l} - \varphi_{el} \right), \\ \frac{\partial \varphi_l}{\partial t} &= \gamma_{\varphi_l} \left(\frac{\partial f_c}{\partial \varphi_l} - h_{el} \right). \end{aligned} \quad (4)$$

В уравнениях (4) выполнен переход к континуальным плотностям соответствующих величин, так что: h_l , φ_l – плотность и энергия дефекта l -типа, h_{el} , φ_{el} – их равновесные значения, u , f_c – плотность внутренней и конфигурационной свободной энергии, γ_{h_l} , γ_{φ_l} – соответствующие кинетические коэффициенты. Несмотря на формальную эквивалентность, предпочтительным представляется описание в терминах внутренней энергии. Во-первых, независимым аргументом внутренней энергии является измеряемая величина, – плотность дефектов. Во-вторых, опираясь на зависимость внутренней энергии от плотности дефектов, проще конструировать конкретные модели, отражающие кинетические свойства реальных систем.

В частности, в работе было использовано следующее разложение:

$$u(h_1, \dots, h_N) = u_0 + \sum_{i=1}^N \left(\varphi_{0i} h_i - \frac{1}{2} \varphi_{1i} h_i^2 + \frac{1}{3} \varphi_{2i} h_i^3 - \frac{1}{4} \varphi_{3i} h_i^4 \right) + \sum_{i \neq j=1}^N \varphi_{ij} h_i h_j \quad (5)$$

где суммы выполнены по всем типам дефектов, выражение в скобках описывает зависимость энергии от концентрации дефектов одного типа, а последнее слагаемое отвечает за взаимодействие между дефектами различного типа. При разложении до второй степени $n=2$ можно потенциально получить только одно устойчивое состояние системы по данному виду дефекта, что дает так называемое – «одномодовое» приближение. При максимальной степени равной четырем $n=4$ возможны два устойчивых состояния – «двухмодовое» приближение. В рамках такого описания возможны следующие постановки задач:

1) одномодовое двухуровневое приближение; 2) двухмодовое одноуровневое приближение и 3) двухмодовое двухуровневое приближение.

В одномодовом двухуровневом приближении система связанных кинетических уравнений:

$$\begin{aligned}\tau_h \frac{\partial h}{\partial t} &= \varphi_0 - \varphi_1 h + \tilde{\varphi} h, \\ \tau_{\tilde{h}} \frac{\partial \tilde{h}}{\partial t} &= \tilde{\varphi}_0 - \tilde{\varphi}_1 \tilde{h} + \varphi h,\end{aligned}\tag{6}$$

можно интерпретировать как эволюцию двух структурных уровней – дислокационного и границ зерен. Здесь τ_h и $\tau_{\tilde{h}}$ величины, обратные кинетическим коэффициентам, а все переменные, относящиеся к дефектам более глубокого структурного уровня (в данном случае - дислокации), помечены тильдой. Последние слагаемые в уравнениях (6) описывают взаимное влияние различных уровней. В квазиadiaбатическом приближении $\tau_{\tilde{h}} < \tau_h$ система уравнений (6) вырождается в известное кинетическое уравнение дисклинационной теории [11*].

В двухмодовом одноуровневом приближении учитываются только один вид дефекта, в случае металлов это границы зерен:

$$u = u_0 + \varphi_0 h - \frac{1}{2} \varphi_1 h^2 + \frac{1}{3} \varphi_2 h^3 - \frac{1}{4} \varphi_3 h^4,\tag{7}$$

где коэффициенты разложения зависят от упругой деформации, как от управляющего параметра. Соответствующее эволюционное уравнение можно записать в явном виде:

$$\frac{\partial h}{\partial t} = \gamma_h (\varphi_0 - \varphi_1 h + \varphi_2 h^2 - \varphi_3 h^3)\tag{8}$$

Слагаемые с положительными знаками описывают внутренние процессы, приводящие к генерации дефекта (к фрагментации в случае механического воздействия), с отрицательными знаками – к аннигиляции дефекта (рекристаллизации или укрупнению зерен в случае механического воздействия). Положительная константа φ_0 описывает постоянные источники границ за счет необратимой работы. Второе слагаемое, пропорциональное $\varphi_1 h$ описывает релаксационный вклад. Следующие слагаемые не имеют простых аналогов и описывают внутренние процессы более глубокого уровня (быстрые процессы фрагментации и релаксации). Эти слагаемые содержат более высокие степени h и становятся существенными при меньшем среднем размере зерна. Учет еще более высоких степеней дает возможность описывать стационарные структуры с еще более мелким предельным размером структуры. Чередование знаков в разложении (7) обеспечивает максимальное количество устойчивых стационарных решений кинетического уравнения (8). Графики внутренней энергии при различных значениях управляющего параметра, упругой деформации, приведены на рис. 10а. Применительно к интенсивному механическому воздействию полученная модель описывает переход от одного стационарного состояния с более крупным размером зерна (левый максимум) в состояние с более мелким размером зерна (правый максимум). Этот переход становится возможен при таком соотношении физических

параметров, когда управляющий параметр модели достигает своего критического значения, при котором исчезает потенциальный барьер между стационарными состояниями.

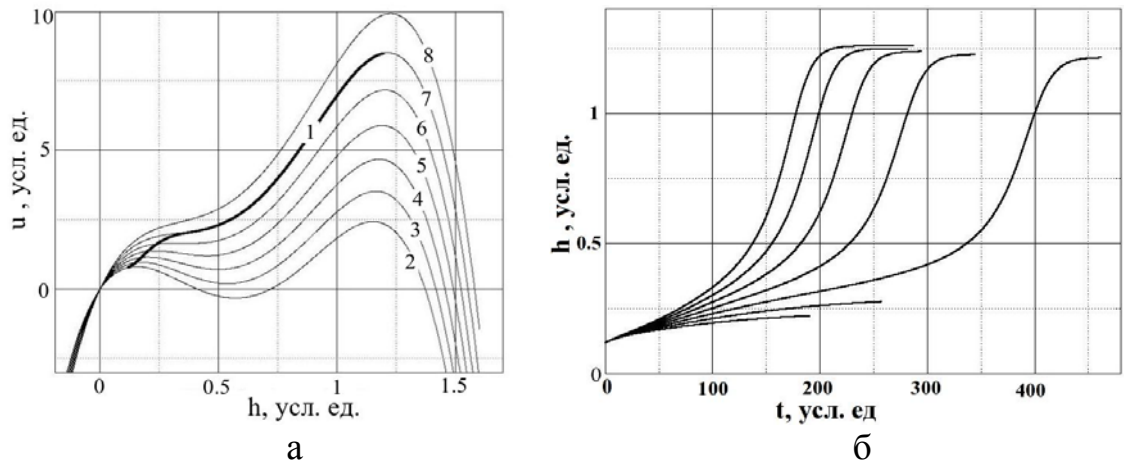


Рис. 10. Зависимость плотности внутренней энергии от плотности границ зерен для металлов (а): структурно-фазовый переход (1) и при различном значении управляющего параметра (2-8) и кинетические кривые при различном значении коэффициента упрочнения B (б).

Важной задачей кинетической теории является описание упрочнения твердого тела. В рамках модели этот эффект может быть учтен специальным выбором зависимости управляющего параметра ε^e от накопленной пластической деформации ε^p в виде:

$$\varepsilon^e = \varepsilon_0^e + B \tanh(a\varepsilon^p), \quad (9)$$

где ε^e , ε_0^e – сдвиговая упругая деформация (текущее и начальное значение), B и a – некоторые эмпирические параметры, которые характеризуют вещество, его упрочнение. Функция \tanh выбрана из соображений простоты. Она позволяет интерполировать эмпирическую зависимость упрочнения от деформации единой аналитической кривой. При малых значениях ε^p эта функция близка к закону упрочнения Холла-Петча (угол касательной в точке $\varepsilon^p = 0$ за счет выбора константы a может быть как угодно близким к 90°), а при больших значениях ε^p выходит на насыщение. Как ожидалось, при слабой способности материала упрочняться, измельчение зерен не может быть осуществлено (нижние кривые на рис. 10б). При тех значениях параметра B , для которых фрагментация возможна, формирование более мелкого зерна (большие значения h в области правого максимума) протекает тем быстрее, чем выше значение этого параметра.

Для сравнения на рис. 11 приведены кинетические кривые, построенные в рамках неравновесной термодинамики и в рамках

дисклинационной теории [11*], из которых видно их хорошее соответствие. Экспериментальные данные, обозначенные кружочками, одинаково хорошо ложатся на оба типа кинетических кривых.

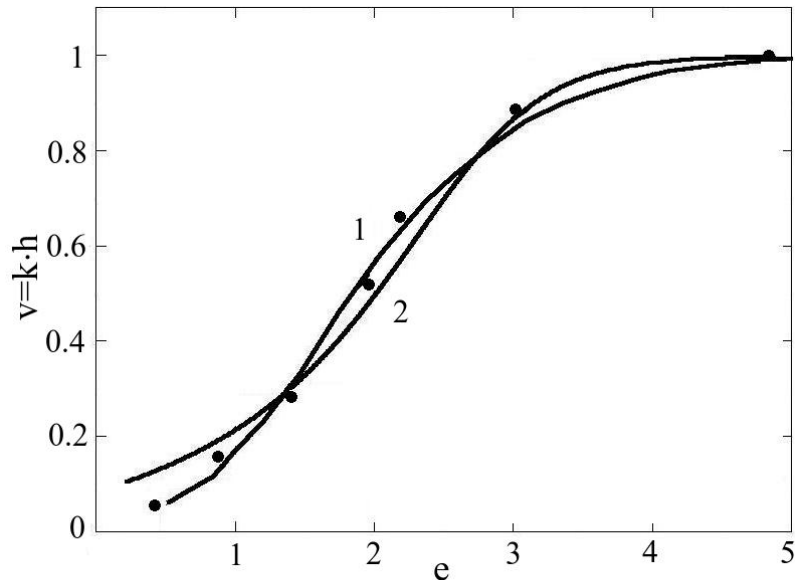


Рис. 11. Кинетические кривые формирования стационарной структуры, полученные в рамках дисклинационной модели (1) и в рамках неравновесной термодинамики (2); кружочками обозначены экспериментальные значения.

Фактически, в кинетическое уравнение (8) через законы упрочнения (9) явная зависимость от времени управляющего параметра введена искусственно. Эта несколько снижает ценность теории, и представляет интерес получить законы упрочнения из самой теории. Отметим, что введенная таким образом зависимость отражает реальное влияние на кинетику границ эволюции дефектов более глубоких структурных уровней (дислокаций в случае металлов). Учесть это влияние можно в рамках двухмодового двухуровневого приближения.

Система кинетических уравнений в этом случае принимает вид:

$$\begin{aligned} \tau_h \frac{\partial h}{\partial t} &= \varphi_0 - \varphi_1 h + \varphi_2 h^2 - \varphi_3 h^3 + \Phi \tilde{h} \\ \tau_{\tilde{h}} \frac{\partial \tilde{h}}{\partial t} &= \tilde{\varphi}_0 - \tilde{\varphi}_1 \tilde{h} + \Phi h \end{aligned} \quad (10)$$

Закон упрочнения здесь учтен на более глубоком структурном уровне – посредством известного соотношения Тейлора (для дислокаций). Корреляционная зависимость между упругими деформациями ε^e , которые входят в уравнения (10), как управляющий параметр, через коэффициенты при младших степенях независимой переменной, и плотностью дефектов более высокого уровня представляет собой кривую упрочнения (рис. 12).

Заметим, что предел пластического течения равен $G\varepsilon^e$, где G – сдвиговой модуль.

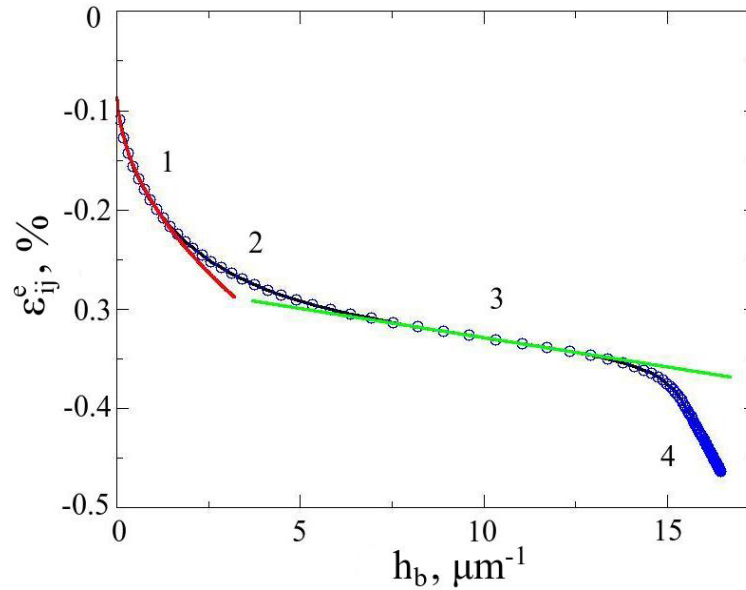


Рис. 12. Кривая упрочнения металлов на зеренном уровне. 1 – участок упрочнения, соответствующего закону Холла-Петча; 2 – переходная область, 3 – линейный закон упрочнения; 4 – квадратичный закон упрочнения. Здесь ε_{ij}^e – сдвиговая компонента упругой деформации, hb – плотность границ зерен.

Из графика видно, что процесс упрочнения проходит несколько стадий. На начальной стадии (участок 1) кривая упрочнения может быть аппроксимирована квадратным корнем, то есть, подчиняется закону Холла-Петча. На последующей стадии наиболее интенсивного деформирования (участок 3) кривая упрочнения хорошо аппроксимируется прямой линией, что соответствует линейному закону упрочнения. Наконец, на завершающей стадии (участок 4) кривую упрочнения можно аппроксимировать квадратичной зависимостью.

В пятой главе «Кинетика структурных дефектов в твердых телах» описанный выше подход неравновесной термодинамики применен к исследованию кинетики дефектов в более сложных системах, среди которых: аморфные сплавы, смазки и квазихрупкие материалы.

Модели, аналогичные рассмотренным в предыдущем разделе, могут быть применены для описания автоколебательных и гистерезисных переходов. Например, двухмодовая одноуровневая модель с законом упрочнения типа Холла-Петча описывает структурно-фазовый переход только в одном направлении. Однако если твердое тело после перехода во вторую фазу начинает разупрочняться, его эволюция будет идти и в противоположном направлении. Если диапазоны упрочнения и разупрочнения перекрываются, то в такой системе может возникнуть

автоколебательный режим. Иными словами, при монотонном нагружении система будет колебаться между двумя структурно-фазовыми состояниями.

С учетом тепловых эффектов внутреннюю энергию такой системы можно записать в виде:

$$u = u_0 + t_0 \tilde{s} - \frac{1}{2} t_1 \tilde{s}^2 + \varphi_0 h - \frac{1}{2} \varphi_1 h^2 + \frac{1}{3} \varphi_2 h^3 + \frac{1}{4} \varphi_3 h^4 - m_1 \tilde{s} h + \dots \quad (11)$$

где коэффициенты u_0 , t_0 , t_1 , φ_0 , φ_1 , φ_2 , φ_3 , m_1 могут зависеть от упругих деформаций ε_{ij}^e , как от управляющего параметра, а \tilde{s} – неравновесная часть энтропии.

Автоколебательный процесс возможен в системе описываемой внутренней энергией с двумя экстремумами (рис. 13). Если в некоторый начальный момент система находилась в состоянии соответствующем левому максимуму, то в результате упрочнения она эволюционирует вдоль левой ветви N-образной кривой, соединяющей максимумы термодинамического потенциала при различных управляющих параметрах (стрелка 1 на рис. 13). При исчезновении барьера между стационарными состояниями, система скачкообразно по стрелке 2 переходит в состояние, соответствующее правому максимуму. Теперь, в результате разупрочнения, ее состояние эволюционирует вдоль правой ветви N-образной кривой, соединяющей максимумы, в сторону уменьшения (стрелка 3) величины h . Когда барьер между стационарными состояниями снова исчезает, система скачкообразно переходит в состояние, соответствующее левому максимуму (стрелка 4). Далее процесс повторяется периодически.

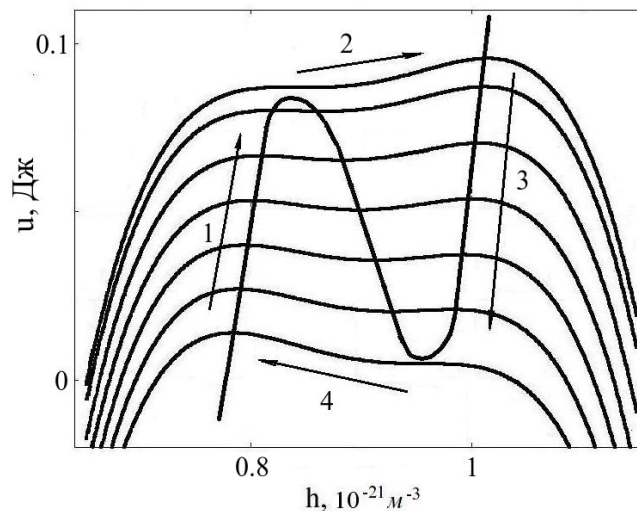


Рис. 13. Внутренняя энергия при различных постоянных значениях управляющих параметров и N-образная кривая, соединяющая максимумы и минимумы различных кривых внутренней энергии. Участки N-образной кривой отвечают за медленную эволюцию за счет упрочнения (1), «быструю» эволюцию при постоянном напряжении (2, 4) и медленную эволюцию за счет разупрочнения (3).

Данную модель можно применить для описания автоколебательных переходов в аморфных сплавах. Согласно результатам, описанным в [12*], при монотонном нагружении в наковальнях Бриджмена аморфного сплава Ni-Co-Fe-Si-B наблюдается циклическая смена аморфного и нанокристаллического состояний. В нанокристаллическом состоянии в аморфной матрице появляются нанокристаллы порядка 10нм, которые в среднем равномерно распределены в объеме. В теории такие нанокристаллы можно считать дефектом аморфной «фазы», а в качестве плотности дефектов использовать их количество в единице объема.

Аналогичный подход был применен для анализа разрушения квазихрупких тел. Основным структурным дефектом в этом случае являются микротрещины. Их средний размер в различных твердых телах колеблется незначительно в области 0.1 мкм. Поэтому разрушение будет протекать путем накопления микротрещин и при достижении ими некоторой критической плотности путем последующего перехода разрушения на макроскопический уровень. Особенно интересно исследование такой двухуровневой кинетики в условиях гидростатического сжатия при наличии в среде концентраторов напряжений, например, в форме цилиндрических полостей.

Существование полости нарушает термодинамическое равновесие среды. Мерой неравновесности (фактор неравновесности) может служить интенсивность касательных напряжений:

$$\eta = \frac{1}{\sqrt{6}} \sqrt{(\sigma_r - \sigma_\varphi)^2 + (\sigma_r - \sigma_z)^2 + (\sigma_\varphi - \sigma_z)^2}. \quad (12)$$

Начальное распределение напряжений (тангенциальных и радиальных компонент, кривые 1 и 2 на рис. 14а) рассчитаны в упругой постановке.

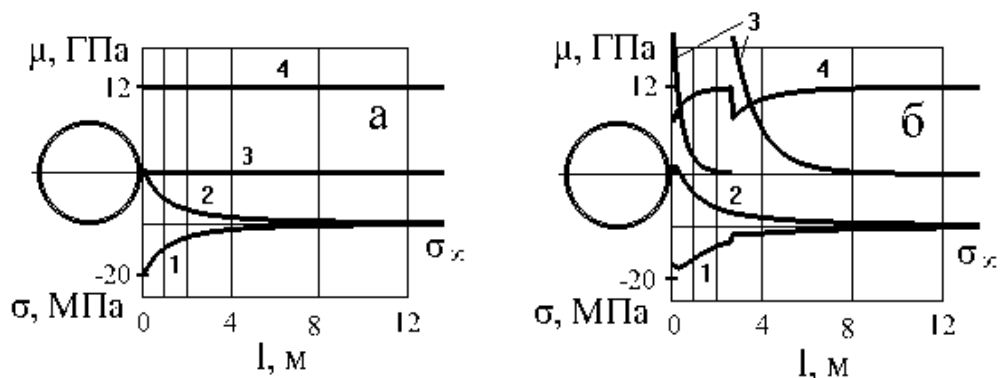


Рис. 14. Эволюция тангенциальных σ_p (1) и радиальных σ_r (2) напряжений, плотности микротрещин (3), и сдвигового модуля μ (4) в поле гидростатических напряжений σ_∞ на начальной стадии (а) и на 1700 сутки (б).

Двухуровневая кинетика моделируется в простейшем варианте. На уровне микротрещин скорость (интенсивность) их накопления пропорциональна фактору неравновесности. Она тем выше, чем сильнее система отклонена от гидростатического состояния:

$$\frac{dh_{mc}}{dt} = k_h \eta^n, \quad (13)$$

где k_h – кинетический коэффициент. Релаксационными вкладами напрямую здесь пренебрегается, а для косвенного их учета введен дополнительный подгоночный параметр n .

Зависимость упругих модулей от фактора неравновесности (обратная связь), например, для сдвигового модуля, задается в виде:

$$\mu = \mu_0 + \int_0^t k_\mu \eta^{n_\mu} dt, \quad (14)$$

где k_μ – кинетический коэффициент, n_μ – некоторый подгоночный параметр теории. Полагается, что в начальном состоянии микротрещины отсутствуют, а сдвиговой модуль имеет постоянное значение во всем объеме твердого тела (соответственно, кривые 3 и 4 на рис. 15а).

При достижении критической плотности дефектов, материал разрушается макроскопически, в результате чего формируется первая зона макроскопических разрушений. Условия для накопления новой серии микротрещин перемещаются в неразрушенные участки твердого тела (рис. 15б). Таким образом, формирование многозональной структуры разрушений твердого тела в монотонном поле гидростатических сжимающих напряжений при наличии обратной связи можно представить как процесс самоорганизации периодической последовательности зон разрушения.

В рамках выполнения плановых научных исследований, данная феноменологическая теория была применена для описания явления зонального разрушения твердых тел (горных пород) вокруг цилиндрических полостей (горные выработки) при больших гидростатических напряжениях (большие глубины).

ВЫВОДЫ

В результате проведенных исследований решена важная научная проблема – изучена кинетика структурных дефектов в условиях интенсивного внешнего воздействия, развит ряд минималистических моделей и *новый подход* к изучению проблемы на базе молекулярной динамики и неравновесной термодинамики, который позволил установить и углубить модельные представления о процессах структурной перестройки и разрушения в этих условиях. На базе минималистической модели низшего уровня углублены представления о роли тепловых флуктуаций в

структурной перестройке твердых тел. Численное моделирование на нелинейных цепочках показало, что интенсивные флуктуации не только могут кратковременно возникать вследствие случайного сочетания фаз отдельных тепловых колебаний, но могут образовывать долгоживущие солитоноподобные возбуждения. Их действие по производству структурных перестроек может быть более эффективным, как за счет более высокой энергии, так за счет большей длительности воздействия. На базе минималистической модели следующего уровня развита модель макроскопических частиц, которая применена для описания соударения твердых тел и возникающих при этом волновых процессов. Развита минималистическая модель еще более высокого уровня, описывающая кинетику интенсивной пластической деформации, явления *stick-slip* в сверхтонких смазках, автоколебательные переходы между аморфным и нанокристаллическим состоянием в аморфных сплавах, гистерезисные явления в γ - ϵ переходах, кинетику разрушения квазихрупких материалов и формирования зональных структур разрушения твердых тел вокруг цилиндрических полостей в условиях большого гидростатического сжатия.

Основные научные и практические результаты можно сформулировать в виде таких выводов:

1. Впервые **установлено**, что в нелинейных акустических цепочках с реалистическими потенциалами после термализации спонтанно возникают долгоживущие солитоноподобные флуктуации. При распространении вдоль цепочки такие флуктуации первоначально собирают энергию фоновых колебаний в процессе роста, а затем возвращают ее назад в процессе распада. В цепочке всегда присутствует определенное количество таких флуктуаций, доля которых растет с увеличением температуры. При высоких температурах можно говорить об особой солитонной организации теплового поля. Увеличение доли высокоэнергетических долгоживущих возбуждений приводит к ускорению процесса структурной перестройки твердых тел, к снижению предела их длительной прочности.

2. Впервые методами молекулярной динамики на 2D и 3D решетках **показано**, что в процессе интенсивного внешнего воздействия за счет динамических переходных процессов при генерации дислокаций в тепловом движении могут быть выделены равновесная (высокочастотная) и неравновесная (низкочастотная) составляющие. Путем осреднения кинетической энергии выделенных компонентов определена равновесная и неравновесная температура или температура равновесной и неравновесной подсистем. Механизм релаксации неравновесной подсистемы связан с затуханием низкочастотной компоненты теплового движения в результате нелинейного взаимодействия с высокочастотными колебаниями.

3. **Показано** методами молекулярной динамики, что при различных способах нагружения металлических кристаллитов в одном и том же образце одновременно возможно существование дислокаций с широким и

узким дислокационным ядром, обладающих различной подвижностью. Смена состояний ядер дислокаций в процессе нагружения предопределяет *нетривиальную* динамику дислокаций, в результате чего они обнаруживают элементы сложного поведения, которое проявляется через обратные связи. Как один из вариантов, высокая устойчивость неравновесных границ нанозерен может быть объяснена наличием в их составе дислокаций с узкими дислокационными ядрами, обладающих более низкой подвижностью.

4. *Установлено*, что при растяжении системы, состоящей из периодически сочлененных нанокристаллитов с взаимно ортогонально ориентированными осями симметрии, может формироваться структура близкая идеальной структуре кристаллических усов. Армирование такими элементами может быть одним из возможных механизмов упрочнения реальных твердых тел (нанопроволок и нанопроволочных композитов).

5. *Разработан* новый метод макроскопических частиц и на его основе изучено влияние структурных ослаблений на возбуждение упругих волн при соударении твердых тел. *Показано*, что, изменяя уровень ослабления связей на границе контакта между соударяющимися телами, можно регулировать частотный диапазон возбуждаемых волн, и за счет этого добиться хорошего согласия с экспериментом. Объяснена природа возникновения многофазных осциллирующих сигналов за счет резонансной колебательной системы, образованной свободной поверхностью и границами ослабленного контакта внутри среды.

6. *Впервые* получена и обоснована методами статистической физики система кинетических уравнений в терминах термодинамических потенциалов внутренней и модифицированной свободной энергии, которая допускает полное решение для твердых тел с вакансиями, и которая обобщена на другие типы дефектов.

7. В рамках двухуровневого одномодового приближения получена система кинетических уравнений для описания взаимной кинетики границ зерен и дислокаций. В адиабатическом приближении получена перенормировка постоянных теории для одноуровневой модели, а в квазиадиабатическом приближении получено известное кинетическое уравнение дисклинационной теории. *В* двухмодовом двухуровневом приближении фрагментация металлов *описана*, как структурно-фазовый переход между двумя устойчивыми стационарными состояниями (модами). Получена кривая упрочнения, на которой отобразились все виды законов упрочнения – закон Холла-Путча, линейный закон, и квадратичный закон упрочнения.

8. *В* двухмодовом приближении изучены автоколебательные переходы, которые могут быть применены для описания структурно-

фазовых переходов в аморфных сплавах. Для аморфного сплава *Ni-Co-Fe-Si-B* осуществлена оценка коэффициентов теории.

9. **Разработана** двухуровневая кинетическая модель разрушения твердых тел, которая приложена к описанию процесса накопления и слияния микротрещин в квазихрупких материалах и явления зональной дезинтеграции. При небольших механических воздействиях в системе реализуется равновесное состояние, что предопределяет длительную устойчивость твердого тела к разрушению. При больших напряжениях равновесное состояние исчезает, и система переходит в неравновесный режим. Релаксация в этом режиме сопровождается неограниченным ростом и слиянием микротрещин, и завершается макроскопическим разрушением твердого тела.

СПИСОК ЦИТИРУЕМОЙ ЛИТЕРАТУРЫ*

1. *Филиппов А.Э., Попов В.Л., Псахье С.Г.* Скоррелированные воздействия, оптимизирующие перевод динамики смещения блочных сред в режим ползучести // ЖТФ. – 2008. – Т. 34, в. 16. – С. 22-29.
2. *Fermi E., Pasta J.R., Ulam S.* Studies of Nonlinear Problems // Los Alamos Scientific Laboratory Report No LA 1940. – 1955. – p. 491-502.
3. *Слуцкер А.И.* Атомный уровень флуктуационного механизма разрушения твердых тел (модельно-компьютерные эксперименты) // ФТТ. 2005. – Т. 47, в. 5. – С. 777-787.
4. *Kharchenko D.O., Olemskoi A.I., Knyaz I.A.* Nonequilibrium phase transitions in stochastic systems with coloured fluctuations // Condensed Matter Physics. – 2006. – V. 9, № 1(45). – P. 15–22.
5. The structure of the lateral twin boundary in tungsten / I.M. Mikhailovskij, N. Wanderka, V.A. Ksenofontov, T.I. Mazilova, E.V. Sadanov, A.A. Mazilov // Phil. Mag. Letters. – 2007. – V. 87, No 10. – P. 743-750.
6. *Кинетика* формирования адсорбционного слоя в тонких пленках / В.М.Юрченко, Э. П. Фельдман, Л. И. Стефанович, Т. Н. Мельник А. В. Крайников, Д. Б. Вильямс, А. Е. Зюбанов // Конденсированные среды и межфазные границы. – 2009. – Т. 10, № 1. – С. 64-68.
7. *Процессы* пластического структурообразования металлов / В. М. Сегал, В. И. Резников, В. И. Копылов, Д. А. Павлик, В. Ф. Малышев. – Минск: Новые технологии, 1994. 232 с.
8. *Френкель Я.И.* Кинетическая теория жидкостей. Л.: Наука, 1975. – 592с.
9. *Kittel Ch.* The way of the chemical potential // American journal of physics. – 1967. – V. 35, № 6. – P. 483-487.
10. *Ландау Л.Д., Халатников И.М.* Об аномальном поглощении звука вблизи точек фазового перехода второго рода // ДАН СССР. – 1954. – Т. 96, № 3. – С. 469-472.

11. *Рыбин В.В.* Структурно-кинетические аспекты физики развитой пластической деформации // Изв. ВУЗов. Физика. – 1991. – Т. 34, № 3. – С. 7-22.
12. Глезер А.М. О природе сверхвысокой пластической (мегапластической) деформации // Известия РАН. Серия физическая. – 2007. – Т. 71, № 12. – С. 1767-1776.
13. *Yoshizawa H., Israelachvili J.* Fundamental mechanisms of interfacial friction. 2. Stick-Slip Friction of Spherical and Chain Molecules // J. Phys. Chem. – 1993. – Vol. 97. – P. 11300-11313.

СПИСОК ОСНОВНЫХ ОПУБЛИКОВАННЫХ РАБОТ СОИСКАТЕЛЯ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

1. **Metlov L.S.** Soliton Self-Organization of Thermal Field in a Chain at High Temperature // Chapter in the book: Focus on soliton research, edited by L.V. Chen / L.S. Metlov – New York: Nova Science Publishers, 2006, P. 213-232
2. Морозов А.Ф. Устойчивость подготовительных выработок в условиях зональной дезинтеграции горных пород. Часть 1. / А.Ф. Морозов, **Л.С. Метлов**, В.И. Мордасов – Донецьк, Донеччина, 1999. – 176с.
3. **Метлов Л.С.** Пакетная интерпретация динамики решетки / Л.С. Метлов // Физика и техника высоких давлений. – 1997. – Т. 7, № 2. – С. 123-127.
4. **Метлов Л.С.** Начальная стадия роста микротрещиноватости, как фазовый переход / Л.С. Метлов, А.Ф. Морозов // Физика и техника высоких давлений. – 1997. – Т. 7, № 3. – С. 58-61.
5. **Метлов Л.С.** Нелинейная динамика двумерной решетки. Стохастизация волн / Л.С. Метлов // Физика и техника высоких давлений. – 1997. – Т. 7, № 3. – С. 89-97.
6. **Метлов Л.С.** Механические и смешанные модели горных пород с обратной связью / Л.С. Метлов, А.Ф. Морозов // Физика и техника высоких давлений. – 1997. – Т. 7 № 4. – С. 69-75.
7. **Метлов Л.С.** Нелинейная динамика одно- и двумерных решеток. Стохастизация волн / Л.С. Метлов // Физика и техника высоких давлений. – 1998. – Т. 8, № 2. – С. 110-114.
8. **Метлов Л.С.** Физические аспекты зонального разрушения твердых тел / Л.С. Метлов, А.Ф. Морозов // Физика и техника высоких давлений. – 1999. – Т. 9 № 1. – С. 80-86.
9. **Метлов Л.С.** Структурная перестройка двумерного кристалла под действием больших сдвиговых деформаций / Л.С. Метлов, А.Ф. Морозов // Физика и техника высоких давлений. – 2001. – Т. 11, № 1. – С. 85-89.

10. **Метлов Л.С.** Особенности разрушения квазхрупких тел / Л.С. Метлов, А.Ф. Морозов // Физика и техника высоких давлений. – 2001. – Т. 11, № 2. – С. 93-103.
11. **Metlov L.S.** Soliton organization of thermal field in a chain at high temperature / L.S. Metlov // Физика и техника высоких давлений. – 2001. – Т. 8, № 3. – С. 121-127.
(См. также <http://arxiv.org/abs/nlin/0204041v1>).
12. **Метлов Л.С.** Многозональное разрушение вокруг технологических выработок / Л.С. Метлов, А.Ф. Морозов // Доповіді НАН України. – 2002. – № 1. – С. 134-137.
13. **Metlov L.S.** Physical foundations of mechanism of zonal rock failure in the vicinity of mine working / L.S. Metlov, A.F. Morozov, M.P. Zborshchik // Journal of mining science. – 2002. – V. 38, № 2. – P. 150-155.
14. **Metlov L.S.** Spontaneously appearing discrete moving kinks in nonlinear acoustic chain with realistic potential / L.S. Metlov, Yu.V. Eremeichenkova // Condensed Matter Physics. – 2003. – V. 6, № 1(33). – P. 105–118.
15. **Метлов Л. С.** Структурно-кинетические особенности деформирования волокнистых материалов / Л.С. Метлов, Н.Н. Белоусов, А.Б. Дугатко // Физика и техника высоких давлений. – 2005. – Т. 15, № 2 – С. 38-46.
16. **Метлов Л.С.** Ударное возбуждение упругих волн при низких и высоких давлениях / Л.С. Метлов // Физика и техника высоких давлений. 2005. – Т. 15, № 3. – С. 26-40.
17. **Metlov L. S.** Dislocation Reactions at Indenter Press / L.S. Metlov // Наносистеми, наноматеріали, нанотехнології. – 2006. – Т. 4, № 1. – С. 209—214.
18. **Метлов Л.С.** Связанные задачи геомеханики и шахтной сейсморазведки для больших глубин (давлений) / Л.С. Метлов, А.В. Анциферов // Физика и техника высоких давлений. – 2006. – Т. 16, № 1. – С. 111-118.
19. **Метлов Л.С.** Качественная термодинамическая модель фрагментации твердых тел при интенсивной пластической деформации / Л.С. Метлов // Деформация и разрушение материалов. – 2007. – № 2. – С. 40-43.
20. **Метлов Л.С.** Термодинамика интенсивных пластических деформаций / Л.С. Метлов // Металлофизика и новейшие технологии. – 2007. – Т. 29, № 3. – С. 335-345.
21. **Метлов Л.С.** Неравновесная термодинамика сильных воздействий на вещество / Л.С. Метлов, А.В. Анциферов // Физика и техника высоких давлений. – 2007. – Т. 17, № 2. – С. 20-25.
22. **Метлов Л.С.** Термодинамика сильных воздействий на вещество / Л.С. Метлов // Физика и техника высоких давлений. – 2007. – Т. 17, № 3. – С. 71-82.

23. **Метлов Л.С.** Термодинамика неравновесных процессов в приложении к интенсивным пластическим деформациям / Л.С. Метлов // Известия РАН. С. Физическая. – 2008. – Т. 72, № 9. – С. 1353-1357.
24. **Метлов Л.С.** Неравновесная эволюционная термодинамика. Теория и эксперимент / Л.С. Метлов // Физика и техника высоких давлений. – 2008. – Т. 18, № 3. – С. 53-61.
25. Глезер А.М. Мегапластическая деформация твердых тел / А.М. Глезер, **Л.С. Метлов** // Физика и техника высоких давлений. – 2008. – Т. 18, № 4. – С. 21-35.
26. **Метлов Л.С.** Общие термодинамические механизмы ИПД и сверхпластичности / Л.С. Метлов, М.М. Мышляев // Физика и техника высоких давлений. – 2009. – Т. 19, № 4. – С. 19-28.
27. **Metlov L.S.** Formation of the internal structure of solids under severe load / L.S. Metlov // Physical Review E. – 2010. – V. 81. – P. 051121(9).
28. Еремейченкова Ю.В. Солитоны в картине теплового равновесия в нелинейных цепочках / Ю.В. Еремейченкова, **Л.С. Метлов**, А.Ф. Морозов // Вісник Донецького університету. Сер. А: Природничі науки. – 2003. – В. 1. – С. 229-233.
29. **Метлов Л.С.** Предельные структуры ИПД. Температурные эффекты. / Л.С. Метлов // Вісник Донецького університету. Сер. А: Природничі науки. – 2006. – В. 2. – С. 169-174.
30. **Метлов Л.С.** Система неравновесных потенциалов при описании ИПД / Л.С. Метлов // Вісник Донецького університету. Сер. А: Природничі науки. – 2007. – В. 1. – С. 167-176.
31. **Метлов Л.С.** Ландау теория ИПД с учетом упрочнения и неоднородности / Л.С. Метлов // Вісник Донецького університету. Сер. А: Природничі науки. – 2007. – В. 2. – С. 108-118.
32. **Метлов Л.С.** Мезоскопическая неравновесная термодинамика твердых тел / Л.С. Метлов // Вісник Донецького університету. Сер. А: Природничі науки. – 2008. – В. 1. – С. 250-267.
33. **Метлов Л.С.** Неравновесная эволюционная термодинамика твердых тел / Л.С. Метлов // Вісник Донецького університету. Сер. А: Природничі науки. – 2008. – В. 2. – С. 209-223.
34. **Метлов Л.С.** Структурная перестройка твердых тел / Л.С. Метлов // Вісник Донецького університету. Сер. А: Природничі науки. – 2009. – В. 1. – С. 219-238.
35. **Метлов Л.С.** Двухуровневая неравновесная эволюционная термодинамика ИПД / Л.С. Метлов // Вісник Донецького університету. Сер. А: Природничі науки. – 2009. – В. 2. – С. 136-152.
36. Зборщик М.П. Механизм зонального разрушения горных пород вокруг технологических выработок / М.П. Зборщик, **Л.С. Метлов**, А.Ф. Морозов // VIII-й Всероссийский съезд по теоретической и

- прикладной механике, Пермь, 23-29 августа 2001 г.: Аннот. докл. – Пермь: Ин-т механики сплошных сред УрО РАН, 2001. – С. 272-273.
37. **Метлов Л.С.** Структурная стабилизация дислокаций и неравновесных границ нанозерен в процессе ИПД на примере двухмерных кристаллитов / Л.С. Метлов // Междунар. семинар “Структурные основы модификации материалов методами нетрадиционных технологий (МНТ VIII)”, Обнинск, 14-18 июня 2005г.: тез. докл. – Обнинск: Ин-т атомной энергетики, 2005. – С. 32-33.
38. **Метлов Л.С.** МД – моделирование интенсивных пластических деформаций / Л.С. Метлов // Междунар. конф. “Современное материаловедение: достижения и проблемы”, Киев, 26-30 сентября 2005 г.: тез. докл. – К.: Академперіодика, 2005. – С. 806-807.
39. **Метлов Л.С.** Особенности дислокационных реакций на примере двухмерных кристаллитов / Л.С. Метлов // Междунар. научн. конф. “Актуальные проблемы физики твердого тела (ФТТ-2005)”, Минск, 26-28 октября 2005 г.: сборн. докл. – Минск: Издательский центр БГУ, 2005. – С. 120-122.
40. **Метлов Л.С.** Влияние структурных состояний ядер дислокаций на свойства наноматериалов / Л.С. Метлов // XVI Петербургские Чтения по проблемам прочности, Санкт-Петербург, 14-16 марта 2006 г.: сборн. тез. – С.-Пб.: ФТИ, 2006. – С.92.
41. **Метлов Л.С.** Термодинамика ИПД нано- и аморфных материалов / Л.С. Метлов // III-я евразийская научно-техническая конференция «Прочность неоднородных структур», Москва, 18-20 апреля 2006 г.: тез. докл. – М.: МИСиС, 2006. – С. 132.
42. **Метлов Л. С.** Структурные состояния и необычная динамика дислокаций / Л.С. Метлов // Междунар. конф. “Физика конденсированного состояния вещества при низких температурах”, Харьков, 20-22 июня 2006 г.: тез. докл. – Харьков: ННЦ ХФТИ, 2006. – С.236-239.
43. **Метлов Л. С.** Двухбитовая динамика дислокационных ансамблей / Л.С. Метлов // 9-я междунар. конф. «Высокие давления – 2006. Фундаментальные и прикладные аспекты», Судак, Крым, 17-22 сентября 2006 г.: тезисы. – Донецк: ДонФТИ, 2006. – С. 71.
44. **Метлов Л. С.** Качественная теория сверхпластичности и дробления зерен в процессе интенсивных пластических деформаций / Л.С. Метлов // Четвертая междунар. конф. «Материалы и покрытия в экстремальных условиях: исследования, применения, экологически чистые технологии производства и утилизация изделий», Жуковка, Большая Ялта, Крым, 18-22 сентября 2006 г.: Труды конф. – К.: Академперіодика, 2006. – С. 87.

45. **Метлов Л.С.** Неравновесная термодинамика многоуровневого разрушения квазихрупких твердых тел / Л.С. Метлов, А.В. Анциферов // 45-я междунар. конф. «Актуальные проблемы прочности», Белгород, 25-28 сентября 2006 г.: сборн. тез. – Белгород: БГУ, 2006. – С. 146.
46. **Metlov L.S.** Hierarchy of limiting structures and amorphous state at SPD / L.S. Metlov // 3th international conference on materials science and condensed matter physics, Chisinau, Moldova, October 3-6, 2006: Abstracts. – Chisinau: ELAN POLIGRAF, 2006 – P. 131.
47. **Метлов Л.С.** Термодинамическое описание фрагментации твердых тел / Л.С. Метлов // 1-я междунар. конф. “Деформация и разрушение материалов”, Москва, 13-16 ноября 2006 г.: Сборн. статей. – М.: ИМЕТ, 2006. – С. 764-766.
48. **Метлов Л.С.** Термодинамическая теория ИПД металлов с учетом трещинообразования / Л.С. Метлов, В.Н. Варюхин, А.В. Анциферов // Междунар. конф. «Мезоскопические явления в твердых телах», Донецк, 26 февраля – 1 марта 2007 г.: Тезисы. Донецк: ДонФТИ, 2007. – С. 99.
49. **Метлов Л.С.** Неравновесная и стационарная термодинамика интенсивных пластических деформаций / Л.С. Метлов // XVII Петербургские Чтения по проблемам прочности, Санкт-Петербург, 10-12 апреля 2007 г.: сборн. тез. – С.-Пб.: ФТИ, 2007. – С.175-1776.
50. **Метлов Л.С.** Проблемы теории интенсивной пластической деформации / Л.С. Метлов // Междунар. семинар “Структурные основы модификации материалов методами нетрадиционных технологий (МНТ- IX)”, Обнинск, 12-16 июня 2007 г.: тез. докл. – Обнинск: Ин-т атомной энергетики, 2007. – С. 98-100.
51. **Метлов Л.С.** Термодинамика неравновесных процессов в приложении к интенсивным пластическим деформациям / Л.С. Метлов // IV международная школа-конференция «Микромеханизмы пластичности, разрушения и сопутствующих явлений» (MPFP-2000), Тамбов, 24-30 июня 2007 г.: Материалы конф. – Тамбов: ТГУ, 2007. – С. 225-228.
52. **Varyukhin V.** Formation of structure and substructure during SPD / V.Varyukhin, B. Efros, **L. Metlov**, N. Efros, V. Ivchenko // Intern. symp. «Bulk nanostructured materials. From fundamentals to innovations», Ufa, Russian, August 14-18, 2007: Proceeding of symp. – Ufa: Ufa state aviation technical university, 2007. – P.157-158.
53. **Метлов Л.С.** Система термодинамических потенциалов при описании неравновесных процессов / Л.С. Метлов // 2-я междунар. конф. “Деформация и разрушение материалов”, Москва, 8-11 октября 2007 г.: Сборн. статей. – М.: ИМЕТ, 2007. – С. 642-644.

54. **Метлов Л.С.** Термодинамическая теория дробления зерен в процессе интенсивной пластической деформации / Л.С. Метлов // Междунар. конф. HighMatTech, Киев, 15-19 октября 2007 г.: тез. конф. – К.: УМО, 2007. – С. 66.
55. **Метлов Л.С.** Эволюция размеров зерен в процессе ИПД с позиции теории фазовых переходов Ландау / Л.С. Метлов // Междунар. конф. «Актуальные проблемы физики твердого тела» ФТТ-2007, Минск, 23-26 октября 2007 г.: Сборн. докл. – Минск: Издательский центр БГУ, 2007. – Т. 3. – С. 55-57.
56. **Метлов Л.С.** Ландау-теория ИПД с учетом упрочнения / Л.С. Метлов // Междунар. конф. «Наноразмерные системы. Строение, свойства, технологии» НАНСИС-2007, Киев, 21-23 ноября 2007 г.: тез. докл. – К.: Академперіодика, 2007. – С. 63.
57. **Метлов Л.С.** Теория стабилизации ε -фазы / Л.С. Метлов, Б.М. Эфрос // 19-я уральская школа металлургов термистов "Актуальные проблемы физического металловедения сталей и сплавов", Екатеринбург, 4-8 февраля 2008 г.: тез. докл. – Екатеринбург: УГТУ-УПИ, 2008. – С.151.
58. **Метлов Л.С.** Многоуровневая эволюционная кинетика дефектов / Л.С. Метлов // I Всероссийская конференция ММПСН–2008 «Многомасштабное моделирование процессов и структур в нанотехнологиях», Москва, 12-14 марта 2008 г.: Сборн. тез. докл. – М.: МИФИ, 2008. – С. 210-212.
59. **Метлов Л.С.** Автоволновые переходы между нано- и аморфными состояниями в процессе ИПД / Л.С. Метлов // IV-я Евразийская научно-практической конференции "Прочность неоднородных структур", Москва, 8-10 апреля 2008 г.: тез. докл. – М.: МИСиС, 2008. – С. 219.
60. **Метлов Л.С.** Мезоскопическая термодинамика неравновесных процессов / Л.С. Метлов // 1-я междунар. научн. конф. "Наноструктурные материалы - 2008: Беларусь-Россия-Украина", Минск, 22-25 апреля 2008 г.: Материалы конф. – Минск: Белорусская наука, 2008. – С. 198.
61. **Метлов Л.С.** Неравновесная эволюционная термодинамика дефектов / Л.С. Метлов // 10-я междунар. конф. «Высокие давления – 2008. Фундаментальные и прикладные аспекты» Судак, Крым, 16-20 сентября 2008 г.: Тезисы. – Донецк: ДонФТИ, 2008. – С. 44.
62. **Метлов Л.С.** Теория вакансий с позиций мезоскопической неравновесной термодинамики / Л.С. Метлов // Пятая междунар. конф. «Материалы и покрытия в экстремальных условиях: исследования, применения, экологически чистые технологии производства и утилизации изделий» Большая Ялта, Жуковка, АО

- Крым, 22-26 сентфбря 2008 г.: тез. докл. – К.: Академперіодика, 2008. – С. 24.
63. **Метлов Л.С.** Неравновесная эволюционная термодинамика дефектов в приложении к мегапластической деформации / Л.С. Метлов // Междунар. конф. «Современные проблемы физики металлов», Киев, 7-9 октября 2008 г.: Сборн. тез. – К.: Ин-т металлофизики, 2008. – С.123.
64. **Метлов Л.С.** Термодинамическая теория плавления сверхтонкой пленки смазки / Л.С. Метлов, В.А. Хоменко, Я.А. Ляшенко // Міжнародна наукова конференція «Фізико-хімічні основи формування і модифікації мікро- та наноструктур. FMMN'2008», Харків, 8-10 жовтня 2008 р.: Збірн. наук. праць. – Харків: Т. 1. – С. 206-209.
65. **Метлов Л.С.** Новая форма кинетических уравнений для структурных дефектов / Л.С. Метлов // 3-я междунар. конф. «Деформация и разрушение материалов и наноматериалов» DFMN, Москва, 12-15 октября 2009 г.: Сборн. материалов. – М.: ИМЕТ, 2009. – С. 351-352.
66. **Метлов Л.С.** Неравновесная термодинамика интенсивных воздействий / Л.С. Метлов // Междунар. конф. HighMatTech, Киев, 19-23 октября 2009 г.: тез. конф. – К.: УМО, 2009. – С. 65.
67. **Метлов Л.С.** Неравновесная термодинамика ультрамелкодисперсных систем / Л.С. Метлов // Всерос. научно-техн. конф. с междунар. участием «Ультрадисперсные порошки, наноструктуры, материалы», Красноярск, 15-16 октября 2009 г.: Труды конф. – Красноярск: Сибирский федеральный университет, 2009. – С. 7-10.

АННОТАЦИЯ

Метлова Л.С. Структурная перестройка и динамические эффекты в твердых телах. – Рукопись. Диссертация на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика твердого тела. – Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина НАН Украины, Донецк, 2010.

В диссертации представлены результаты теоретических исследований кинетики структурных дефектов, осуществленных методами молекулярной динамики и феноменологической неравновесной термодинамики с привлечением минималистических моделей. На 1D цепочке исследованы статистические особенности высокоэнергетических тепловых флуктуаций с учетом влияния не них нелинейных свойств цепочки. В компьютерном

эксперименте показано, что при низких энергиях тепловых флуктуаций они подчиняются статистике Гиббса, а при высоких энергиях подчиняются степенному закону. Для конкретных параметров модели определены коэффициенты степенного распределения. Показано, что доля высокоэнергетических флуктуаций значительно превосходит ту, которая следует из теоретического закона Гиббса, что может иметь важные последствия для расчета длительной прочности твердых тел.

Высокоэнергетические флуктуации вначале имеют длительную тенденцию к росту, что обеспечивает эффективность структурной перестройки твердого тела за счет таких флуктуаций (во-первых, они имеют более высокую энергию, во-вторых, действуют более длительное время). Объяснена статистическая причина этой тенденции, исходя из большего времени жизни более высокоэнергетических волн.

В следующем ряду минималистических 2D и 3D моделей молекулярной динамики исследована связь между генерацией структурных дефектов и генерацией энтропии теплового движения. Посредством цифровой фильтрации записи теплового движения (скорости движения) некоторой произвольно выбранной частицы системы осуществлено разделение теплового движения на две компоненты – на высокочастотное (равновесное) движение и на низкочастотное (неравновесное) движение, связанное с динамическими переходными процессами при генерации дефектов (акустическая эмиссия). Путем усреднения квадрата скорости (кинетической энергии) такой частицы получена статистически устойчивая характеристика теплового движения как для равновесной, так и для неравновесной части, которым можно придать смысл температуры соответствующей подсистемы.

На примере 2D модели исследованы дислокации с локализованными и делокализованными ядрами. В компьютерном эксперименте показано, что при сдвиговом деформировании могут образовываться границы зерен, состоящие из локализованных дислокаций, обладающих более низкой подвижностью. Для приведения их в движение необходимо приложить большие усилия (более высокий предел пластического течения), в то же время модельный образец был деформирован без нарушения сплошности в начальном и конечном состоянии, то есть, пластически.

В диссертации на примере квази-2D модели исследовано растяжение системы, состоящей из периодически чередующихся «субзерен» с различной ориентацией осей симметрии (90° границы). Показано, что в результате растяжения формируется структура, близкая к идеальной структуре кристаллических усов. В другом компьютерном эксперименте при растяжении квази-2D модели с малоугловой границей (дислокационная стенка) наблюдался эффект быстрого движения границы со скоростью до 0.4 от скорости звука для данной модели.

В диссертации рассмотрен альтернативный метод макроскопических частиц, с помощью которого впервые в численном варианте исследовано влияние структурных ослаблений на спектр упругих волн, возникающих при соударении двух твердых тел.

Для исследования кинетики дефектов на больших масштабах в диссертации разработан альтернативный подход, базирующийся на кинетических уравнениях в терминах внутренней и модифицированной свободной энергии. В рамках этого подхода рассмотрены различные приближения задачи: а) двухуровневое, одномодовое; б) одноуровневое двухмодовое и в) двухуровневое двухмодовое. В рамках этих приближений процесс фрагментации твердых тел описан, как структурно-фазовый переход между двумя устойчивыми состояниями (модами). В рамках подхода получена кривая упрочнения твердого тела: на начальной стадии она совпадает с законом Холла-Петча, на промежуточной стадии – с линейным законом, а на завершающей стадии в некоторых случаях наблюдается квадратичный закон упрочнения.

Разработанная методология была применена к описанию структурно-фазовых переходов между аморфным и нанокристаллическим состоянием в аморфных сплавах, для описания эффектов *stick-slip* в тонких смазках, гистерезисных явлений в γ - ϵ переходах в марганцевых сплавах железа. Она была применена также для описания формирования зональных структур вокруг полостей в сильно гидростатически сжатом твердом теле.

Ключевые слова: молекулярная динамика, парный потенциал взаимодействия, неравновесная термодинамика, нелинейные волны, структурная перестройка, переходные динамические эффекты, структурно-фазовые переходы, кинетические уравнения.

АНОТАЦІЯ

Метлов Л.С. Структурна перебудова і динамічні ефекти в твердих тілах. – Рукопис. Дисертація на здобуття наукового ступеня доктора фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.07 – фізика твердого тіла. – Донецький фізико-технічний інститут ім. О.О. Галкіна НАН України, Донецьк, 2010.

В дисертації представлені результати теоретичних досліджень кінетики структурних дефектів методами молекулярної динаміки і феноменологічної нерівноважної термодинаміки із застосуванням ряду мінімалістичних моделей. На нелінійному ланцюжку показано, що доля високоенергетичних теплових флуктуацій значно перебільшує ту, яка має бути, виходячи із теоретичного закону Гіббса. Для мінімалістичних 2D і 3D моделей молекулярної динаміки за допомогою цифрової фільтрації здійснено розподіл теплового руху на дві компоненти – на високочастотний (рівноважний) рух і на низькочастотний (нерівноважний) рух. Вивчено

вплив структури ядер 2D дислокацій (локалізованих і делокалізованих) на процеси фрагментації при зсувному деформуванні. На прикладі квази-2D моделі досліджено растягнення системи, яка складається із «субзерен», що періодично чергуються, з 90° границями між ними. Показано, що у наслідок розтягнення формується структура, яка є близькою до структури кристалічних вусів. В дисертації розглянуто альтернативний метод макроскопічних частинок, за допомогою якого уперше у числовому варіанті досліджено вплив структурних послаблень на спектр пружних хвиль, які виникають при зіткненні твердих тіл. Для дослідження кінетики дефектів розглянуто альтернативний підхід, який базується на кінетичних рівняннях в термінах внутрішньої і модифікованої вільної енергії. В рамках цього підходу здобута крива зміцнення твердого тіла, яка на початковій стадії деформування співпадає з законом Холла-Петча, на проміжній стадії – з лінійним законом, а на завершальній стадії в деяких випадках спостерігається квадратичний закон зміцнення. Методологія застосована до опису структурно-фазових переходів у аморфних сплавах, ефекту *stick-slip* в мастилах, гістерезисних явищ у γ - ϵ переходах у сплавах заліза, формування зональних структур навколо порожнечь у гідростатично стисненому твердому тілі.

Ключові слова: молекулярна динаміка, парний потенціал взаємодії, нерівноважна термодинаміка, нелінійні хвилі, структурна перебудова, перехідні динамічні ефекти, структурно-фазові переходи, кінетичні рівняння.

SUMMARY

Metlov L.S. Structural re-organization and dynamical effects in solids. – Manuscript. Thesis for a competition of doctor science degree in physics and mathematics, 01.04.07 speciality – physics of solids. – Donetsk Institute for Physics and Technology named after A.A. Galkin of NAS of Ukraine, Donetsk, 2010.

In the thesis the results of theoretical investigations of kinetics of structural defects by methods of molecular dynamics and phenomenological nonequilibrium thermodynamics with application of a sequence of minimal models are present. On a nonlinear chain it is shown that a fraction of high-energetic thermal fluctuations exceeds significantly those, which must be from the theoretical Gibbs law. In next series of minimalistic 2D and 3D models of molecular dynamics the separation of thermal motion on two components – high-frequency (equilibrium) and low-frequency (nonequilibrium) motions – is carried out. It is studied an influence of 2D dislocation core structures (localized and delocalized) on processes of fragmentation at shear deformation. On an example of quasi-2D model it is investigated tension of a system consisting from

periodically alternating «subgrains» with 90° boundaries between them. It is shown, that in consequence of tension the structure, which is similar to structure of crystal whiskers, is formed. In the thesis an alternative method of macroscopic particles is considered, with help of which influence of structural weakening on spectrum of elastic waves at collision of solids is firstly investigated. For investigation of kinetics of defects the alternative approach, which is based on kinetic equations in terms of internal and modified free energies, is considered. In the framework of the approach the strengthening curve, which at beginning stage of deformation coincides with Hall-Petch law, at intermediate stage – with linear law, and at final stage in some cases with quadratic law, is obtained. The methodology is applied to description of structural-phase transitions in amorphous alloys, *stick-slip* effect in lubricants, hysteretic phenomena at γ - ϵ transitions in iron alloys and formation zonal structures of fracturing around cavities in hydrostatic pressed solids.

Key words: molecular dynamics, pair potential of interaction, nonequilibrium thermodynamics, nonlinear waves, structural re-organization, transition dynamical effects, structural-phase transitions, kinetic equations.