

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
ФЕДЕРАЛЬНОЕ АГЕНТСТВО ПО ОБРАЗОВАНИЮ

Государственное образовательное учреждение
высшего профессионального образования
«Оренбургский государственный университет»

Л.В. ШАШКОВА
В.К. ШАШКОВА
Э.А. САВЧЕНКОВ

ФИЗИКА ТВЕРДОГО ТЕЛА: КРИСТАЛЛИЧЕСКОЕ СТРОЕНИЕ, ПРОЧНОСТЬ, ПЛАСТИЧНОСТЬ И РАЗРУШЕНИЕ

Рекомендовано к изданию Ученым советом государственного образовательного учреждения высшего профессионального образования «Оренбургский государственный университет» в качестве учебного пособия для студентов, аспирантов, преподавателей вузов, а также инженеров и научных работников, специализирующихся в конкретных прикладных областях.

Оренбург 2009

УДК 531.36 (075.8)

ББК 22.3я73

Ш 32

Рецензенты

доктор технич. наук Клевцов Г.В., доктор физ.-мат. наук Манаков Н.А.

Шашкова, Л.В.

Ш 32

**Физика твердого тела: кристаллическое строение, прочность, пластичность и разрушение: учебное пособие/Л.В. Шашкова, В.К. Шашкова, Э.А. Савченков - Оренбург: ГОУ ОГУ, 2009. – 223 с.
ISBN**

Настоящее учебное пособие содержит классическое изложение некоторых разделов физики твердого тела, посвященных в основном прикладным вопросам, а также современные представления физики пластичности, прочности и разрушения твердых тел. Книга написана в качестве учебного пособия по физике твердого тела для студентов старших курсов естественнонаучных и инженерных факультетов, начинающих самостоятельную работу специалистов, инженеров и научных работников, не имеющих достаточной подготовки по физике твердого тела. Предлагаемое учебное пособие поможет получить, во-первых, представление о строении и свойствах твердых тел и, во-вторых, достаточную подготовку для специальных исследований в конкретных прикладных областях.

Ш 1604030000

ISBN

© Шашкова Л.В., 2009

© ГОУ ОГУ, 2009

Содержание

Предисловие.....	7
Введение.....	8
1 Внутренняя структура твердых тел.....	9
1.1 Элементы структурной кристаллографии.....	9
1.1.1 Аморфное и поликристаллическое состояние.....	9
1.1.2 Кристаллические решетки. Кристаллические системы (сингонии). Элементарные ячейки. Решетки Бравэ.....	12
1.1.3 Координаты атомов (базис) в элементарной ячейке. Индексы плоскостей (индексы Миллера) и направлений в кристаллической решетке.....	18
1.1.4 Кристаллографические зоны и оси зон. Межплоскостное расстояние. Совокупность плоскостей.....	23
1.1.5 Контрольные вопросы к разделу 1.1.....	25
1.2. Силы связи.....	27
1.2.1 Силы Ван-дер-Ваальса.....	27
1.2.2 Ионная связь.....	30
1.2.3 Ковалентная связь.....	31
1.2.4 Металлическая связь.....	35
1.2.5 Водородная связь.....	36
1.2.6 Сопоставление различных видов связи.....	38
1.2.7 Силы отталкивания.....	38
1.2.8 Классификация твердых тел по характеру сил связи.....	39
1.2.9 Явление полиморфизма.....	44
1.2.10 Контрольные вопросы к разделу 1.2.....	47
1.3. Несовершенства в кристаллах.....	49
1.3.1 Общие замечания.....	49
1.3.2 Тепловые колебания.....	50
1.3.3 Тепловая энергия твердых тел.....	53

1.3.4	Теплоемкость твердых тел (классическая модель).....	56
1.3.5	Флуктуации энергии.....	59
1.3.6	Смещенные атомы.....	62
1.3.7	Вакансии и атомы внедрения.....	63
1.3.8	Контрольные вопросы к разделу 1.3.....	68
2	Механические свойства твердых тел.....	71
2.1	Деформации твердого тела.....	71
2.1.1	Упругая и пластическая деформации. Закон Гука.....	71
2.1.2	Основные закономерности пластического течения кристаллов.....	75
2.1.3	Механическое двойникование.....	79
2.1.4	Теоретическая и реальная прочности кристаллов на сдвиг.....	80
2.1.5	Контрольные вопросы к разделу 2.1.....	82
2.2	Дислокации.....	84
2.2.1	Понятие о дислокациях. Основные типы дислокаций.....	84
2.2.2	Силы, необходимые для перемещения дислокаций.....	88
2.2.3	Источники дислокаций. Упрочнение кристаллов.....	89
2.2.4	Контрольные вопросы к разделу 2.2.....	93
2.3	Прочность твердых тел.....	94
2.3.1	Теоретическая прочность твердых тел.....	94
2.3.2	Реальная (техническая) прочность твердых тел.....	97
2.3.3	Временная прочность твердых тел.....	101
2.3.4	Пути повышения прочности твердых тел.....	104
2.3.5	Контрольные вопросы к разделу 2.3.....	107
3	Синергетическая парадигма современной науки.....	109
3.1	Основные понятия и определения синергетики.....	109
3.1.1	К истории вопроса.....	109
3.1.2	Аттракторы.....	115

3.1.3	Кинетические фазовые переходы и бифуркации.....	118
3.1.4	Флуктуации.....	123
3.1.5	Контрольные вопросы к разделу 3.1.....	125
3.2	Основные принципы синергетики.....	127
3.2.1	Принцип подчинения.....	127
3.2.2	Универсальный критерий эволюции Глендсдорфа-Пригожина. S-теорема Климонтовича.....	131
3.2.3	Принцип «нелинейность — источник упорядоченности».....	132
3.2.4	Контрольные вопросы к разделу 3.2.....	133
3.3	Самоорганизация диссипативных структур в неравновесных системах.....	135
3.3.1	Основные свойства самоорганизующихся диссипативных структур.....	135
3.3.2	Примеры самоорганизации диссипативных структур в физике.....	137
3.3.3	Периодические процессы в неравновесных системах.....	143
3.3.4	Примеры самоорганизации диссипативных структур в биологии...	147
3.3.5	Самоорганизации диссипативных структур в материаловедении...	148
3.3.5	Контрольные вопросы к разделу 3.3.....	152
4	Синергетика пластической деформации и разрушения.....	154
4.1	Коллективное поведение структурных дефектов при пластической деформации.....	154
4.1.1	Сильно возбужденные состояния в кристаллах.....	155
4.1.2	Пластическая деформация как релаксационный процесс.....	157
4.1.3	Структурные уровни деформации.....	159
4.1.4	Классификация дислокационных субструктур.....	162
4.1.5	Эволюция микроструктур в процессе пластической деформации...	164
4.1.6	Ротационные процессы и дисклинации.....	170
4.1.7	Контрольные вопросы к разделу 4.1.....	173

4.2	Эффекты неустойчивости пластической деформации на макроуровне.....	175
4.2.1	Эффект упругого последствия при разгрузке и температурный эффект деформации.....	175
4.2.2	Волны пластической деформации. Эффект Чернова – Людерса.....	177
4.2.3	Эффект Портевина-Ле-Шателье (прерывистое течение).....	181
4.2.4	Контрольные вопросы к разделу 4.2.....	185
4.3	Элементы линейной механики разрушения.....	188
4.3.1	Пластическая деформация и разрушение.....	188
4.3.2	Классификация трещин.....	190
4.3.3	Коэффициент интенсивности напряжений и вязкость разрушения..	190
4.3.4	Контрольные вопросы к разделу 4.3.....	193
4.4	Микроскол - критическая стадия хрупкого разрушения материалов.....	195
4.4.1	Основные свойства субмикротрещин.....	195
4.4.2	Микроскол – первичный источник разрушения металлов в процессе их пластичности.....	196
4.4.3	Сопротивление микросколу – напряжение разрушения на пределе текучести металла.....	199
4.4.4	Контрольные вопросы к разделу 4.4.....	201
4.5	Физические модели элементарных носителей разрушения (микроскопическая картина разрушения).....	203
4.5.1	Дилатонный механизм прочности, пластичности и разрушения твёрдых тел.....	203
4.5.2	Фрустронная модель элементарного носителя разрушения.....	208
4.5.3	Контрольные вопросы к разделу 4.5.....	211
4.6	Синергетика и теория фракталов – методологическая основа решения актуальных проблем физики твердого тела.....	212
4.6.1	Понятие о фракталах.....	212
4.6.2	Числа Фибоначчи и пропорция "золотого сечения".....	216
4.6.3	От дислокационного к фрактальному материаловедению.....	218
4.6.4	Контрольные вопросы к разделу 4.6.....	221
	Список использованных источников.....	223

Предисловие

Учебное пособие, прежде всего, предназначено для студентов технических специальностей, подготовлено в соответствии с программой спецкурса по физике твердого тела и соответственно с учетом требований государственных образовательных стандартов.

Данное пособие содержит четыре главы. В первой главе рассмотрено строение и тепловые свойства кристаллов. Даны основные представления о типах атомной связи. Вторая глава посвящена описанию дефектов и механических свойств твердых тел. В третьей главе изложены основные понятия, идеи и принципы современной науки синергетики. Приведены примеры самоорганизации диссипативных структур. В четвертой главе пластическая деформация и разрушение твердых тел рассматриваются с позиций синергетики, вводятся представления о фракталах.

В написании учебного пособия участвовали сотрудники кафедры общей физики Оренбургского Государственного университета (ОГУ): доценты Шашкова Л. В., Шашкова В. К., Савченков Э. А.

Шашковой Л. В. написаны введение, глава 3, разделы 4.1, 4.2, 4.6, вопросы для самоконтроля по всем разделам. Шашковой В. К. – глава 1, разделы 2.1, 2.2, параграфы 2.3.1, 2.3.3, 2.3.4. Савченковым Э. А. – предисловие, параграфы 2.3.2, 4.3.2, разделы 4.4, 4.5. Совместно написаны Савченковым Э. А. и Шашковой Л. В. параграфы 4.3.1, 4.3.3.

Авторы благодарны рецензентам учебного пособия: декану физического факультета ОГУ, профессору Г. В. Клевцову, заведующему кафедрой общей физики ОГУ, профессору Н. А. Манакову за полезные замечания, учтенные авторами в окончательной редакции учебного пособия.

Введение

Настоящее учебное пособие содержит классическое изложение некоторых разделов физики твердого тела, посвященных в основном, прикладным вопросам, а также современные представления физики пластичности, прочности и разрушения твердых тел. В книге рассмотрены строение кристаллов и те их свойства, которые обусловлены кристаллической решеткой, - тепловые свойства, дислокации, другие дефекты. Даны основные представления о типах связей, поскольку возможность существования твердого состояния вещества обусловлена возникновением сил взаимодействия между структурными частицами. Рассмотрены классические представления о деформации твердого тела: упругой и пластической, а также вопросы, связанные с прочностью твердых тел: теоретической, реальной, временной. Кроме того, изложены прикладные вопросы теории твердого тела на современном уровне. Целая глава посвящена синергетике, ее идеям и принципам, а также основным понятиям, таким как аттракторы, кинетические фазовые переходы, бифуркации, флуктуации и другим. Приведены примеры самоорганизации диссипативных структур в физике, биологии, материаловедении. Последняя глава посвящена синергетике пластической деформации и разрушению. Деформируемое твердое тело является самоорганизующейся системой, в процессе эволюции которой происходит самоорганизация диссипативных структур со спонтанной их перестройкой вблизи точек бифуркаций. В данной главе дается обзор и анализ физических моделей, описывающих нелинейное поведение твердого тела под нагрузкой: стадийность деформационного упрочнения, эффекты пластической неустойчивости, эволюция дислокационных структур и других. При этом основное внимание уделяется синергетическим подходам, а анализ эволюции деформируемого металла проводится с учетом иерархии масштабных уровней диссипации энергии и критериев, контролирующих переход с одного уровня на другой. Спонтанная самоорганизация микроструктуры относится к самым ярким и очевидным проявлениям динамических свойств неживой материи. Именно диссипативные структуры, определяя состояние системы в неравновесных условиях, в конечном счете, контролируют весь комплекс механических свойств материала с заданной исходной структурой. В заключении дается представление о фракталах, поскольку развитие физики твердого тела в последние годы привело к формированию новой парадигмы управления свойствами материалов путем управления фрактальной мезоструктурой. Синергетика расширила понятие структуры, придало ей универсальность, а теория фракталов позволила ввести новые количественные показатели структур в виде фрактальной размерности. Это является базой для моделирования структур различной природы.

1 Внутренняя структура твердых тел

1.1 Элементы структурной кристаллографии

1.1.1 Аморфное и поликристаллическое состояние

Атомы в кристалле располагаются в узлах пространственной решетки, которая повторяет себя во всех трех направлениях на протяжении всего кристалла. Многие из первых кристаллографов (особенно в XVIII веке) считали, что кристаллы состоят из большого числа одинаковых мельчайших объемов, крепко связанных между собой и образующих трехмерную конструкцию. Кеплер, Гук и Гюйгенс полагали, что элементарные объемы имеют сферическую форму. Позднее Гриньон, Тоберн Бергман и Рома де Лиль высказали предположение о полиэдрической форме элементарных объемов. Опираясь на эти качественные представления, Гаюи вывел количественные соотношения, основанные на измерении неизменных для данной кристаллической формы углов между гранями и выраженные через повторяющиеся элементы данной структуры.

Однако действительное понимание строения кристаллов как пространственной атомной решетки ведет свое начало от открытия Максом фон Лауэ в 1912 г. дифракции рентгеновских лучей на кристаллах. Тогда рентгеновские лучи впервые были использованы для исследования внутренней структуры кристаллов. Таким образом, кристаллографы неожиданно оказались вооружены методами, позволяющими определить точный размер и форму элементарного объема структуры кристалла. Впервые стало возможным объяснить свойства кристаллических тел с позиций их однозначно определенного, а не постулированного внутреннего атомного строения. Значение этого открытия для фундаментальной и прикладной науки огромно.

Новая кристаллография, возникшая при открытии явления рентгеновской дифракции в 1912 г. и в дальнейшем развитая с помощью методов электронной и нейтронной дифракции, оказалась настолько интересной и ценной наукой, что и в настоящее время может быть отнесена к наиболее передовым и активно развиваемым областям знания. Кристаллография внесла большой вклад в исследование минералов, металлов, биологических веществ, в фармакологию, текстильную промышленность, в разработку новых синтетических волокон, пластмасс, органических и неорганических покрытий и материалов. Поэтому знание основ кристаллографии, ее методов, возможностей и достижений становится все более необходимым элементом образования физиков, химиков, геологов, инженеров-металлургов и других специалистов.

Кристаллическое упорядоченное состояние полностью отсутствует в *газе* вследствие хаотического движения атомов или молекул, его составляющих, при больших расстояниях между ними. Оно также отсутствует в *жидкостях* и *стеклах*, хотя в них и можно обнаружить стремление атомов выстраиваться рядом друг с другом на коротких, примерно равных расстояниях, однако этот

порядок не распространяется на большие расстояния и не имеет периодичности в пространстве. Отдельные группы атомов могут по своей конфигурации напоминать пространственную решетку, которую имел бы весь объем вещества в случае кристаллизации, однако другие, следующие, подобные группировки могут отличаться от предыдущих по порядку расположения атомов. В ряде случаев возможно возникновение нестационарного локального ближнего атомного порядка, который вообще не встречается в данном веществе, когда оно обладает полностью кристаллической структурой. Время существования каждого определенного локального порядка очень мало, и эти атомные группировки претерпевают постоянные превращения вследствие теплового движения атомов.

Жидкость имеет определенный объем, но не имеет формы; при понижении температуры жидкость замерзает и превращается в твердое тело, обладающее как определенным объемом, так и формой.

Твердое тело может быть **кристаллическим** и **некристаллическим** (аморфным, стекловидным); последнее на самом деле является состоянием переохлажденной жидкости и отличается от обычной жидкости лишь по своим физическим свойствам. Обычно для разделения веществ на жидкие и стекловидные используется **свойство вязкости**: если вязкость вещества не превышает 10^{14} Па·с, его относят к жидким; при большей вязкости вещество считается твердым. Если переход жидкое $\leftrightarrow$ стеклообразное состояние при нагреве и охлаждении вещества достаточно плавный, то переход жидкое $\leftrightarrow$ кристаллическое состояние гораздо более резкий. Кристаллы могут образовываться и расти в аморфном веществе, если его нагреть на определенную, достаточно высокую температуру, обеспечивающую необходимую подвижность атомов. Это так называемый процесс расстекловывания аморфных тел, иногда называемый кристаллизацией аморфных веществ.

Кристаллические тела деформируются совсем по-другому, чем переохлажденные жидкости: остаточная деформация в них практически отсутствует, если прикладываемые напряжения не достигли некоторого критического уровня; даже при более высоких напряжениях степени пластической деформации кристаллических и стекловидных тел очень сильно различаются между собой.

Стекловидное состояние может быть получено не только у веществ, структура которых очень сложна, когда они имеют кристаллическое состояние, но также и у веществ с простой кристаллической структурой; это справедливо для тех случаев, когда присутствуют все виды межатомной связи – металлическая, ковалентная, ионная и вандер-ваальсова. Металл нельзя охарактеризовать как переохлажденную жидкость, однако получение аморфного или полуаморфного состояния в ряде металлов и металлических сплавов вполне возможно. Некоторые металлы, переведенные в состояние пара, при быстром и глубоком охлаждении затвердевают в аморфном состоянии; другие металлы приобретают аморфную структуру в результате мгновенного затвердевания мелких порций жидкости (со скоростью несколько миллионов градусов в 1 с), например, на охлажденной металлической подложке. Кристаллическая структура некоторых металлов может быть полностью разрушена при очень больших степенях де-

формации, достигаемых при воздействии весьма сильного сжатия. Пластическая деформация приповерхностных объемов твердых тел, возникающая при их механической обработке, тоже в ряде случаев приводит к локальным нарушениям кристаллического строения.

Аморфные тела обычно *изотропны*, т. е. они имеют одинаковые физические и химические свойства в различных направлениях; в кристаллах же большинство свойств зависит от направлений, в которых они определяются. Зависимость от направления (*анизотропия*) в кристаллах в большей или меньшей степени обнаружена для следующих физических свойств: тепло- и электропроводности, термического расширения, модуля упругости, оптических констант, а также химической активности поверхностей (граней) кристалла. Сильная анизотропия обнаруживается при определении механических свойств кристаллов.

Анизотропия кристаллов особенно заметна и четко проявляется в процессе их роста: если последний не искажен воздействием стенок формы (сосуда) или другими помехами, то растущие грани по конфигурации будут повторять внутреннюю (атомную) структуру кристалла.

Вещества могут быть *поликристаллическими*, с зернами настолько мелкими, что многократная периодичность, повторяемость структуры становится невозможной. Существуют и другие «скрыто кристаллические» состояния. Когда атомные слои располагаются один над другим на равных расстояниях, но при этом имеют случайную ориентацию друг относительно друга, периодичность структуры может существовать лишь в одном направлении в кристалле. Кристаллическая упорядоченная структура в двух направлениях может существовать в атомных слоях, примером которых является мономолекулярная пленка одного вещества на поверхности другого. Высокомолекулярные полимеры, состоящие из длинных молекул-цепочек, содержат обычно многочисленные группы атомов с ближним порядком, количество и размер которых определяются межмолекулярными связями. Степень упорядочения ансамблей длинных молекулярных цепочек (их выстраивание параллельно друг другу) весьма неодинакова для различных веществ и даже в пределах одной субстанции определяется очень многими факторами.

Все реальные кристаллы имеют незанятые атомные узлы в своей кристаллической решетке, т. е. содержат вакансии; отдельные атомные слои или же их части в реальных кристаллах смещены из регулярных положений, определенных периодичностью их атомного строения. Легирование кристаллов может привести либо к размещению атомов примеси между атомами матрицы, либо к смещению атомов матрицы из узлов пространственной кристаллической решетки, причем это смещение может быть как хаотичным (изотропным), так и упорядоченным (анизотропным). Все эти отклонения от совершенной (идеальной) кристаллической формы вызывают значительные изменения физических, химических и механических свойств, которые называются *структурно-чувствительными*. Однако прежде чем исследовать несовершенства кристаллического строения, необходимо рассмотреть природу «идеальных» кристаллов, наиболее важные закономерности строения, концепции их описания и классификацию.

1.1.2 Кристаллические решетки. Кристаллические системы (сингонии). Элементарные ячейки. Решетки Бравэ

Кристаллическим веществом называется такое, в котором материальные частицы (атомы, ионы, молекулы) расположены с правильной периодичностью в трех направлениях. Поскольку периодичность внутреннего строения является основной отличительной характеристикой вещества, уместно представить себе систему расположения атомов в виде некоторой объемной сетки, так называемой пространственной решеткой, в которой любую из точек (узлов) окружает равное число таких же точек (рисунок 1.1).

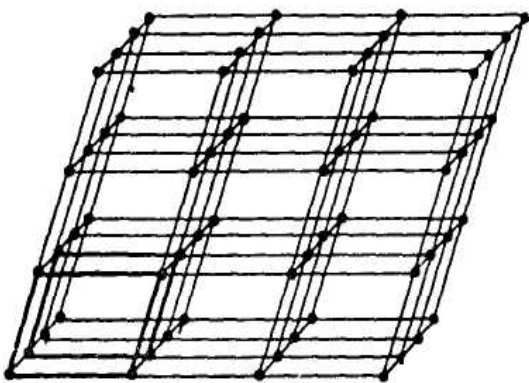


Рисунок 1.1

Таким образом, **пространственная решетка**, это — геометрический образ, служащий для рассмотрения схемы повторяемости структурных элементов в кристалле.

Очень часто термин «решетка» неправильно применяется как синоним «кристаллической структуры», что само по себе некорректно. Как отмечалось выше, понятие «решетка» используется для рассмотрения схемы повторяемости структурных элементов

в кристалле, но отнюдь не определяет расположение атомов в нем. Порядок расположения атомов обычно называют **структурой кристалла**. В природе возможно неограниченное число различных кристаллических структур, а типов решеток существует только 14.

Для того чтобы описать положение узла в решетке или атома в кристаллической структуре, необходимо определить его координаты относительно осей кристалла. Наиболее симметричные кристаллы могут быть описаны с помощью трехосной прямоугольной системы координат, в которой оси соответствуют трем граням куба (кубическая система координат). Каждая из пространственных решеток характеризуется некоторой наиболее удобной для нее (стандартной) системой координат; в кристаллографии используется 7 различных систем координат отличающихся друг от друга по величине осей (трансляций) и углов между ними. Эти 7 различных **кристаллических систем (сингоний)** широко используются в классификации минералов.

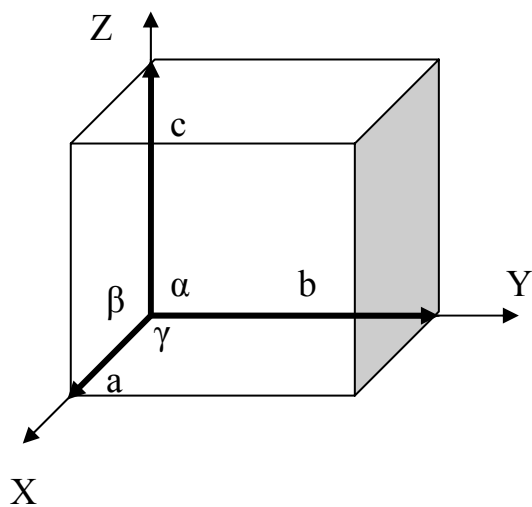


Рисунок 1.2

В кристаллографии обычно используется правосторонняя система координат; векторы a , b , c на рисунке 1.2 расположены согласно правилу правой руки (правого буравчика). Угол, противолежащий вектору a , обозначается как α и т.

д. После того как кристаллическая структура будет определена, можно уже определять величину трансляций a , b , c в элементарной ячейке и углы между ними α , β , γ .

В таблице 1.1 приведены виды сингоний или кристаллических систем с некоторыми примерами принадлежащих к ним веществ.

Таблица 1.1

Система	Оси трансляций и углы между ними	Примеры
Триклинная	Все трансляции не равны между собой и наклонены друг к другу под различными неправильными углами: $a \neq b \neq c, \alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$	K_2CrO_7
Моноклинная	Три трансляции произвольной неравной длины, два угла из трех прямые: $a \neq b \neq c, \alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$	β -S, $CaSO_4 \cdot 2H_2O$ (гипс)
Орторомбическая (ромбическая)	Три трансляции неравны между собой и наклонены друг к другу под прямыми углами: $a \neq b \neq c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	α -S, Ga, Fe_3C (цементит)
Тетрагональная	Все оси под прямым углом друг к другу, две из них равны: $a = b \neq c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	β -S _n (белое олово), TiO_2
Кубическая	Три равные оси (трансляции) под прямыми углами друг к другу: $a = b = c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	Cu, Ag, Au, Fe, NaCl
Гексагональные	Три равные оси в одной плоскости под углом 120° друг к другу перпендикулярны четвертой произвольной длины: $a_1 = a_2 = a_3 \neq c$ (или $a_1 = b \neq c$), $\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$	Zn, Cd, NiAs
Ромбоэдрическая (тригональная)	Три равные оси наклонены друг к другу под равными непрямыми углами: $a = b = c, \alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$	As, Sb, Bi, кальцит

Векторы трансляций кристаллической решетки образуют ребра некоторого параллелепипеда, получившего название *элементарной ячейки*. Каждый кристалл сложен из периодически повторяющихся элементарных ячеек, одинаковых по размеру, форме и ориентировке в кристалле. Элементарная ячейка является как бы основным строительным кирпичиком для кристалла. Наименьший параллелепипед, с помощью которого можно построить всю пространственную решетку непрерывными параллельными переносами в трех направлениях, называется *элементарной ячейкой*. Три основных вектора, являющихся ребрами элементарной ячейки, называют *трансляциями* или осевыми единицами. Абсолютную величину трансляций *a, b, c* называют *периодами решетки*. Периоды решетки и три угла между ребрами ячейки α, β, γ (осевые углы) однозначно характеризуют элементарную ячейку.

Базисные векторы трансляций играют для кристаллической структуры роль пространственных координат. В зависимости от природы рассматриваемого объекта эти оси кристалла могут быть как равной, так и совершенно различной длины, и направлены друг к другу под произвольными (но возможно и равными прямыми) углами. Если перебрать все возможные варианты равенства и неравенства базисных трансляций и углов между ними, то обнаружится, что в природе возможно существование 14 различных типов пространственных решеток, все многообразие кристаллических структур в природе, так или иначе, сводится к этим 14 видам атомных решеток. Поскольку Бравэ впервые дал корректную формулировку правил построения пространственных решеток, эти 14 видов и получили название решеток Бравэ. Расположение атомов в ячейке обычно изображается с помощью точек (имитирующих атомы) в *вершинах* пространственной решетки, однако возможно расположение атомов в *центрах отдельных граней* элементарной ячейки и в *центре ее объема*.

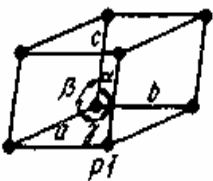
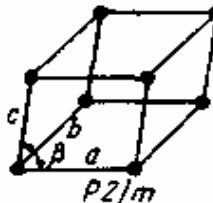
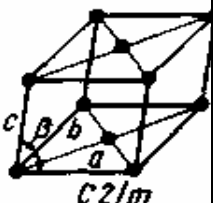
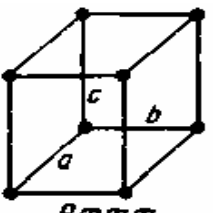
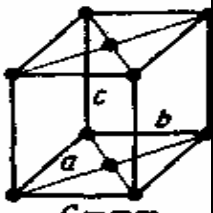
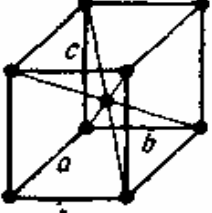
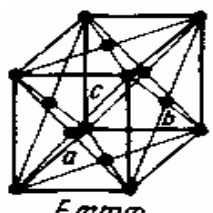
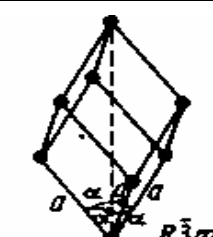
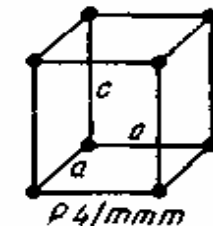
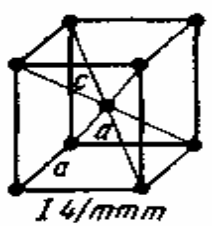
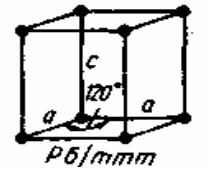
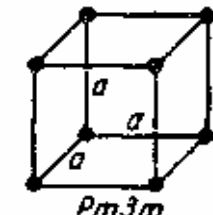
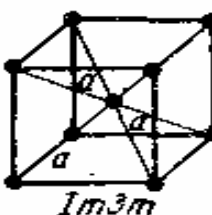
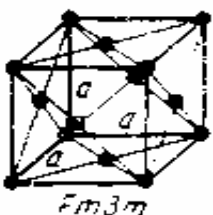
Условия, с помощью которых из бесконечного возможного числа параллелепипедов можно выбрать определенный, характеризующий решетку в целом, сформулированы Бравэ:

- 1) сингония выбранного параллелепипеда должна быть такой же, как и сингония всей решетки;
- 2) число прямых углов между ребрами параллелепипеда должно быть максимальным;
- 3) число равных осевых отрезков должно быть также максимальным;
- 4) при соблюдении первых трех условий объем его должен быть минимальным.

С помощью правил Бравэ можно однозначно выбрать параллелепипед повторяемости в структурах, принадлежащих всем сингониям, кроме триклинной и моноклинной.

Как отмечалось выше, существуют 14 трансляционных решеток Бравэ. Их символы, распределение по сингониям и схемы приведены в таблице 1.2. Семь трансляционных решеток Бравэ примитивны, содержат трансляции только к вершинам, остальные — сложны и содержат трансляции не только к вершинам (узлам), но и к другим точкам.

Таблица 1.2

Сингония	Решетки Бравэ			
	Примитивная (P)	Базоцентрированная (C)	Объемноцентрированная (I)	Гранецентрированная (F)
Триклинная				
Моноклинная				
Ромбическая				
Ромбоэдрическая				
Тетрагональная				
Гексагональная				
Кубическая				

Таким образом, элементарная ячейка, состоящая из атомов, расположенных только в углах пространственной решетки, называется **примитивной ячейкой**. Таким ячейкам присвоен индекс **P** согласно универсальной международной классификации Германа-Могена. В моноклинной сингонии, помимо примитивной, возможна элементарная ячейка, содержащая атом в центре грани,

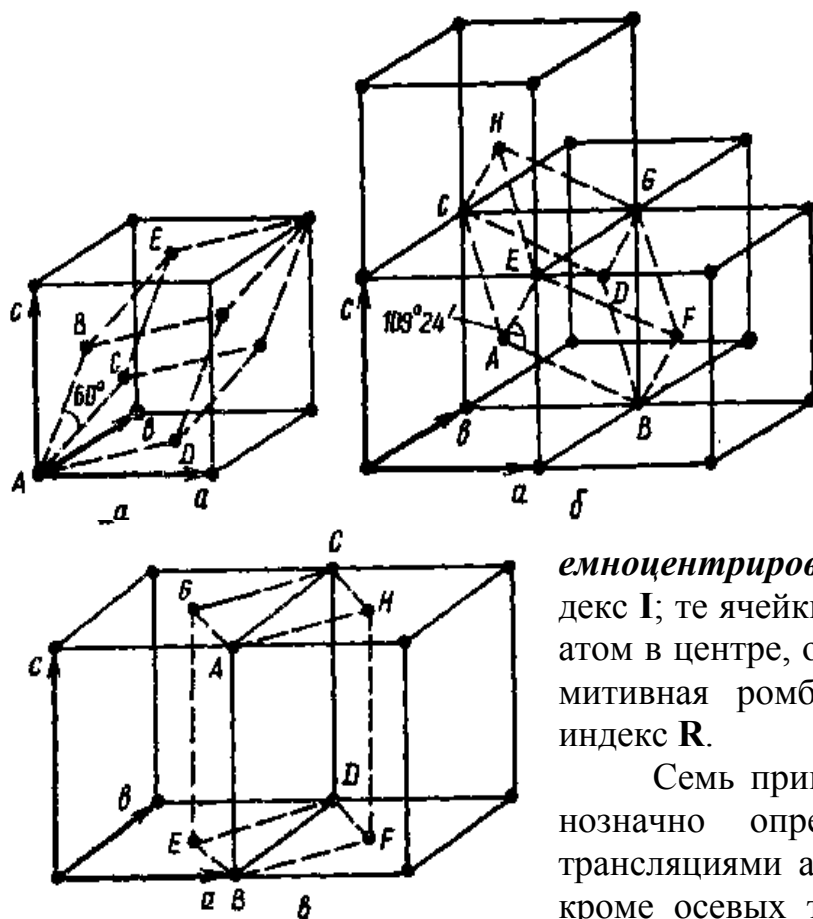


Рисунок 1.3

Необходимость введения последних определяется тем, что трансляционная решетка и ее элементарный параллелепипед должны обладать симметрией, свойственной кристаллу в целом. Так, сложную кубическую гранецентрированную решетку **F**, казалось бы, можно было заменить примитивной ромбоэдрической решеткой **R** (рисунок 1.3), но тогда элементарный параллелепипед ее не будет обладать симметрией, свойственной кубу, что противоречит правилам выбора трансляционной ячейки.

На рисунке 1.3 показано преобразование сложных решеток Бравэ в примитивные: а) ГЦК в ромбоэдрическую примитивную с $\alpha = 60^\circ$; б) ОЦК в ромбоэдрическую примитивную с $\alpha = 109^\circ 24'$; в) базоцентрированной в примитивную.

Нетрудно найти и другие примеры эквивалентности решеток.

Иногда нарушают принцип соответствия симметрии кристалла симметрии трансляционной ячейки для гексагональной сингонии, изображая ее ячейку не в виде шестигранной базоцентрированной призмы, а в виде прямой ромбической призмы с углом 120° при вершине ромба (рисунок 1.4).

перпендикулярной оси c (т. е. в гранях, содержащих оси a и b); такая ячейка называется **базоцентрированной** и ей присвоен индекс **C** по международной классификации. Базоцентрированная ячейка возможна и в орторомбической сингонии. Элементарные ячейки с атомами в центре объема называются **объемноцентрированными**, им присвоен индекс **I**; те ячейки, у которых все грани имеют атом в центре, обозначены символом **F**. Примитивная ромбоэдрическая решетка имеет индекс **R**.

Семь примитивных решеток Бравэ однозначно определяются тремя осевыми трансляциями a , b и c ; для остальных семи, кроме осевых трансляций, задаются дополнительными (диагональными) по плоской или пространственной диагонали решетки.

Семь примитивных решеток Бравэ однозначно определяются тремя осевыми трансляциями a , b и c ; для остальных семи, кроме осевых трансляций, задаются дополнительными (диагональными) по плоской или пространственной диагонали решетки.

Гексагональная элементарная ячейка графически представляется в виде параллелепипеда с ребрами, параллельными осям a_1 , a_2 и c (выделен на рисунке 1.4). По своей “конструкции” эта ячейка не отличается от других и сразу затруднительно определить ее как гексагональную, однако сочетание полностью параллельных таких ячеек приобретает гексагональную форму, как показано на рисунке 1.4. Гексагональная призма содержит две полные элементарные ячейки и две половины их.

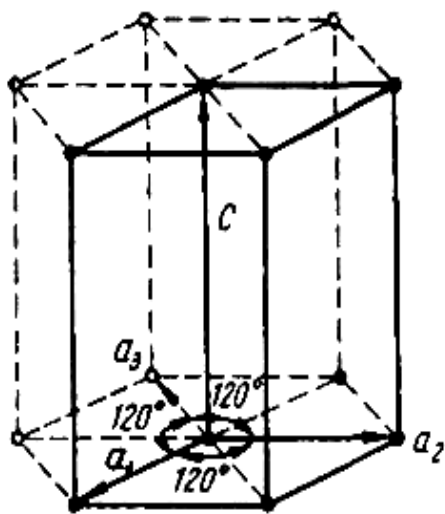


Рисунок 1.4

Наиболее распространенные среди металлов пространственные решетки относительно просты и совпадают с трансляционными: объемноцентрированная кубическая (ОЦК, I), гранецентрированная кубическая (ГЦК, F). Компактная гексагональная (ГК) среди металлов, а среди полупроводников — кубическая типа алмаза (рисунок 1.5) не менее широко распространены, но представляют удвоенную трансляционную

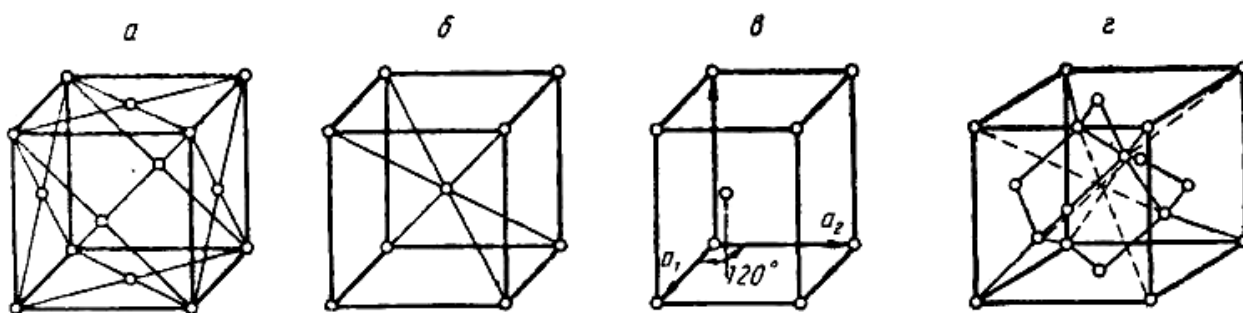


Рисунок 1.5

На рисунке 1.5 представлены распространенные решетки металлов: а) - ГЦК; б) - ОЦК; в) - ГЦК и полупроводников - г) - решетка алмаза.

В **сложных** пространственных решетках на долю одной элементарной ячейки приходится несколько атомов. Атом, расположенный внутри ячейки, приходится целиком на долю данной ячейки. Атом, расположенный на грани ячейки, входит одновременно в две ячейки и, следовательно, на долю ячейки приходится одной второй своей частью. Атом, расположенный на ребре, приходится на долю одной ячейки одной четвертой частью. Сложные решетки можно рассматривать как совокупность нескольких примитивных решеток, вставленных друг в друга. Число этих примитивных решеток равно числу атомов, приходящихся на долю сложной элементарной ячейки.

Сложные решетки называются чаще решетками с **базисом**. Под базисом решетки понимают совокупность координат минимального числа частиц, выраженная в осевых единицах, трансляцией которых в трех осевых направлениях образуются данная решетка.

1.1.3 Координаты атомов (базис) в элементарной ячейке. Индексы плоскостей (индексы Миллера) и направлений в кристаллической решетке

Положение узла в пространственной решетке или атома в элементарной ячейке определяется в заданной системе координат. Если радиус-вектор, соединяющий некоторую точку с началом координат, определяется как $\mathbf{r}_{xyz} = x\mathbf{a} + y\mathbf{b} + z\mathbf{c}$, то координатами этой точки являются соответственно x, y, z . Другими словами, координаты точек в решетке выражаются в масштабе ребер элементарных ячеек (трансляций), а не в ангстремах и сантиметрах.

Таким образом, если некоторую точку в пространственной решетке выбрать в качестве начала отсчета, то точка с координатами 3,2,1 лежит на конце радиуса-вектора $\mathbf{r}_{321}$ и попасть в нее из начала координат можно, если вдоль оси $\mathbf{a}$ продвинуться на расстояние, равное трехкратной величине ребра в элементарной ячейке, затем на два трансляционных расстояния вдоль оси $\mathbf{b}$ и, наконец, на величину ребра ячейки (трансляции) параллельно оси $\mathbf{c}$. Эта точка будет являться угловой (вершиной) в элементарной ячейке, а все другие угловые точки будут иметь целочисленные координаты; и наоборот, точки не лежащие в углах ячейки, будут описываться дробными координатами, например, объемно-центрирующий атом имеет координаты $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$, а координаты $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0$ принадлежат точке на середине грани в ячейке.

Базис записывается в двойные квадратные скобки. В таблице 1.3 приведены данные о базисе наиболее распространенных решеток, **коэффициенте заполнения объема** η (отношении объема, занимаемого атомами, к объему элементарной ячейки) и **координационном числе** — к.ч. (т.е. числе частиц одного сорта, ближайших к рассматриваемой частице в решетке). Понятие о координационном числе применимо лишь к так называемым координационным структурам, где каждая частица «окружена» некоторым числом одинаковых других частиц.

Прямые и плоскости, проходящие через узлы пространственной решетки, называют соответственно **узловыми прямыми и плоскостями**. Все узловые прямые или плоскости, одинаково ориентированные в пространстве, составляют семейство прямых или плоскостей. Они кристаллографически идентичны и обладают одинаковыми периодами идентичности или соответственно межплоскостным расстоянием. Ориентировка семейства направлений и плоскостей в решетке однозначно определяется кристаллографическими индексами.

Индексы плоскостей (индексы Миллера) используются как универсальная система обозначения граней кристалла или плоскостей его пространственной решетки. Эти индексы определяют ориентировку плоскости относительно осей кристалла, но не позволяют вычислить положение плоскости в пространстве относительно начала координат. Индексы Миллера определяются с помощью измерения величин отрезков, отсекаемых данной плоскостью на осях координат, причем отрезки эти измеряются не в ангстремах и сантиметрах, а в масштабе трансляций элементарной ячейки по соответствующим направлени-

ям.

Таблица 1.3

Тип решетки	Число атомов на элементарную ячейку	Базис решетки	Координатное число	Коэффициент заполнения, %
Примитивная кубическая	1	$[[000]]$	6	52
ОЦК	2	$\left[\left[000; \frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right] \right]$	8	68
ГЦК	4	$\left[\left[000; \frac{1}{2} \frac{1}{2} 0; \frac{1}{2} 0 \frac{1}{2}; 0 \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right] \right]$	12	74
Алмаза	8	$\left[\left[000; \frac{1}{2} \frac{1}{2} 0; \frac{1}{2} 0 \frac{1}{2}; 0 \frac{1}{2} \frac{1}{2}; \frac{3}{4} \frac{1}{4} \frac{1}{4}; \frac{1}{4} \frac{3}{4} \frac{1}{4}; \frac{1}{4} \frac{1}{4} \frac{3}{4}; \frac{3}{4} \frac{3}{4} \frac{3}{4} \right] \right]$	4	38
Гексагональная компактная	2	$\left[\left[000; \frac{2}{3} \frac{1}{3} \frac{1}{3} \right] \right]$	12	74

Чтобы определить индексы Миллера для данной плоскости, необходимо проделать следующую процедуру:

1. Найти точки пересечения данной плоскости со всеми тремя осями координат в кристалле (в масштабе соответствующих трансляций).
2. Взять обратную величину от найденных чисел.
3. Привести индексы к наименьшим целочисленным значениям, сохраняя при этом их соотношение.
4. Заключить индексы в круглые скобки (h, k, l).

Таким образом, под **кристаллографическими индексами плоскости** понимают три взаимно простых целых числа h, k, l, обратно пропорциональных числу осевых единиц, отсекаемых любой плоскостью данного семейства на кристаллографических координатных осях x, y, z. Совокупность индексов плоскости, взятая в круглые скобки (h, k, l), называется **символом плоскости**.

Системы координатных осей выбирают различно для разных сингоний. Кристаллографические координатные оси выбирают так, чтобы они были параллельны основным трансляциям (ребрам элементарной ячейки), а масштаб по каждой оси был равен соответствующей осевой единице (периоду). Принято также направление координатных осей связывать с имеющимися элементами симметрии.

Рассмотрим конкретный пример (рисунок 1.6). В случае, если плоскость

пересекает кристаллографическую ось в отрицательном направлении, над соответствующим индексом следует ставить знак «минус». Так, символ плоскости II на рисунке 1.6 обозначается $(3\bar{3}2)$. Для плоскостей, параллельных какой-либо координатной оси, соответствующий индекс равен нулю (отсекаемый отрезок

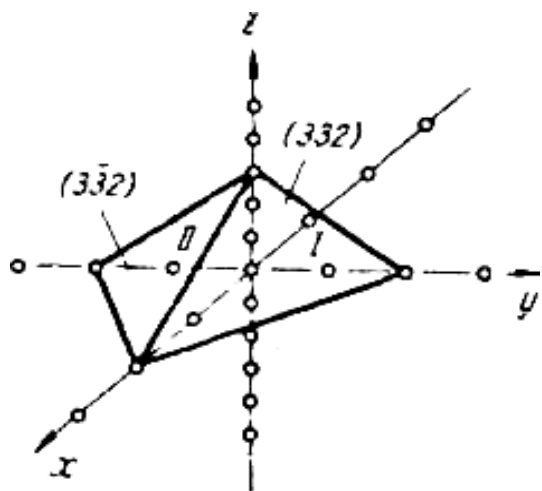


Рисунок 1.6

равен ∞). Плоскости, отсекающие на каждой оси по равному числу осевых единиц, обозначают символом (111) . В кубической решетке их называют плоскостями октаэдра, так как система подобных плоскостей, равноотстоящих от начала координат, образует октаэдр.

Плоскости, отсекающие на двух осях по равному числу осевых единиц и параллельные третьей оси (например, оси z), обозначают (110) . В кубической сингонии их называют плоскостями ромбического додекаэдра, так как система подобных плоскостей образует двенадцатигранник, каждая

грань которого — ромб. Плоскости, пересекающие одну ось и параллельные двум другим (например, осям y и z), обозначают (100) и называют в кубической решетке плоскостями куба, так как система подобных плоскостей образует куб.

На рисунке 1.7 показаны важнейшие плоскости в кубической решетке и их индексы.

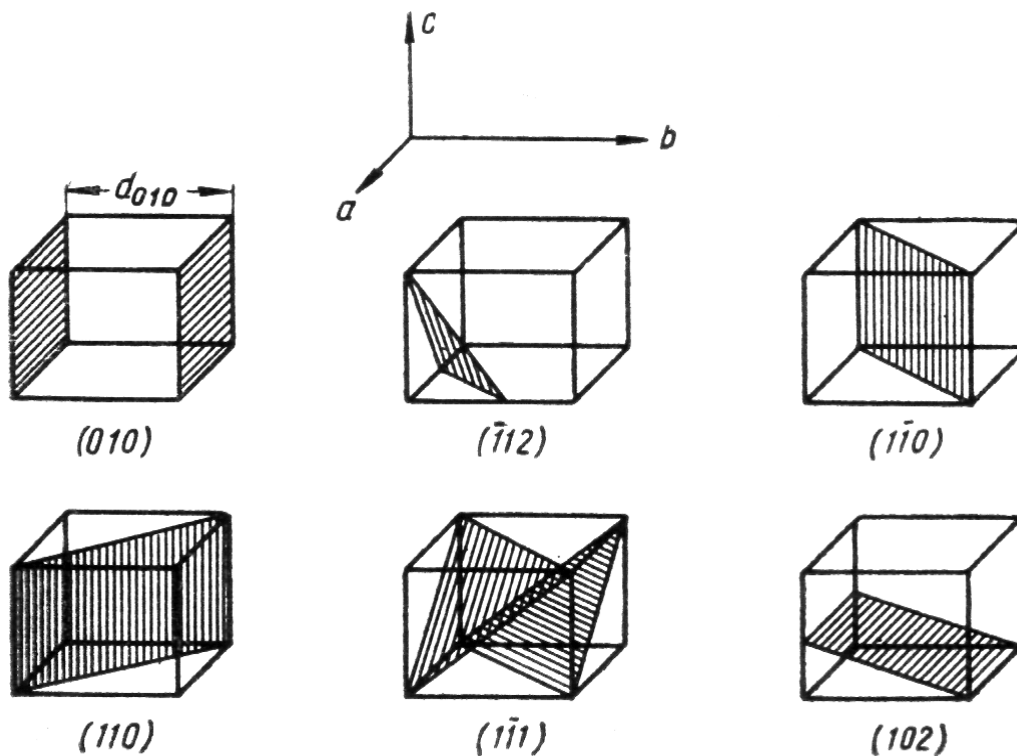


Рисунок 1.7

В **гексагональной сингонии** принято пользоваться системой координат из одной вертикальной оси z и трех горизонтальных осей x , y и t , параллельных ребрам основания и составляющих друг с другом углы в 120° .

При таком выборе осей кристаллографически идентичные семейства плоскостей описываются индексами одного и того же числового значения, стоящими в зависимости от положения плоскостей в пространстве в разном порядке или под разными знаками. Из четырех индексов плоскости (h , k , i , l), стоящих как обычно в круглых скобках, третий i , соответствующий горизонтальной оси t , определяется первыми двумя: $i = -(h + k)$. Часто им пренебрегают, так как этот индекс не является независимым. Тогда вместо него в индексе плоскости ставят точку ($hk.l$). Важнейшие плоскости в гексагональной решетке и их индексы показаны на рисунке 1.8.

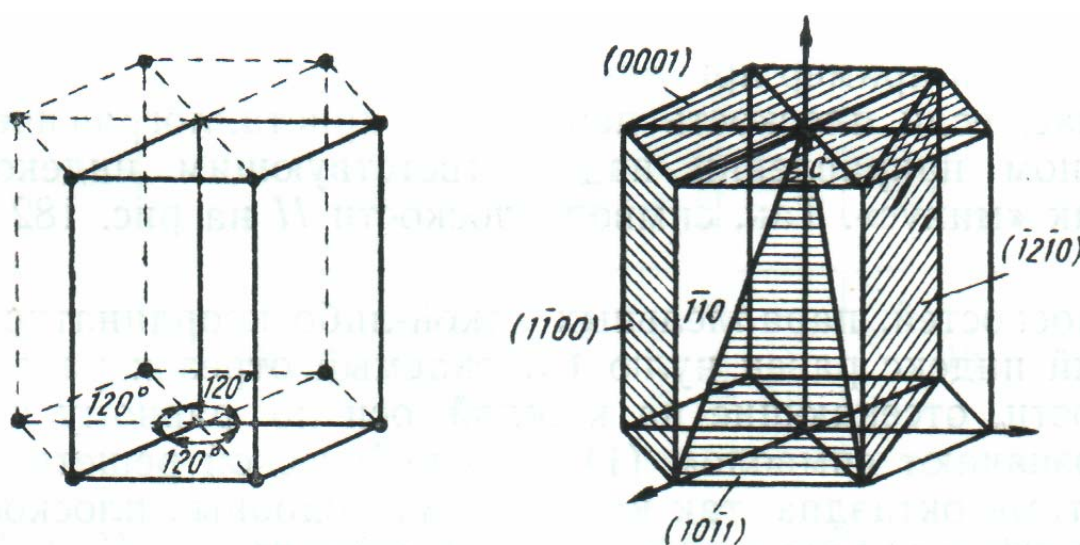


Рисунок 1.8

Под кристаллографическими **индексами направления** понимают три целых взаимно простых числа, пропорциональных координатам любого атома, расположенного на данном направлении, измеренным в осевых единицах. При установлении кристаллографических индексов данного направления его необходимо перенести параллельно самому себе в начало координат. Кристаллографические индексы направлений заключают в квадратные скобки и обозначают буквенно $[u, v, w]$. Индексы важнейших направлений в кубической решетке приведены на рисунке 1.9. Индексы направлений в гексагональной решетке показаны на рисунке 1.10

Для кубической сингонии индексы направления $[u, v, w]$, перпендикулярного к плоскостям (h, k, l), численно равны индексам этой плоскости. Так, индексы оси x равны $[100]$, а индексы плоскости, перпендикулярной оси x , равны (100) .

Индексы направления, связывающего **две** частицы в решетке, равны разности координат этих узлов, приведенных к целому виду.

Индексы направления $[u, v, w]$, по которому пересекаются две плоскости, связаны с индексами этих плоскостей (h_1, k_1, l_1) и (h_2, k_2, l_2) следующей систе-

мой уравнений:

$$\begin{aligned} u &= k_1 l_2 - k_2 l_1, \\ v &= l_1 h_2 - l_2 h_1, \\ w &= h_1 k_2 - h_2 k_1 \end{aligned}$$

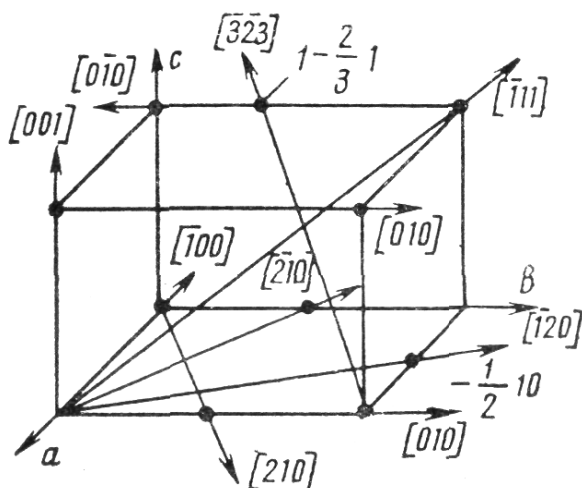


Рисунок 1.9

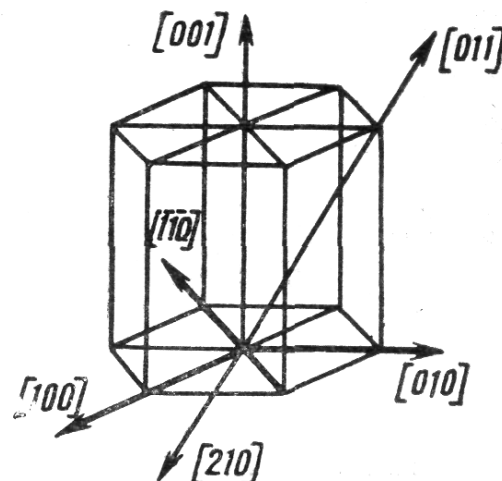


Рисунок 1.10

Аналогично индексы плоскости (h, k, l) , в которой лежат два направления $[u_1, v_1, w_1]$ и $[u_2, v_2, w_2]$, определяются из симметричной системы:

$$\begin{aligned} h &= v_1 w_2 - v_2 w_1, \\ k &= w_1 u_2 - w_2 u_1, \\ l &= u_1 v_2 - u_2 v_1 \end{aligned}$$

Описанные уравнения позволяют определить индексы плоскости, проходящей через **три** узла с известным базисом. Определение начинают с установления индексов двух направлений (одну из точек принимают за начало координат, по отношению к которому записывают направления) и заканчивают определением плоскости по направлениям.

Угол между двумя направлениями в **кубической** сингонии с индексами $[u_1, v_1, w_1]$ и $[u_2, v_2, w_2]$ может быть найден из уравнения

$$\cos \varphi = \frac{u_1 u_2 + v_1 v_2 + w_1 w_2}{\sqrt{u_1^2 + v_1^2 + w_1^2} \sqrt{u_2^2 + v_2^2 + w_2^2}} \quad (1.1)$$

Угол между двумя плоскостями находят из аналогичного симметричного уравнения.

1.1.4 Кристаллографические зоны и оси зон. Межплоскостное расстояние. Совокупность плоскостей

Кристаллографические плоскости определенных систем пересекаются между собой по некоторой линии или параллельными линиями. Например, вертикальные грани гексагональной призмы пересекаются между собой по линиям, параллельным оси c . Система таких плоскостей образует зону, а направление вдоль линии их пересечения носит название оси зоны.

Таким образом, серия семейства плоскостей, параллельных одному направлению $[u, v, w]$ в решетке, называется **кристаллографической зоной** (рисунок 1.11), а само направление – **осью зоны**.

В принципе две любые плоскости в кристалле образуют зону и пересекаются по некоторой прямой линии, указывающей на направление оси такой зоны, однако наиболее важными зонами в кристалле считаются те, к которым относится наибольшее число систем плоскостей. На поверхности кристалла плоскости одной зоны формируют его грани. Если поместить кристалл в центр окружности гониометра так, чтобы ось зоны была параллельна оси гониометра, то по лимбу гониометра можно измерить углы между всеми гранями, образующими данную зону. Представления о зонах также используют для расшифровки дифракционных картин и составления проекций кристаллов.

Между индексами оси зоны $[u, v, w]$ и индексами (h, k, l) , плоскостей, входящих в данную зону, существует следующая зависимость:

$$hu + kv + lw = 0 \quad (1.2)$$

Уравнение (1.2) определяет, таким образом, **условие зональности**.

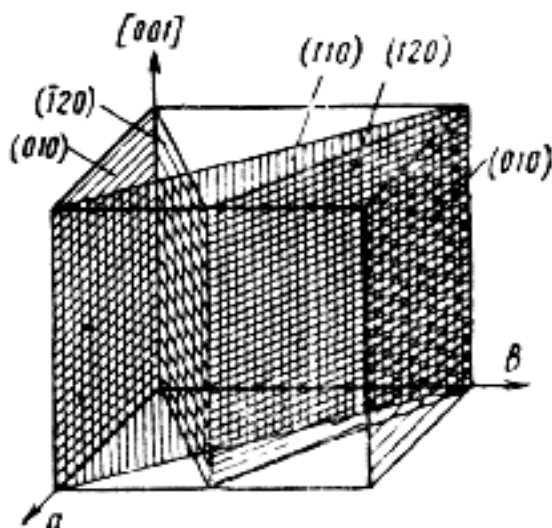


Рисунок 1.11

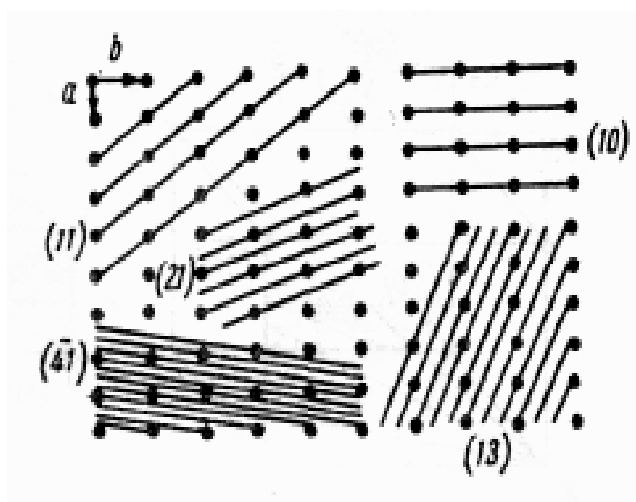


Рисунок 1.12

Каждое семейство плоскостей с индексами (h, k, l) характеризуется также своим **межплоскостным расстоянием** d , т. е. расстоянием между двумя соседними параллельными плоскостями.

В случае сложной решетки, состоящей как бы из нескольких простых, межплоскостное расстояние равно расстоянию между соседними параллельными кристаллографически идентичными плоскостями, принадлежащими одной простой решетке. Так, в случае ОЦК решетки межплоскостное расстояние для плоскостей (100) равно периоду a , но не $a/2$. Чем больше индексы плоскости, тем меньше межплоскостное расстояние этого семейства плоскостей (рисунок 1.12). Чем больше межплоскостное расстояние, тем плотнее заполнена элементами структуры соответствующая плоскость.

Между индексами (h, k, l), величиной d и периодами решетки a, b, c существует математическая зависимость, различная для каждой сингонии. Ниже приведены некоторые из них, наиболее часто используемые в рентгеноструктурном анализе поликристаллов.

Формулы для межплоскостного расстояния имеют следующий вид:

кубическая сингония

$$d^2 = \frac{a^2}{h^2 + k^2 + l^2} \quad (1.3)$$

тетрагональная сингония

$$d^2 = \frac{a^2}{h^2 + k^2 + l^2 \cdot \frac{a^2}{c^2}} \quad (1.4)$$

гексагональная сингония

$$d^2 = \frac{a^2}{\frac{4}{3}(h^2 + k^2 + hk) + l^2 \cdot \frac{a^2}{c^2}} \quad (1.5)$$

Все кристаллографически идентичные семейства плоскостей, т. е. семейства плоскостей с одинаковым межплоскостным расстоянием, образуют **совокупность плоскостей**, обозначаемую фигурными скобками $\{h, k, l\}$.

Так, в кубической сингонии совокупность плоскостей куба $\{100\}$ содержит шесть кристаллографически идентичных семейств плоскостей: (100), ($\bar{1}00$), (010), ($0\bar{1}0$), (001) и ($00\bar{1}$). Если, например, с помощью различных операций симметрично повернуть решетку так, что на месте плоскостей (100) разместятся плоскости (001) или любые из остальных четырех семейств плоскостей, то новое положение решетки совпадет с начальным. В этом и заключается кристаллографическая идентичность.

Важнейшим признаком кристаллографически идентичных плоскостей является то, что они обладают **одинаковым** межплоскостным расстоянием. Поэтому количество кристаллографически идентичных плоскостей (семейств

плоскостей) для любой совокупности равно числу возможных перестановок местами и знаками индексов, входящих в данную совокупность, не изменяющих величины межплоскостного расстояния с учетом симметрии кристалла.

В качестве примера рассмотрим те же шесть плоскостей.

В случае кубической сингонии, согласно формуле (1.3), для всех шести семейств плоскостей куба $d = a$ и они входят в одну совокупность.

В случае тетрагональной сингонии (формула 1.4) эти шесть плоскостей разбиваются на две совокупности. В одну из них (100) входят четыре плоскости (100), $(\bar{1}00)$, (010) и $(0\bar{1}0)$. Для них $d = a$. Во вторую совокупность (100) входят две плоскости (001) и $(00\bar{1})$. Для них $d = c$.

Количество кристаллографически идентичных плоскостей P для совокупностей с различными индексами для тех кристаллов кубической сингонии, которые имеют центр инверсии, приведено в таблице 1.4.

Таблица 1.4

Индексы	{100}	{110}	{111}	{h, k, 0}	{h, k, k}	{h, k, l}
Плоскости	6	12	8	24	24	48
P						

1.1.5 Контрольные вопросы к разделу 1.1

- 1 Какое свойство обычно используется для разделения веществ на жидкие и стекловидные?
- 2 Что представляет собой процесс расстекловывания аморфных тел? Приведите примеры способов получения аморфного или полуаморфного состояния металлов и металлических сплавов.
- 3 Что представляют собой такие понятия как анизотропия и изотропия? Где особенно заметна и четко проявляется анизотропия кристаллов?
- 4 Какие свойства называются структурно-чувствительными?
- 5 Что называют кристаллическим веществом? пространственной решеткой? Почему термин «решетка» нельзя применять как синоним «кристаллической структуры»?
- 6 Перечислите виды сингоний и приведите примеры принадлежащих к ним веществ.
- 7 Что называется элементарной ячейкой? трансляциями? периодами решетки? Какие параметры характеризуют элементарную ячейку?
- 8 Сколько типов различных пространственных решеток существует в природе?

- 9 Перечислите условия, с помощью которых можно выбрать определенный параллелепипед, характеризующий решетку в целом (правила Бравэ).
- 10 Какие ячейки называются примитивными? базоцентрированными? объемноцентрированными?
- 11 Какие индексы присвоены перечисленным ячейкам согласно универсальной международной классификации Германа-Могена?
- 12 Приведите примеры и изобразите графически преобразование сложных решеток Бравэ в примитивные, а также наиболее распространенные среди металлов и полупроводников пространственные решетки.
- 13 Какие решетки называются сложными? Что называют базисом решетки? коэффициентом заполнения объема η ? координационным числом?
- 14 В каком масштабе выражаются координаты точек в решетке?
- 15 Какие прямые и плоскости называют узловыми? Что представляет собой семейство прямых или плоскостей?
- 16 Для чего используются и что определяют индексы плоскостей (индексы Миллера)?
- 17 Что следует проделать, чтобы определить индексы Миллера для данной плоскости?
- 18 В какие скобки заключают кристаллографические индексы Миллера и как они обозначаются буквенно? Что называется символом плоскости?
- 19 Изобразите графически важнейшие плоскости в кубической решетке и их индексы.
- 20 Какой системой координат принято пользоваться в гексагональной сингонии?
- 21 Что понимают под кристаллографическими индексами направления?
- 22 В какие скобки заключают кристаллографические индексы направлений и как они обозначаются буквенно?
- 23 Что называется кристаллографической зоной? осью зоны?
- 24 Какая зависимость существует между индексами оси зоны и индексами плоскостей, входящих в данную зону (условие зональности)?
- 25 Что называют межплоскостным расстоянием d ? Приведите формулы, связывающие индексы (h, k, l) , величину d и периоды решетки a, b, c для кубической, тетрагональной и гексагональной сингоний.
- 26 Что представляет собой совокупность плоскостей? Как она обозначается?
- 27 Что является важнейшим признаком кристаллографически идентичных плоскостей?

1.2 Силы связи

Возможность существования твердого состояния вещества обусловлена возникновением сил взаимодействия между структурными частицами при сближении их на достаточно малые расстояния. Такими частицами могут быть атомы, ионы или молекулы. Для возникновения устойчивой структуры твердого тела необходимо, чтобы между частицами действовали двоякого рода силы: силы притяжения, препятствующие удалению частиц друг от друга, и силы отталкивания, не позволяющие частицам слиться друг с другом. Рассмотрим кратко природу этих сил.

1.2.1 Силы Ван-дер-Ваальса

Наиболее общим видом связи, возникающим между любыми атомами и молекулами, являются силы Ван-дер-Ваальса. Впервые они были введены для обоснования уравнения состояния реальных газов — уравнения Ван-дер-Ваальса как функции P , V , T :

$$\left(p + \frac{a}{V^2}\right)(V - b) = RT, \quad (1.6)$$

в котором определяют поправки a и b , учитывающие действие соответственно сил притяжения и отталкивания между молекулами реального газа. Почти в чистом виде эти силы проявляются между молекулами с насыщенными химическими связями (O_2 , H_2 , N_2 , CH_4 и др.), а также между атомами инертных газов, обуславливая существование их жидкого и твердого состояний.

В общем случае ван-дер-ваальсова связь включает в себя дисперсионное, ориентационное и индукционное взаимодействия. Рассмотрим кратко каждое из них.

Дисперсионное взаимодействие. Рассмотрим простейший пример взаимодействия двух атомов гелия, показанный на рисунке 1.13. Распределение электронной плотности атома гелия обладает сферической симметрией, вследствие чего его электрический момент равен нулю. Но это означает лишь, что равно *нулю* среднее значение электрического момента атома. В каждый же момент времени электроны расположены в определенных точках пространства, создавая мгновенные быстро меняющиеся электрические диполи. При сближении двух атомов гелия в движении электронов этих атомов устанавливается корреляция (согласование), которая и приводит к возникновению сил взаимодействия.

Эти силы могут иметь двоякий характер. Если движение электронов скоррелировано так, как показано на рисунке 1.13а, то между мгновенными диполями возникает притяжение, приводящее к появлению сил связи между атомами; при корреляции, показанной на рисунке 1.13б, между атомами возникает отталкивание. Так как при реализации конфигурации, показанной на

рисунке 1.13а, энергия системы **понижается**, то эта конфигурация является более вероятной и осуществляется наиболее часто. Это и обуславливает появление постоянно действующей силы притяжения, связывающей атомы гелия.

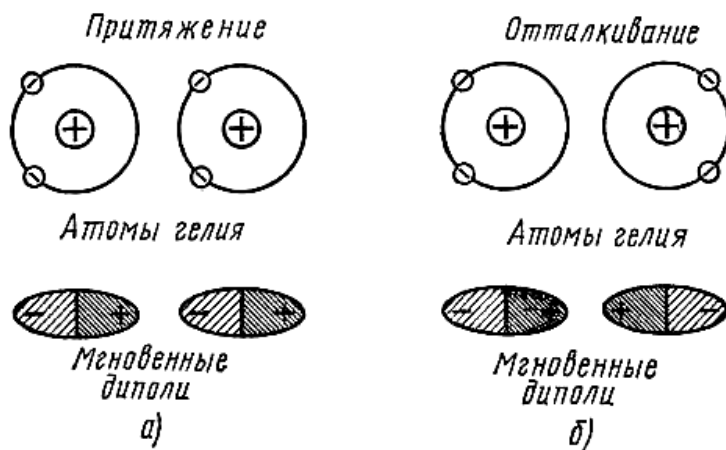


Рисунок 1.13

Рассмотренные силы связи, возникающие вследствие согласованного движения электронов в соседних атомах, называются **дисперсионными силами**. Расчет их был проведен впервые Лондоном в 1930 г. В основу расчета была положена следующая модель: под влиянием мгновенного электрического диполя одного атома другой атом поляризуется и в нем

возникает **наведенный диполь**, способствующий реализации конфигурации (рисунк 1.13а), отвечающей притяжению. Расчет привел к следующему выражению для энергии дисперсионного взаимодействия частиц:

$$U_{\text{д}} = -\frac{3}{4} \frac{\alpha^2 I}{r^6}, \quad (1.7)$$

где α - поляризуемость частиц;
 I - энергия их возбуждения;
 r — расстояние между ними.

Ориентационное взаимодействие. Если молекулы обладают постоянным дипольным моментом M , т. е. являются полярными, то между ними возникает электростатическое взаимодействие, стремящееся расположить молекулы в строгом порядке (рисунк 1.14), так как при таком расположении энергия системы уменьшается. Правильная ориентация молекул нарушается тепловым движением. Поэтому энергия системы, определяемая ориентацией молекул, сильно зависит от температуры. При низких температурах, когда достигается полная ориентация молекул, энергия взаимодействия определяется соотношением

$$U_{\text{ор}} = -\frac{M^2}{2\pi\epsilon_0 r^3} \quad (1.8)$$

где r —расстояние между молекулами,
 ϵ_0 —электрическая постоянная вакуума.

Для высоких же температур энергия взаимодействия дипольных молекул, как показал Кеезом, выражается формулой

$$U_{\text{ор}} = - \frac{M^4}{24\pi^2 \epsilon_0^2 kT} \frac{1}{r^6} \quad (1.9)$$

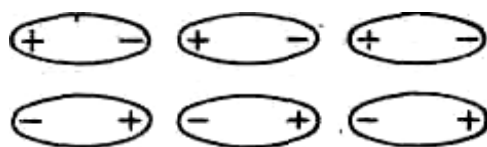


Рисунок 1.14



Рисунок 1.15

Рассмотренный вид взаимодействия называется **ориентационным**.

Индукционное взаимодействие. Наконец, у полярных молекул, обладающих высокой поляризуемостью, может возникать наведенный (индуцированный) момент под действием поля постоянных диполей соседних молекул (рисунок 1.15; пунктиром показаны индуцированные диполи). Энергия взаимного притяжения, возникающая вследствие взаимодействия между жестким диполем первой молекулы и индуцированным диполем второй молекулы, как показал Дебай, не зависит от температуры и определяется соотношением

$$U_{\text{ин}} = - \frac{\alpha M^2}{8\pi \epsilon_0^2} \frac{1}{r^6} \quad (1.10)$$

Такое взаимодействие называется **индукционным, или деформационным**.

В общем случае при сближении двух молекул могут возникать все три вида связи, и энергия взаимодействия U складывается из энергий дисперсионного ($U_{\text{д}}$), ориентационного ($U_{\text{ор}}$) и индукционного ($U_{\text{ин}}$) взаимодействий:

$$U = U_{\text{д}} + U_{\text{ор}} + U_{\text{ин}} \quad (1.11)$$

В таблице 1.5 приведена относительная доля (%) каждой из этих составляющих в общей энергии связи для воды, аммиака, хлористого водорода и окиси углерода.

Таблица 1.5

Вещество	Дисперсионное взаимодействие	Индукционное взаимодействие	Ориентационное взаимодействие
Вода	19	4	77
Аммиак	50	5	45
Хлористый водород	81	4	15
Окись углерода	100	-	-

Из данных таблицы 1.5 видно, что индукционное взаимодействие для всех веществ мало. У веществ с полярными молекулами энергия связи на 3/4 или 1/2 состоит из энергии ориентационного взаимодействия жестких диполей. У веществ же с неполярными молекулами энергия связи почти целиком является энергией дисперсионного взаимодействия.

1.2.2 Ионная связь

Атомы, стоящие в периодической системе Менделеева рядом с инертными газами, обладают склонностью принимать их конфигурацию путем отдачи или принятия электронов. У атомов щелочных металлов, стоящих непосредственно за инертными газами, валентный электрон движется вне заполненного слоя и связан с ядром слабо. У галоидов, стоящих непосредственно "перед" инертными газами, недостает одного электрона для заполнения устойчивого слоя благородного газа. Поэтому они обладают высоким сродством к дополнительному электрону.

Связь между такого рода атомами, т. е. между типичными металлами и галоидами, осуществляется следующим образом. Вначале происходит перезарядка обоих атомов: электрон от атома металла переходит к атому галоида. При этом атом металла превращается в положительно заряженный ион, атом галоида — в отрицательно заряженный ион. Эти ионы взаимодействуют по закону Кулона, как два разноименных заряда. Такая связь получила название **ионной**, или **полярной**. Энергия притяжения ионов, отстоящих друг от друга на расстоянии r , равна

$$U_{\Pi} = -\frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 r}, \quad (1.12)$$

где q — заряд ионов.

На рисунке 1.16 кривой 1 показана зависимость U_{Π} от r . С уменьшением r энергия непрерывно растет по абсолютной величине, и при $r \rightarrow 0$ она стремится к бесконечности. Под действием силы притяжения ионы стремятся максимально приблизиться друг к другу. Однако этому препятствуют силы отталкивания, которые начинают проявляться на малых расстояниях и очень быстро растут с уменьшением этого расстояния. На рисунке 1.16 энергия отталкивания $U_{\text{от}}$ показана кривой 2. Борн и другие исследователи выражали энергию отталкивания следующим соотношением:

$$U_{\text{от}} = B/r^n, \quad (1.13)$$

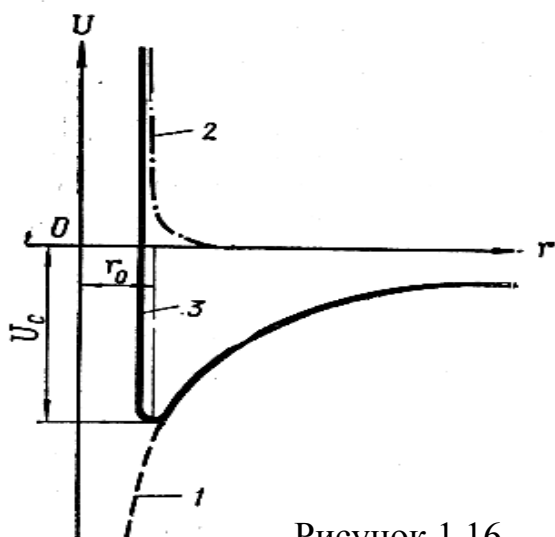


Рисунок 1.16

стояниях и очень быстро растут с уменьшением этого расстояния. На рисунке 1.16 энергия отталкивания $U_{\text{от}}$ показана кривой 2. Борн и другие исследователи выражали энергию отталкивания следующим соотношением:

где B и n — постоянные.

Результирующая энергия взаимодействия ионов равна

$$U = \frac{B}{r^n} - \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 r}, \quad (1.14)$$

На рисунке 1.16 эта энергия показана кривой 3, которая при $r = r_0$ проходит через минимум; глубина этого минимума определяет энергию связи U_c , а расстояние r_0 — расстояние между ионами в молекуле. Используя тот факт, что в равновесном состоянии (при $r = r_0$) сила притяжения $F_{\text{пр}} = -\left(\frac{dU_{\text{п}}}{dr}\right)_{r=r_0}$, равна силе отталкивания $F_{\text{от}} = -\left(\frac{dU_{\text{от}}}{dr}\right)_{r=r_0}$, выражение (1.14) легко привести к виду

$$U_c = -\frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 r_0} \left(1 - \frac{1}{n}\right). \quad (1.15)$$

Энергия решетки, построенной из N таких молекул, равна

$$U_{\text{реш}} = -NA \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 r_0} \left(1 - \frac{1}{n}\right), \quad (1.16)$$

где A — так называемая постоянная *Маделунга*, учитывающая энергию взаимодействия данной молекулы с ее соседями в кристалле.

В качестве примера в таблице 1.6 приведены экспериментальные значения энергии связи ряда ионных кристаллов и значения, вычисленные по (1.16). Расхождения не превышают 1—2%, что свидетельствует о хорошем согласии теории с опытом.

Таблица 1.6

Кристалл	$U_c, 10^{-3}$ Дж / моль	
	экспериментальное	теоретическое
Хлористый натрий (NaCl)	-752	-754
Иодистый калий (KI)	-650	-630
Бромистый рубидий (RbBr)	-635	-645
Иодистый цезий (CsI)	-595	-585

1.2.3 Ковалентная связь

Наличием ионной и ван-дер-ваальсовой связи невозможно объяснить существование соединений типа H_2 , O_2 , N_2 , ... и т. п., а также связи в атомных

кристаллах типа алмаза. Однородные атомы не могут образовать, очевидно, противоположно заряженные ионы путем перераспределения валентных электронов, как в случае взаимодействия металлов с галоидами. С другой стороны, прочность связи в молекулах H_2 , O_2 , N_2 , ... значительно больше той, которую способны обеспечить силы Ван-дер-Ваальса. Для такого рода соединений силы Ван-дер-Ваальса играют обычно роль небольшой поправки к той связи, которая

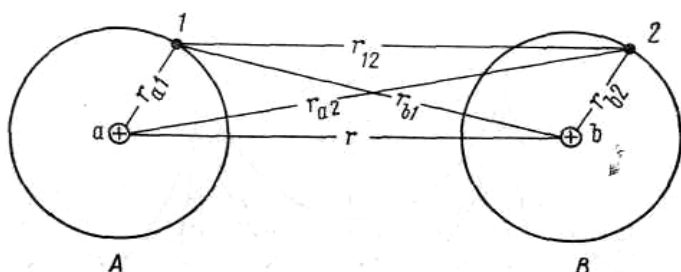


Рисунок 1.17

определяет прочность соединений. Эта связь получила название **ковалентной** связи.

Рассмотрим природу этой связи на примере молекулы водорода.

Предположим, что на сравнительно большом расстоянии r друг от друга находятся два атома

водорода: атом А, состоящий из ядра a и электрона 1, и атом В, состоящий из ядра b и электрона 2 (рисунок 1.17). Вследствие того, что плотность электронного облака, описывающего состояние электрона в атоме, очень быстро падает с расстоянием, обнаружить электрон 1 у ядра b , а электрон 2 у ядра a весьма мало вероятно. Расчет показывает, что при $r \approx 50 \text{ \AA}$ каждый из электронов может побывать у «чужого» ядра один раз в среднем на 10^{12} лет. Поэтому атомы А и В можно рассматривать как изолированные и энергию системы, состоящей из таких атомов, принимать равной $2E_0$, где E_0 — энергия изолированного атома в нормальном состоянии.

По мере сближения атомов вероятность перехода электронов к «чужим» ядрам увеличивается. При $r \approx 20 \text{ \AA}$ наступает заметное перекрытие электронных облаков этих атомов и частота перехода увеличивается уже примерно до 10^{14} с^{-1} . При дальнейшем сближении степень перекрытия облаков растет и частота обмена электронов местами увеличивается настолько, что теряет смысл говорить о принадлежности электрона 1 к атому А, электрона 2 — к атому В. Это соответствует возникновению нового состояния, не свойственного системе, состоящей из двух изолированных атомов, и замечательного тем, что электроны в этом состоянии принадлежат одновременно обоим ядрам, или, как говорят, **обобществлены**.

Обобществление электронов сопровождается перераспределением электронной плотности ψ^2 и изменением энергии системы по сравнению с суммарной энергией $2E_0$ изолированных атомов. На рисунке 1.18 пунктирными линиями 1 показана плотность электронных облаков изолированных атомов, тонкой сплошной линией 2 — суммарная плотность, которая получилась бы при простом наложении электронных облаков изолированных атомов; и наконец, жирной линией 3 — распределение плотности вдоль оси соединяющей ядра a и b , фактически устанавливающееся при обобществлении электронов. Из рисунка видно, что при обобществлении электронов происходит втягивание электронных облаков в пространство между ядрами: на небольшом расстоянии от ядра

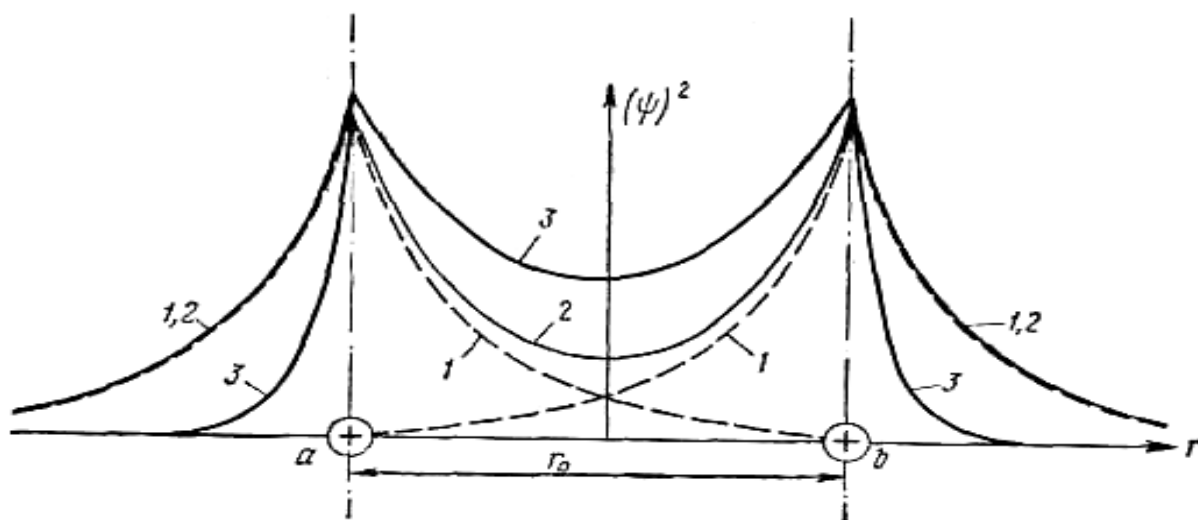


Рисунок 1.18

вне этого пространства плотность облаков уменьшается по сравнению с плотностью в изолированных атомах, в то время как в пространстве между ядрами она повышается по сравнению с суммарной плотностью, которая могла получиться от сложения в этом пространстве облаков изолированных атомов. **Появление состояния с повышенной плотностью электронного облака, заполняющего межъядерное пространство, вызывает всегда уменьшение энергии системы и приводит к возникновению сил притяжения между атомами.** Образно говоря, электронное облако, которое образуется в межъядерном пространстве обобществленной парой электронов, как бы стягивает ядра, стремясь максимально приблизить их друг к другу.

Такова качественная картина возникновения ковалентной связи. Количественно молекула водорода была рассчитана впервые Гейтлером и Лондоном в 1927 г. Эти расчеты, выполненные по уравнению Шредингера, показали, что система, состоящая из двух сближенных атомов водорода, в зависимости от направления спина в них может обладать двумя значениями энергии:

$$U_s = 2E_0 + \frac{K + A}{1 + S^2} \quad (1.17)$$

- при антипараллельном направлении спинов и

$$U_a = 2E_0 + \frac{K - A}{1 - S^2} \quad (1.18)$$

- при параллельном направлении спинов.

Здесь $2E_0$ — суммарная энергия двух изолированных атомов водорода, K — **энергия электростатического взаимодействия** электронов с ядрами, электронов между собой и ядер между собой. Ее называют также кулоновской энергией; по знаку она отрицательна. A представляет собой **энергию обменного**

взаимодействия, возникающую вследствие обмена атомов электронами. Это

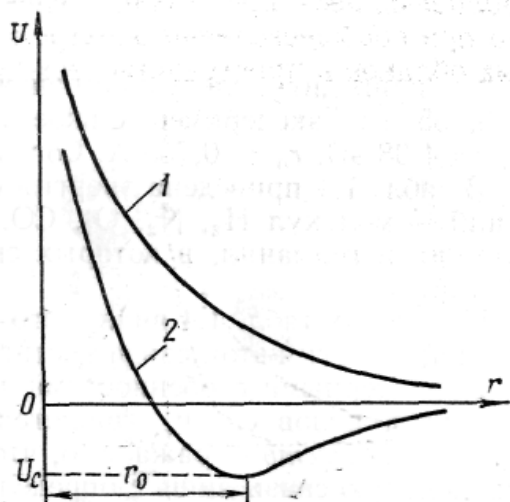


Рисунок 1.19

как раз та дополнительная энергия взаимодействия, которая появляется вследствие перераспределения электронной плотности атомов при образовании из них молекулы; по знаку она отрицательна, по абсолютной величине значительно превосходит K ($|A| > |K|$); S — так называемый интеграл неортогональности, величина которого заключена в следующих пределах:

$$0 \leq S \leq 1.$$

Состояние с энергией U_s называют **симметричным**, а с энергией U_a — **антисимметричным**. Так как K и A отрицательны, а

$S < 1$, то при образовании симметричного состояния энергия системы **уменьшается** по сравнению с энергией двух изолированных атомов:

$$U_s < 2E_0. \quad (1.19)$$

Это соответствует возникновению **сил притяжения**. Вследствие того, что по абсолютной величине обменная энергия A значительно превосходит кулоновскую K , уменьшение энергии системы происходит в основном за счет A . Поэтому силу притяжения, возникающую между атомами, называют **обменной силой**, или **обменной связью**. По той же причине, т. е. вследствие того что $|A| < |K|$, при образовании антисимметричного состояния энергия системы **увеличивается**. Это соответствует возникновению **сил отталкивания**.

На рисунке 1.19 приведена зависимость U_s и U_a от r/a , где r — расстояние между атомами, $a = 0,53 \text{ \AA}$ — радиус первой бордовской орбиты. За нулевой уровень отсчета энергии принято $2E_0$.

Из рисунка 1.19 видно, что для **антисимметричного состояния** (кривая 1) энергия системы непрерывно растет по мере сближения атомов, что соответствует отталкиванию атомов друг от друга. Поэтому в этом состоянии молекула водорода образоваться не может.

Для **симметричного состояния** (кривая 2) с уменьшением r энергия системы в начале уменьшается и при $r = r_0$ достигает минимального значения. При дальнейшем уменьшении r энергия начинает увеличиваться вследствие появления больших сил отталкивания. Наличие минимума на кривой потенциальной энергии делает возможным существование устойчивой системы из двух атомов водорода, т. е. образование молекулы водорода. Для разрушения этой системы требуется работа, равная глубине потенциальной ямы U_c .

Расчет приводит к следующим значениям U_c и r_0 : $U_c = 4,37 \text{ эВ}$, $r_0 =$

0,735 Å; экспериментальное же измерение этих величин дает: $U_c = 4,38$ эВ, $r_0 = 0,753$ Å. Согласие теории с опытом хорошее.

В таблице 1.7 приведена энергия связи для ряда ковалентных соединений — молекул H_2 , O_2 , N_2 , CO , а также для кристаллов алмаза, кремния и германия, в которых связь осуществляется ковалентными силами.

Таблица 1.7

Газ	$U_c, 10^5$ Дж/моль	Кристалл	$U_c, 10^5$ Дж/моль
Оксид углерода (CO)	10,8	Алмаз (C)	6,8
Азот (N_2)	9,5	Кремний (Si)	4,4
Кислород (O_2)	5,0	Германий (Ge)	3,5
Водород (H_2)	4,4		

Из данных таблицы 1.7 видно, что ковалентная связь является весьма мощной: энергия этой связи достигает $10^5 - 10^6$ Дж/моль.

Характерными особенностями ковалентной связи, отличающей ее от других видов связи, являются **насыщаемость** и **направленность**.

Насыщаемость выражает то, что каждый атом способен образовать ковалентную связь лишь с определенным числом своих соседей.

Так, каждый атом водорода может устанавливать связь лишь с одним своим соседом. Пара электронов, образующих эту связь, обладает антипараллельными спинами и занимает одну квантовую ячейку. Третий атом в этих условиях будет уже не притягиваться, а отталкиваться.

Валентная связь образуется в том направлении, в котором расположена наибольшая часть электронного облака, соответствующего валентным электронам. При этом осуществляется максимальное перекрытие облаков связывающих электронов. Это и означает, что валентная связь имеет **направленный характер**.

1.2.4. Металлическая связь

Особую группу тел составляют металлы, стоящие в начале каждого периода таблицы Менделеева. Образование металлического состояния невозможно объяснить ни с точки зрения ионной, ни с точки зрения ковалентной связей.

В самом деле, ионная связь возникает лишь между атомами, имеющими резко различное сродство к дополнительному электрону, например между атомами металла и галоида. Такая связь не может, очевидно, возникать между однородными атомами металла, обладающими одинаковым сродством к электрону. С другой стороны, атомы металла не имеют достаточного количества валентных электронов для образования валентной связи со своими ближайшими соседями. Так, атом меди имеет один валентный электрон и может образовать валентную связь с одним атомом. В решетке же меди каждый атом окружен двенадцатью ближайшими соседями, с которыми он должен находиться в сило-

вой связи. Это указывает на то, что в металлах действует особый вид связи, получивший название **металлической**. Рассмотрим природу этой связи.

Внешние валентные электроны в атомах металла связаны с ядром относительно слабо. При образовании жидкого и твердого состояний атомы располагаются настолько близко друг к другу, что валентные электроны приобретают способность покидать свои атомы и свободно перемещаться внутри решетки.

Таким образом, возникает весьма однородное распределение отрицательного заряда в кристаллической решетке металла. Это подтверждается прямыми опытами. В качестве примера на рисунке 1.20 показана экспериментальная кривая распределения электронной плотности между узлами кристаллической решетки алюминия, полученная рентгенографическим методом. На значительной части пространства между узлами электронная плотность сохраняется неизменной. Только непосредственно у узлов она резко возрастает из-за наличия здесь внутренних оболочек атома алюминия.

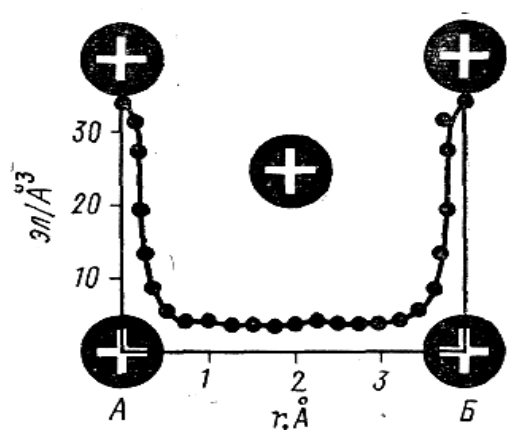


Рисунок 1.20

Связь в решетке металла возникает вследствие взаимодействия положительных ионов с электронным газом. Электроны, находящиеся между ионами, «стягивают» их, стремясь уравновесить силы отталкивания, действующие между одноименно заряженными ионами. С уменьшением расстояния между ионами увеличивается плотность электронного газа, вследствие чего растет сила, стягивающая ионы. С другой стороны, по мере уменьшения расстояния между ионами увеличиваются силы отталкивания, стремящиеся удалить ионы друг от друга. При достижении такого расстояния между ионами, при кото-

ром силы притяжения уравниваются силами отталкивания, решетка становится устойчивой.

Как видим, металлическая связь имеет сходство с валентной связью, так как в их основе лежит обобществление внешних валентных электронов. Однако в случае валентной связи в обобществлении электронов участвуют пары атомов, являющиеся ближайшими соседями, и обобществлению подвергаются только пары электронов; эти электроны все время находятся между атомами. В случае же металлической связи в обобществлении электронов участвуют все атомы кристалла и обобществленные электроны не локализуются уже у своих атомов, а свободно перемещаются внутри всей решетки.

1.2.5 Водородная связь

Водородная связь возникает в том случае, когда атом водорода связан с очень электроотрицательным атомом, например атомом кислорода, фтора, азота, хлора и т. п. Такой атом притягивает электроны связи и приобретает отрица-

тельный заряд; атом водорода, от которого электрон связи оттянут, приобретает положительный заряд. Водородная связь обусловлена **электростатическим притяжением** этих зарядов.

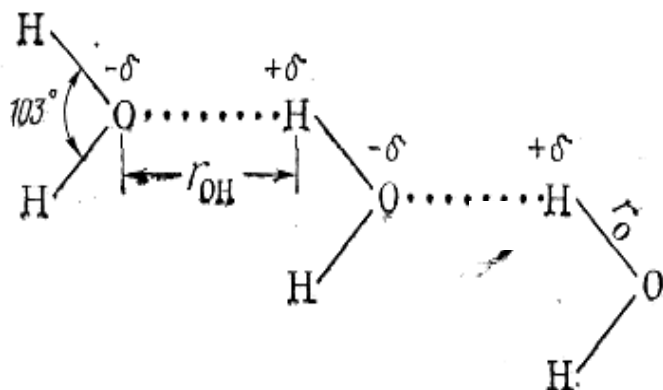


Рисунок 1.21

Типичным примером может служить водородная связь, возникающая между молекулами воды (рисунок 1.21). Связь О — Н, устанавливаемая между атомом кислорода одной молекулы воды и атомом водорода другой молекулы, ведет себя как маленький диполь с зарядом $-\delta$ на кислороде и $+\delta$ на водороде. Притяжение между этими зарядами и приводит к возникновению водородной связи, показанной на рисунке 1.21 точками.

Притяжению способствуют малые размеры атома водорода, позволяющие ему сблизиться с электроотрицательным атомом. Тем не менее это расстояние, $r_{OH} = 2,76 \text{ \AA}$, значительно больше длины r_0 ковалентной связи Н—О в самой молекуле воды, равной $0,96 \text{ \AA}$, что вполне естественно, так как энергия ковалентной связи примерно на порядок выше энергии водородной связи. Для воды она составляет $(21\text{—}25) \cdot 10^3 \text{ Дж/моль}$.

Водородная связь вызывает **ассоциацию** молекул жидкостей (воды, кислот, спиртов и др.), приводящую к повышению их вязкости, увеличению точки кипения, аномальному изменению объема при нагревании и т. д. Показательной в этом отношении является вода. Если бы между молекулами воды не действовала водородная связь, то она кипела бы при нормальном давлении не при $+100^\circ\text{C}$, а при 80°C , ее вязкость была бы почти на порядок ниже.

При нагревании воды выше 0°C происходит разрушение водородных связей, обуславливающих, рыхлую структуру ассоциированных комплексов, в которых молекулы воды отстоят друг от друга на значительных расстояниях ($2,76 \text{ \AA}$). Разрушение такой рыхлой структуры должно приводить к уплотнению воды — повышению ее плотности. С другой стороны, повышение температуры, увеличивая интенсивность теплового движения молекул, должно приводить к термическому расширению и уменьшению плотности воды.

Как показывает опыт, в интервале температур от 0 до 4°C превалирующим является первый фактор — увеличение плотности воды вследствие разрыва водородных связей. Поэтому в этом интервале температур нагревание воды сопровождается увеличением ее плотности. Выше 4°C превалирующим оказывается второй фактор — термическое расширение воды. Поэтому при дальнейшем нагревании плотность воды уменьшается, как и у других («нормальных») жидкостей.

1.2.6 Сопоставление различных видов связи

Наиболее универсальной является **связь Ван-дер-Ваальса**. Она возникает во всех без исключения случаях. Вместе с тем это наиболее слабая связь с энергией порядка 10^4 Дж/моль. В чистом виде она проявляется при взаимодействии нейтральных атомов и молекул, имеющих заполненные внутренние электронные оболочки. В частности, силы Ван-дер-Ваальса обуславливают существование жидкого и твердого состояний инертных газов, водорода, кислорода, азота и многих органических и неорганических соединений, обеспечивают связь в широкой группе валентно-молекулярных кристаллов, что будет более подробно изложено далее. Вследствие того, что энергия ван-дер-ваальсовой связи низка, все структуры, обусловленные ею, мало устойчивы, легко летучи и имеют низкие точки плавления.

Ионная связь является типичной химической связью, широко распространенной среди неорганических соединений. К ним относятся соединения металлов с галоидами, окислы металлов, сульфиды и другие полярные соединения. Ионная связь присуща также многим интерметаллическим соединениям (карбиды, селениды, нитриды и др.). Энергия ионной связи значительно выше энергии ван-дер-ваальсовой и достигает $\sim 10^6$ Дж/моль. Поэтому твердые тела с ионной связью имеют высокие теплоты сублимации и высокие точки плавления.

Валентная связь имеет исключительно широкое распространение в органических соединениях, но встречается также в неорганических соединениях, в некоторых металлах и во многих интерметаллических соединениях. Эта связь обуславливает образование валентных кристаллов типа алмаза, германия и т. п., что подробно будет рассмотрено далее. Энергия ковалентной связи также высока ($\sim 10^6$ Дж/моль), о чем свидетельствуют высокая температура плавления и большая теплота сублимации тел с этим видом связи.

Металлическая связь, возникающая в результате обобществления валентных электронов, характерна для типичных металлов и многих интерметаллических соединений. Энергия этой связи по порядку величины сравнима с энергией валентной связи.

Наконец, **водородная связь**, хотя и является относительно слабой связью, тем не менее, играет исключительно важную роль в природе.

В заключение следует подчеркнуть, что в реальных твердых телах каждая из рассмотренных связей в чистом виде почти никогда не встречается. Практически всегда имеет место наложение двух и более типов связи. Одна из них имеет, как правило, преобладающее значение, определяя структуру и свойства тела.

1.2.7 Силы отталкивания

Для образования устойчивой системы из взаимодействующих атомов или

молекул необходимо, чтобы между ними возникали не только сила притяжения, но и силы отталкивания, препятствующие беспредельному сближению частиц и их полному слиянию.

Источником сил отталкивания является, прежде всего, взаимодействие ядер, концентрирующих в себе значительные положительные заряды. Энергия этого взаимодействия $U'_{от}$ зависит от расстояния между ядрами и от степени экранирования их электронными оболочками. Квантовомеханический расчет приводит к следующему выражению для $U'_{от}$:

$$U'_{от} \sim e^{-r/a} \quad (1.20)$$

где r — расстояние между ядрами,
 $a = 0,53 \text{ \AA}$ — радиус первой боровской орбиты.

Такой вид зависимости $U'_{от}(r)$ определяет характер сил отталкивания: они достигают огромной величины на малых расстояниях и резко падают с увеличением r . Так, при уменьшении расстояния между протоном и атомом водорода с $r = 2a$ до $r = a/2$ (в 4 раза) энергия отталкивания увеличивается почти в 300 раз.

Силы отталкивания, обусловленные взаимодействием ядер, играют основную роль при сближении легких атомов, ядра которых сравнительно слабо экранированы электронными оболочками. Во всех других случаях основное значение приобретает отталкивание, возникающее вследствие перекрытия заполненных электронных оболочек сближенных атомов. В качестве примера рассмотрим взаимодействие иона хлора, имеющего заполненную 3 р-оболочку, и иона натрия с заполненной 2 р-оболочкой. При сближении их до расстояния, на котором оболочки 3 р и 2 р перекрываются, число электронов в каждой из них становится выше того количества, которое требует принцип Паули. Поэтому часть электронов должна перейти на более высокие энергетические уровни (например, 3d или 4s). Это связано с повышением энергии системы, а, следовательно, с появлением сил отталкивания. Квантовомеханический расчет показывает, что энергия такого отталкивания убывает с расстоянием r также по экспоненте:

$$U''_{от} \sim e^{-r/\rho} \quad (1.21)$$

где ρ — постоянная, определяемая обычно экспериментально.

1.2.8 Классификация твердых тел по характеру сил связи

Характер кристаллической структуры твердых тел определяется главным образом характером сил связи, которые действуют между структурными частицами (атомами, ионами, молекулами), образующими твердое тело. В соответствии с наличием пяти основных видов связи различают пять основных типов кристаллических решеток:

- **ионные**, или **координационные**, решетки, у которых основным видом связи является ионная;

- **поляризационные**, или **молекулярные**, решетки, у которых связь осуществляется в основном силами Ван-дер-Ваальса;

- **атомные** решетки с резко выраженной ковалентной связью;

- **металлические** решетки с характерной металлической связью;

- решетки с **водородной связью**.

По типам кристаллических структур химические элементы можно разбить грубо на четыре класса. Анализ удобно начать с IV класса.

IV класс. В этот класс входят все инертные газы. При их сжижении и кристаллизации между атомами, обладающими сферически симметричными электронными оболочками, возникают лишь сравнительно слабые силы Ван-дер-Ваальса. Под действием этих сил симметричные атомы комплектуются в предельно упакованную кубическую гранецентрированную решетку. Каждый атом такой решетки окружен 12 ближайшими соседями. Принято называть число ближайших соседей, окружающих данный атом, **координационным числом** решетки.

III класс. В III класс входят кремний и углерод из коротких периодов, германий и олово из группы IVB и все элементы групп VB, VIB, VIIB. Элементы этого класса кристаллизуются по правилу $8-N$: каждый атом решетки ок-

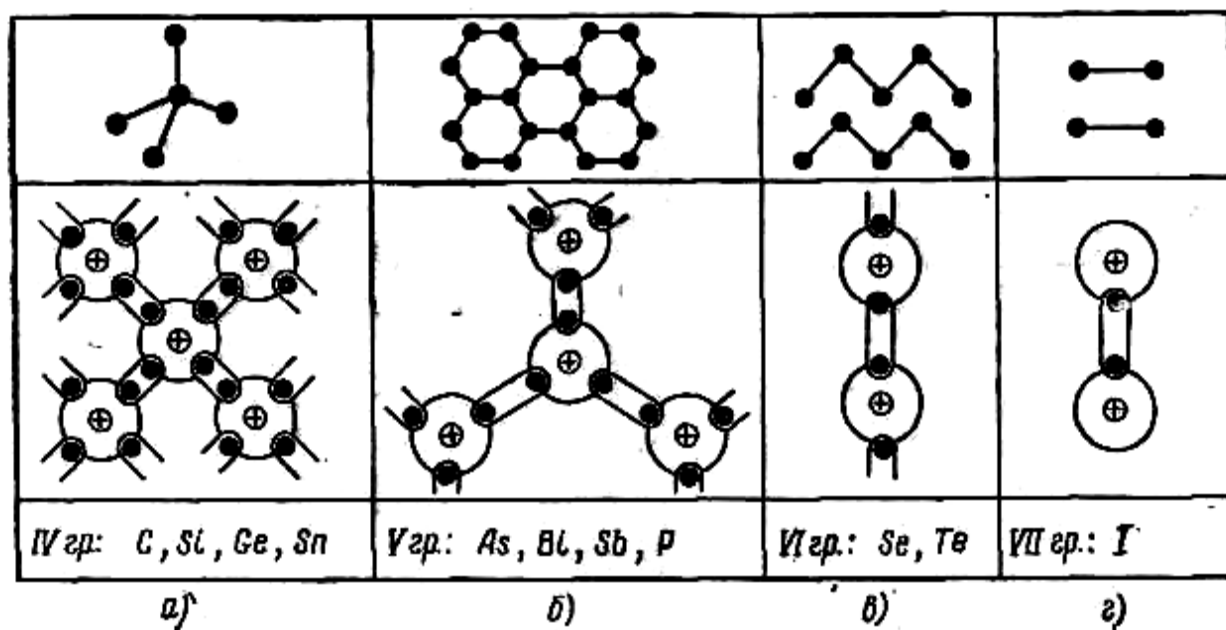


Рисунок 1.22

ружен $8-N$ ближайшими соседями, где N —номер группы, к которой принадлежит элемент.

Так, алмаз, кремний, германий и серое олово являются элементами IV группы периодической таблицы элементов. Поэтому координационное число их решетки должно быть равно $8 - 4 = 4$. Действительно, все они имеют тетраэдрическую решетку, в которой каждый атом окружен 4 ближайшими соседями, как показано на рисунке 1.22 а. Фосфор, мышьяк, сурьма и висмут принадлежат к V группе периодической системы. Для них координационное число равно $8 -$

$5 = 3$. Каждый атом имеет в плоскости 3 ближайших соседа, как показано на рисунке 1.22 б. Решетка имеет слоистый характер. Атомные слои связаны друг с другом силами Ван-дер-Ваальса. Селен и теллур, принадлежащие к VI группе, имеют координационное число 2. Атомы их расположены в длинные спиральные цепочки так, что каждый имеет двух ближайших соседей (рисунок 1.22 в). Цепочки связаны между собой силами Ван-дер-Ваальса. Наконец, иод принадлежит к VII группе (рисунок 1.22 г). Он имеет координационное число 1. В решетке атомы иода располагаются парами, которые связываются между собой силами Ван-дер-Ваальса. Этим объясняется высокая летучесть иода.

Такой характер структур химических элементов, кристаллизующихся по правилу $8 - N$, вполне понятен. Атомы элементов IV группы имеют на внешней оболочке 4 электрона. Для формирования устойчивой 8-электронной конфигурации им недостает еще 4 электронов. Этот недостаток они пополняют путем обмена электронами с 4 ближайшими соседями, как показано на рисунке 1.22 а, устанавливая с ними прочную ковалентную связь. Поэтому каждый атом в кристаллической решетке этих элементов имеет 4 ближайших соседа. Подобным же образом происходит дополнение до 8 электронов оболочек атомов V, VI, VII группы периодической таблицы Менделеева.

К кристаллам с ковалентной связью относятся многие химические соединения. Типичным примером может служить кварц SiO_2 . В кристалле кварца каждый атом кремния окружен тетраэдром из атомов кислорода (рисунок 1.23), соединенных с кремнием ковалентными связями.

Каждый атом кислорода связан с двумя атомами кремния и соединяет два тетраэдра. Таким образом, возникает трехмерная сетка из связей $\text{Si} - \text{O} - \text{Si}$, образующая кристалл с большой твердостью и высокой точкой плавления.

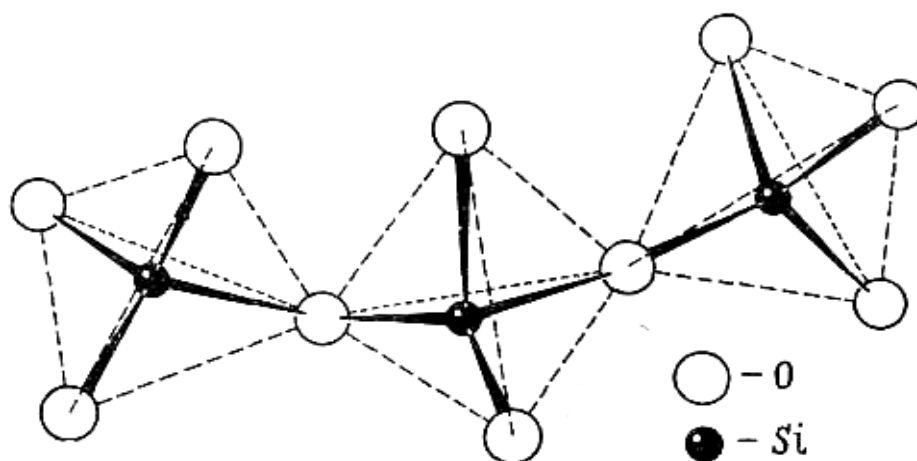
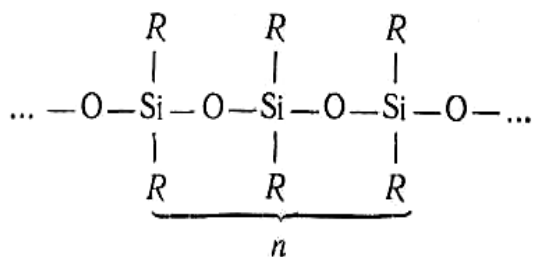


Рисунок 1.23

Интересно отметить, что связи $\text{Si} - \text{O} - \text{Si}$ можно выстроить в одномерную нитевидную цепь. Такого рода соединения с общей химической формулой



прочности связей Si — O — Si и большой гибкости силиконовых цепей такие каучуки выдерживают гораздо более высокие и гораздо более низкие температуры, чем натуральные каучуки. Это позволяет применять их для тепловой изоляции космических кораблей, самолетов, а также использовать в суровых условиях севера.

I класс. Самым многочисленным классом является первый, включающий в себя металлы. Так как в узлах металлических решеток находятся не атомы, а ионы, обладающие сферической симметрией инертных

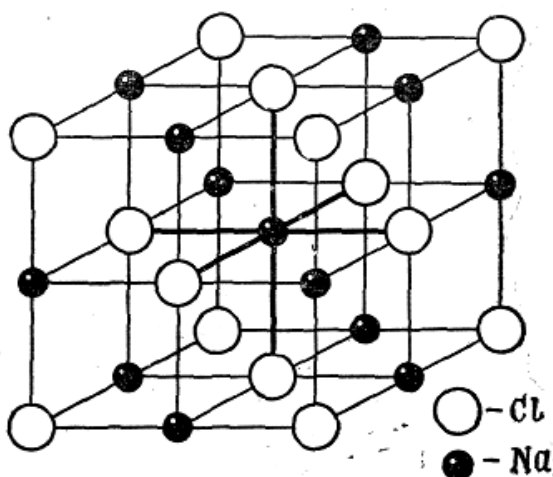


Рисунок 1.24

газов, то имеются основания ожидать, что металлы будут кристаллизоваться в столь же плотно упакованные решетки, как и инертные газы. Действительно, для металлов характерны следующие три типа кристаллических решеток: кубическая гранецентрированная с координационным числом 12, гексагональная плотной упаковки с координационным числом 12 и кубическая объемно-центрированная с координационным числом 8. Это наиболее рыхлая для металлов решетка (в смысле заполнения пространства).

II класс. Химические элементы II класса являются до некоторой степени промежуточными между металлами и элементами III класса, кристаллизующимися по правилу 8—N. Так, элементы группы IIВ — Zn, Cd и Hg являются металлами и, казалось бы, должны были иметь типичную металлическую решетку с высоким координационным числом. В действительности же Zn и Cd кристаллизуются в особую модификацию гексагональной компактной структуры, в которой каждый атом имеет не 12, а 6 ближайших соседей, что как раз требуется правилом 8 — N. Эти атомы расположены в плоскости базиса. Для ртути правило 8 — N соблюдается еще более полно: она имеет простую ромбоэдрическую структуру, в которой каждый атом окружен 6 ближайшими соседями. Бор, принадлежащий к группе IIIВ, имеет решетку, которую можно описать как деформированную решетку с 5 ближайшими соседями, что также соответствует правилу 8 — N, и т. д.

Ионная связь является, как уже указывалось, одним из основных видов связи в мире неорганических соединений, в частности в многочисленных ионных кристаллах, типичным представителем которых является кристалл каменной соли NaCl (рисунок 1.24). В таких кристаллах невозможно выделить от-

где R — любая органическая группа, называются **силиконами**. Число *n* цепи может достигать миллионов. Посредством боковых групп **R** цепи можно соединять в отдельных местах между собой («сшивать»). При этом образуются новые вещества — **силиконовые каучуки**. Вследствие высокой

где R — любая органическая группа, называются **силиконами**. Число *n* цепи может достигать миллионов. Посредством боковых групп **R** цепи можно соединять в отдельных местах между собой («сшивать»). При этом образуются новые вещества — **силиконовые каучуки**. Вследствие высокой

дельные молекулы. Кристалл следует рассматривать как плотнейшую упаковку из положительных и отрицательных ионов, чередующихся так, чтобы создать максимальное электростатическое притяжение между ближайшими соседями. При наиболее благоприятном соотношении размеров положительных (M^+) и отрицательных (X^-) ионов, имеющем место в кристалле NaCl, ионы касаются друг друга (рисунок 1.25 а) и достигается предельно высокая степень упаковки, при которой каждый ион окружен 6 ближайшими соседями противоположного знака. При менее благоприятном соотношении размеров M^+ и X^- (рисунок 1.25 б, в) возникают кристаллические структуры с другими координационными числами — 4 или 8.

Еще более сложные решетки имеют ионные соединения типа MX_2 , такие, например, как $CaCl_2$, Na_2O и т. п. Но принцип их построения остается прежним: ионы упаковываются таким образом, чтобы отрицательные были окружены положительными, и наоборот, в соответствии с формулой соединения и соотношением их размеров.

Рассмотрим, наконец, кристаллы с *водородной связью*. Типичным представителем таких кристаллов является лед.

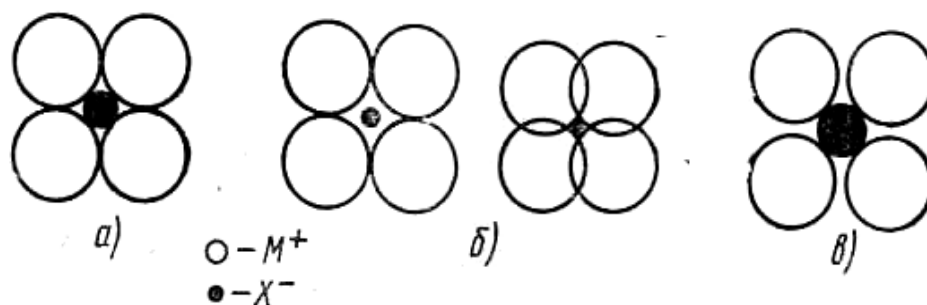


Рисунок 1.25

На рисунке 1.26 а показана плоская схема расположения молекул воды в кристалле льда: каждая молекула окружена четырьмя ближайшими соседями, отстоящими от нее на расстоянии $r_{OH} = 2,76 \text{ \AA}$, с которыми она образует водородную связь. В пространстве эти молекулы располагаются в вершинах правильного тетраэдра (рисунок 1.26 б), сочетание которых и дает кристаллическую структуру льда (рисунок 1.26 в). Структура весьма ажурная, что обуславливает аномально низкую плотность льда. При плавлении часть водородных связей (~15%) рвется, плотность упаковки молекул несколько возрастает, вызывая увеличение плотности воды: плотность льда при 0°C составляет $916,8 \text{ кг/м}^3$, плотность воды при той же температуре равна $999,87 \text{ кг/м}^3$. Интересно отметить, что если бы между молекулами воды не существовало водородной связи, то точка плавления льда равнялась бы не 0°C , а -100°C .

В заключение еще раз подчеркнем, что водородная связь играет исключительную роль в биологически важных соединениях; молекулы протеинов сохраняют свою спиральную форму только из-за водородных связей; те же связи

удерживают вместе двойные спирали в ДНК.

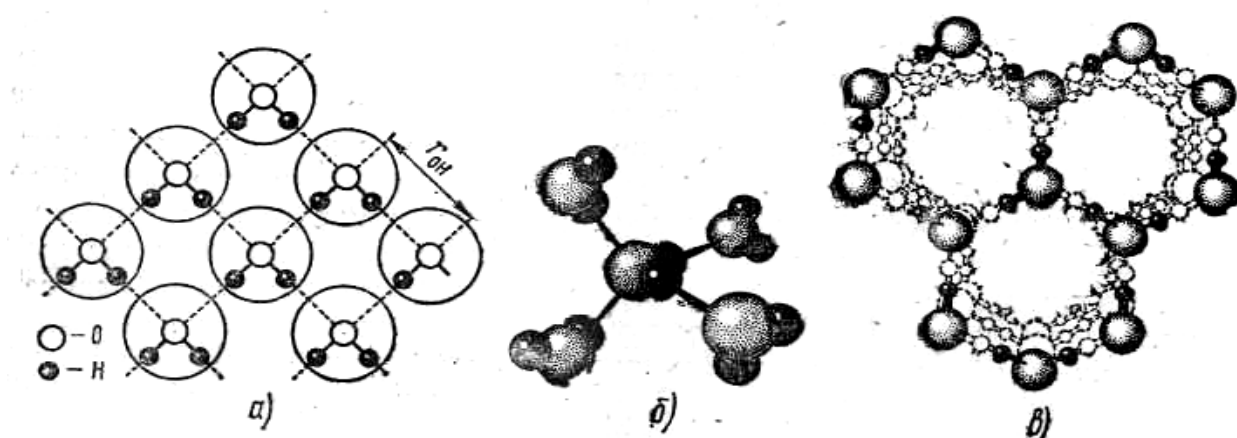


Рисунок 1.26

В своей книге «Как квантовая механика объясняет химическую связь» Пиментел Г.и Спратли Р. о важности водородной связи пишут: «Не будет преувеличением утверждать, что формы жизни на нашей планете были бы совершенно иными, а может быть, на Земле и вовсе не было бы жизни, не будь водородных связей в воде, в протеинах и в нуклеиновых кислотах, которые образуют живые клетки и управляют наследственностью».

1.2.9 Явление полиморфизма

Некоторым твердым телам свойственна не одна, а две и более кристаллические структуры, устойчивые при различных температурах и давлениях. Такие структуры называют **полиморфными формами**, или **модификациями вещества**, а переход от одной модификации к другой — **полиморфным превращением**.

Полиморфные модификации принято обозначать греческими буквами: модификацию, устойчивую при нормальной и более низкой температуре, обозначают буквой α ; модификации, устойчивые при более высоких температурах, обозначают соответственно буквами β , γ , δ и т. д.

Классическим примером полиморфизма является полиморфизм олова. При температуре ниже $13,3\text{ }^{\circ}\text{C}$ устойчива α -модификация олова, имеющая тетрагональную кубическую решетку типа алмаза. Это так называемое **серое** олово. Оно хрупкое и легко разрушается в порошок. Выше $13,3\text{ }^{\circ}\text{C}$ α -Sn переходит в β -Sn, имеющее объемно-центрированную тетрагональную решетку. Это хорошо известное всем **белое** металлическое олово, обладающее значительной пластичностью. Переход от β -Sn к α -Sn сопровождается значительным увеличением удельного объема ($\sim$ на 25%). В давние времена, когда многие изделия изготовлялись из олова, загадочное явление возникновения наростов на этих изделиях и их разрушение при сильном охлаждении приписывалось таинствен-

ной болезни металла — «оловянной чуме».

Кроме олова полиморфизм наблюдается у многих других химических элементов — углерода, железа, никеля, кобальта, вольфрама, титана, бора, бериллия и т. д., а также у многих химических соединений и сплавов. Интересным и практически важным случаем является **полиморфизм углерода** — существование его в виде алмаза и графита; этот случай заслуживает более подробного рассмотрения. В решетке **алмаза** (рисунок 1.5г) каждый атом окружен 4 ближайшими соседями, расположенными в вершинах тетраэдра, с которыми он связан прочными ковалентными силами; длина связи равна $1,544 \text{ \AA}$, энергия отдельной связи составляет примерно $3,5 \cdot 10^5 \text{ Дж/моль}$.

Решетка **графита** построена по типу решетки химических элементов группы VB таблицы Менделеева; атомы углерода образуют двумерные слои, располагаясь в них так, что каждый из них окружен 3 ближайшими соседями, с которыми он связан ковалентными силами (рисунок 1.27); длина связи $r_{01} = 1,42 \text{ \AA}$, т. е. меньше, чем у алмаза, поэтому ее прочность выше, чем у алмаза. Расстояния между слоями намного больше длины связи C—C и составляют $r_{02} = 3,6 \text{ \AA}$. На столь большом расстоянии могут проявляться лишь слабые силы Ван-дер-Ваальса, которые и связывают слои друг с другом. Энергия этой связи составляет $\sim (4—8) \cdot 10^3 \text{ Дж/моль}$.

Столь резкое различие в характере сил связи в структуре алмаза и графита должно, естественно, приводить к резкому различию их **свойств**, что и имеет место в действительности. Алмаз очень тверд и прочен и является идеальным абразивным материалом; графит легко скользит по плоскостям, которые связа-

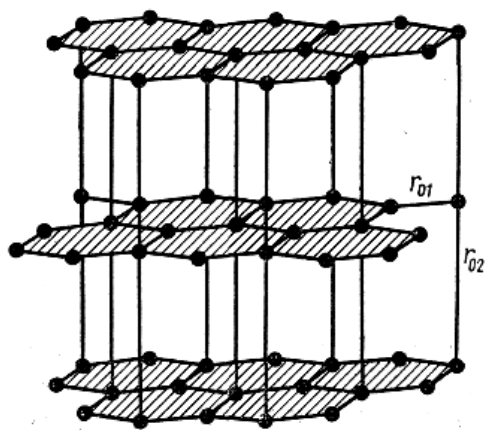


Рисунок 1.27

ны слабыми силами Ван-дер-Ваальса. Поэтому он с успехом используется для изготовления карандашных грифелей и в качестве сухой смазки. Электроны в алмазе прочно удерживаются между атомами, осуществляя связь между ними. Свет видимого участка спектра не способен вырывать такие электроны, вследствие чего не поглощается. Поэтому алмаз является красивым прозрачным кристаллом, не проводящим электрического тока (изолятор). У графита один из четырех валентных электронов атома углерода фактически обобществлен атомами, образующими слой; такие электроны

легко смещаются под действием внешнего электрического поля, делая графит двумерным проводником тока. Наличием подвижных электронов объясняются поглощение света (серый цвет графита) и характерный металлический блеск.

В обычных условиях графит является несколько более устойчивой модификацией, чем алмаз, хотя разница в энергии этих модификаций очень невелика — порядка $2 \cdot 10^3 \text{ Дж/моль}$:



Тем не менее такого различия уже достаточно, чтобы при нагревании алмаза без доступа воздуха до температур выше 1000 °С он с заметной скоростью переходил в графит.

Плотность алмаза больше, чем графита (3500 и 2250 кг/м³ соответственно), что объясняется неплотной упаковкой атомных слоев в графите. Поэтому при повышении давления устойчивость алмаза растет, а графита падает, и при достаточно высоких давлениях алмаз становится более устойчивым, чем графит; если при этом повысить температуру, чтобы увеличить подвижность атомов, то графит можно перевести в алмаз.

Расчет условий, при которых такое превращение будет идти с заметной скоростью, был проведен советским физиком О. И. Лейпунским. В Советском Союзе промышленное производство синтетических алмазов налажено с 1961 г. Синтез ведется при давлении порядка 100 000 атм и температуре порядка 2000° С. Полученные таким способом искусственные алмазы оказались прочнее и тверже природных и их применение в промышленности примерно на 40% эффективнее естественных. По типу алмаза синтезирован другой материал исключительно высокой твердости — кубический нитрид бора BN, получивший название **боразона**. Он тверже алмаза и выдерживает нагрев в атмосферных условиях до 2000 °С. В своей гексагональной модификации нитрид бора подобен графиту, представляя собой белый порошок, жирный на ощупь.

С теоретической точки зрения полиморфизм должен был бы наблюдаться у всех твердых тел, если бы область их устойчивого существования не ограничивалась процессами плавления и сублимации. Существование полиморфизма непосредственно связано с изменением интенсивности и характера сил связи в решетке кристалла при изменении интенсивности движения атомов и расстояния между ними вследствие нагревания кристалла или приложения внешнего давления. Вблизи абсолютного нуля устойчивой должна быть структура с наиболее прочной связью, возможной для данной совокупности атомов. Для олова, относящегося к IV группе таблицы Менделеева, такой структурой является структура алмаза, в которой каждый атом связан с 4 ближайшими соседями прочными валентными связями. Однако с повышением температуры эти связи вследствие резкой своей направленности и жесткости легко разрушаются тепловым движением и уже при температуре выше 13,3 °С более выгодной оказывается гибкая металлическая связь, возникающая путем обобществления валентных электронов. Этой связи соответствует своя устойчивая кристаллическая структура — тетрагональная объемно-центрированная.

Переход от одной модификации к другой сопровождается выделением или поглощением скрытой теплоты превращения и поэтому является **фазовым переходом 1-го рода**. Так как такой переход связан с перестройкой решетки, а подвижность атомов в твердых телах низкая, то модификация, термодинамически неустойчивая в данных условиях, может существовать в этих условиях практически неограниченное время. Ярким примером этого служит алмаз, который в обычных условиях может существовать сколь угодно долго, не превращаясь в более устойчивую в этих условиях модификацию — графит.

Полиморфизм имеет исключительно важное практическое значение. Так,

придание сталям различных свойств при их термической обработке, получение нержавеющей сталей, сообщение разнообразным сплавам необходимых свойств в значительной мере основаны на использовании явления полиморфизма.

1.2.10 Контрольные вопросы к разделу 1.2

- 1 Между какими молекулами и атомами проявляются силы Ван-дер-Ваальса? Какие виды взаимодействий включает в себя ван-дер-ваальсова связь?
- 2 На примере взаимодействия двух атомов гелия рассмотрите дисперсионное взаимодействие. Какие силы называют дисперсионными? Чему равна энергия дисперсионного взаимодействия частиц?
- 3 Что называют поляризуемостью молекулы? наведенным диполем?
- 4 Какой вид взаимодействия называется ориентационным? Почему энергия системы, определяемая ориентацией молекул, сильно зависит от температуры? Каким соотношением определяется энергия взаимодействия при низких температурах? при высоких температурах?
- 5 Какое взаимодействие называется индукционным, или деформационным? Почему энергия взаимного притяжения, возникающая вследствие взаимодействия между жестким диполем первой молекулы и индуцированным диполем второй молекулы, не зависит от температуры? Каким соотношением определяется эта энергия?
- 6 Что представляет собой энергия связи у веществ с полярными молекулами? у веществ с неполярными молекулами?
- 7 Какая связь получила название ионной или полярной? Чему равна энергия притяжения ионов? энергия отталкивания ионов? результирующая энергия взаимодействия ионов?
- 8 Изобразите графически зависимости энергий отталкивания $U_{от}$, притяжения $U_{п}$ и результирующей энергии U от расстояния.
- 9 Чему равна энергия решетки, построенной из N молекул? Что представляет собой постоянная Маделунга?
- 10 Какая связь получила название ковалентной? Рассмотрите природу этой связи на примере молекулы водорода. Что приводит к возникновению сил притяжения между атомами?
- 11 Изобразите графически: плотность электронных облаков изолированных атомов; суммарную плотность, которая получилась бы при простом наложении электронных облаков изолированных атомов; распределение плотности, фактически устанавливающееся при обобществлении электронов.
- 12 Запишите выражение для энергии системы, состоящей из двух сближенных атомов водорода: при антипараллельном направлении спинов; при параллельном направлении спинов.
- 13 Изобразите графически и объясните зависимость U_s и U_a от r/a .
- 14 Каких значений достигает энергия ковалентной связи? Что понимается под насыщенностью и направленностью ковалентной связи?

- 15 Какая связь получила название металлической? Вследствие чего возникает связь в решетке металла? Что понимают под обобществлением внешних валентных электронов? В чем сходство и различие металлической связи с валентной связью?
- 16 В каком случае возникает водородная связь? Чем обусловлена водородная связь? На примере связи возникающей между молекулами воды объясните водородную связь.
- 17 Почему в интервале температур от 0 до 4 °C происходит увеличение плотности воды, а при дальнейшем нагревании плотность воды уменьшается?
- 18 Приведите сопоставление различных видов связи.
- 19 Что является источником сил отталкивания? От чего зависит энергия $U_{от}$?
- 20 Чему равна энергия взаимодействия в случае, когда силы отталкивания обусловлены взаимодействием ядер? в случае перекрытия заполненных электронных оболочек сближенных атомов?
- 21 Чем определяется характер кристаллической структуры твердых тел? Назовите пять основных типов кристаллических решеток и четыре класса, на которые разбиваются химические элементы по типам кристаллических структур.
- 22 Какие элементы входят в IV класс? Какие силы возникают между атомами? В какие решетки комплектуются симметричные атомы под действием этих сил?
- 23 Какие элементы входят в III класс? По какому правилу элементы этого класса кристаллизуются? Какую кристаллическую решетку они имеют? Что принято называть координационным числом решетки?
- 24 Какого рода соединения называются силиконами? силиконовыми каучуками?
- 25 Какие элементы входят в I класс? Какие типы кристаллических решеток характерны для этого класса? Определите координационное число для каждой из решеток.
- 26 Какие элементы входят в II класс? По какому правилу элементы этого класса кристаллизуются? Приведите примеры и опишите решетки ионных соединений типа MX, MX₂. Каков принцип их построения? На примере кристаллов льда опишите кристаллы с водородной связью.
- 27 Какие структуры называют полиморфными формами, или модификациями вещества? Что называют полиморфным превращением? Опишите полиморфизм олова, полиморфизм углерода.
- 28 Что называют фазовым переходом 1-го рода? Какое практическое значение имеет полиморфизм?

1.3 Несовершенства в кристаллах

1.3.1 Общие замечания

Теория математически идеальных кристаллов, рассмотренных выше, чрезвычайно полезна. Она позволяет объяснить многие свойства кристаллической решетки — плотность, диэлектрическую проницаемость, удельную теплоемкость, упругие свойства. Все эти свойства называются **объемными**, или **структурно-нечувствительными**. Однако все реальные кристаллические тела неидеальны: в них всегда в огромном количестве существуют нарушения структуры, называемые **несовершенствами** (или **дефектами**). Таким образом, любое отклонение от периодической структуры кристалла называется **дефектом**. Перечисленные выше свойства лишь в слабой степени зависят от этих несовершенств. Однако дефекты структуры оказывают сильное влияние на многие другие свойства кристалла — прочность, электропроводность, гистерезисные потери в ферромагнитных металлах. Свойства, которые сильно зависят от степени совершенства кристалла, называются **структурно-чувствительными**.

Первым видом отклонений от идеальной структуры являются рассмотренные в этом разделе **тепловые колебания** в твердых телах. Изложение делится на две части: описание атомных колебаний с помощью модели из шаров и пружин и более общий анализ тепловой энергии твердых тел. Последний очень важен, так как он позволяет определить локальные флуктуации энергии, приводящие к образованию точечных дефектов.

В дальнейшем кристаллографические **точечные дефекты** рассматриваются как естественное следствие флуктуации энергии. К обычным точечным дефектам относятся химически инородные **примеси**, **вакансии** (т. е. узлы кристаллической решетки, в которых нет атомов) и **атомы внедрения** (лишние атомы, не находящиеся в узлах решетки). Точечные дефекты являются весьма локализованными и характеризуются тем, что искажения решетки сосредоточены в окрестности одного узла, в отличие от линейных и плоских дефектов. Кратко обсуждаются и более крупные кристаллографические дефекты — линейные и поверхностные. Подробно линейные дефекты рассматриваются во второй главе.

В заключение приводим сводку кристаллографических дефектов:

1. Тепловые колебания.
2. Точечные дефекты:
 - а) вакансии;
 - б) атомы внедрения;
 - в) изолированные включения примеси.
3. Линейные дефекты — дислокации.
4. Поверхностные дефекты:
 - а) наружная поверхность твердого тела;
 - б) внутренние поверхности: границы зерен и другие внутренние границы.

1.3.2 Тепловые колебания

В идеальной решетке атомы должны занимать именно те места, на которых они закреплены. Однако ни один кристалл не является абсолютно жестким, поскольку его можно деформировать силами конечной величины. Следовательно, затратив конечную работу, можно сместить атомы с их мест в идеальной решетке. В действительности силы, удерживающие атомы в узлах решетки, очень малы, поэтому достаточно уже тепловой энергии самих атомов, чтобы заставить их переместиться из равновесного положения на заметные расстояния. Сделав соответствующие упрощающие допущения, легко рассчитать величину этого теплового колебания (при обычных температурах оно составляет 5—10% межатомного расстояния). Более того, с достаточной для элементарных рассуждений точностью можно рассмотреть и некоторые внешние проявления этих колебаний, например теплоемкость, диффузию и электрическое сопротивление.

К исходной идее о колебаниях атомов твердого тела можно прийти путем анализа природы межатомных сил. Равновесные положения атомов определяются из условия равенства сил притяжения и отталкивания. При равновесии потенциальная энергия твердого тела должна быть **минимальна**. На рисунке 1.28 показана зависимость потенциальной энергии атома от расстояния между атомами в решетке твердого тела. При больших межатомных расстояниях (т. е. при большом общем объеме, в котором находятся атомы) потенциальная энергия условно принимается равной **нулю**, поскольку в этих условиях атомы не взаимодействуют друг с другом. По мере уменьшения расстояния между ато-

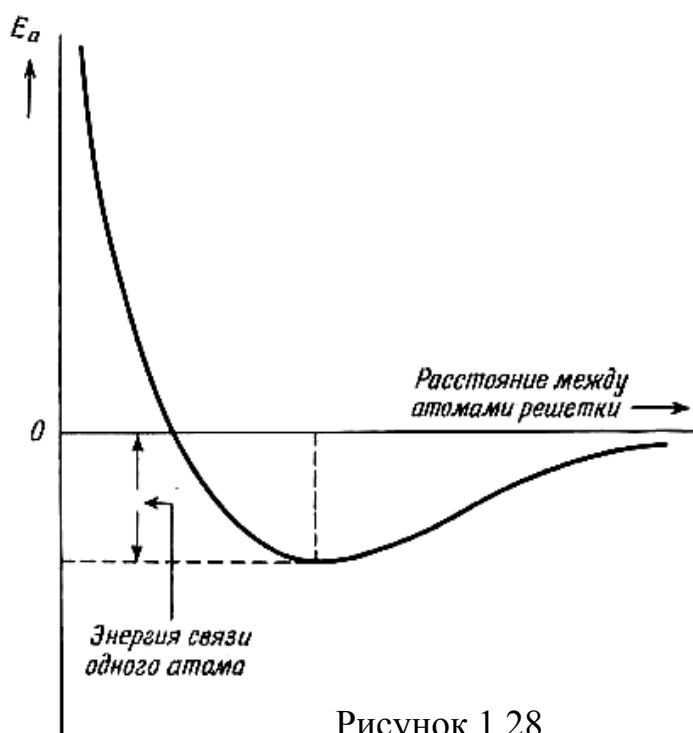


Рисунок 1.28

мами потенциальная энергия уменьшается. Совершенно очевидно, что характер этой зависимости должен быть именно таким, поскольку твердые тела существуют и при отсутствии внешних сжимающих сил.

Наконец, при некотором критическом расстоянии потенциальная энергия проходит через минимум и быстро возрастает при дальнейшем уменьшении расстояния между атомами. Это возрастание также вполне понятно, поскольку плотность твердых тел является конечной величиной.

Наиболее важный участок кривой находится вблизи точки

минимума, где атом не испытывает действия какой-либо результирующей силы от взаимодействия со своими соседями. Пусть все атомы твердого тела, кроме одного, жестко закреплены на своих местах. Пусть этот единственный атом пе-

ремещается по отношению к своим соседям в направлении x (рисунок 1.29), где a — атом в положении равновесия; b — атом смещен на расстояние u в направлении x). В первом приближении принимается, что длина пружин вдоль направлений y и z не изменяется.

Тогда между соседними атомами возникнут направленные вдоль оси x неуравновешенные силы (они соответствуют растяжению и сжатию пружин). Кривая на рисунке 1.28 показывает изменение энергии атома с изменением расстояния между ним и всеми соседними атомами. Если же изменяется расстояние только по отношению к одному атому, то энергию $E_a(x)$ надо разделить на z , где z — число ближайших соседей. (Мы предполагаем, что можно пренебречь потенциальной энергией взаимодействия неближайших атомов.) Изменение энергии ΔE , связанное с изменением координаты атома от x_0 до x , равно

$$\Delta E = \frac{2}{z} \{E_a(x_0 - u) + E_a(x_0 + u) - 2E_a(x_0)\} \quad (1.22)$$

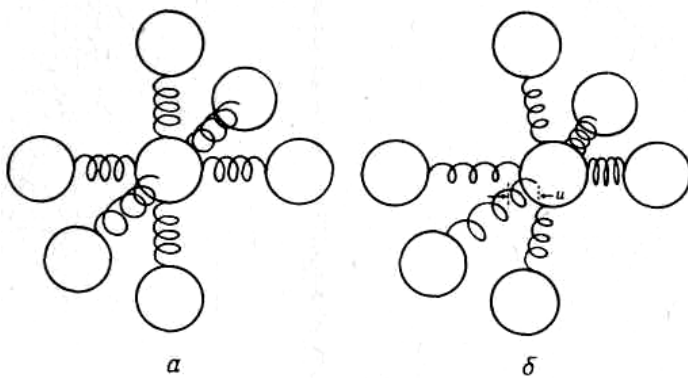


Рисунок 1.29

где $u = x - x_0$. Первый член этого уравнения характеризует энергию связи атома с правым соседом, второй — связь с левым соседом.

Коэффициент 2 обусловлен тем, что перемещение атома относительно его соседа вызывает равные изменения энергии у обоих атомов — смещенного и не подвижного.

Функцию $E_a(x)$ можно разложить в ряд Тейлора относительно ее минимума. Тогда общее изменение энергии атома и его соседей при малых смещениях составляет

$$\Delta E = \frac{4}{2z} \left(\frac{\partial^2 E_a}{\partial x^2} \right)_{x_0} (x - x_0)^2 = \frac{\alpha}{2} u^2 \quad (1.23)$$

где

$$u = x - x_0 \quad \text{и} \quad \alpha = \frac{4}{z} \left(\frac{\partial^2 E_a}{\partial x^2} \right)_{x_0}$$

Исходя из закона изменения потенциальной энергии (1.23), можно рассматривать атом, закрепленный в определенном узле решетки, как **простой гармонический осциллятор**. Следовательно, вибрирующие атомы совершают гармонические колебания относительно своих положений равновесия.

Сила f , действующая на каждый атом, есть функция его смещения

$$f = -\frac{d(\Delta E)}{du} = -\alpha u \quad (1.24)$$

Тогда дифференциальное уравнение, описывающее это движение, можно записать как

$$m \frac{d^2 u}{dt^2} = -\alpha u \quad (1.25)$$

где m — масса атома. Решение имеет вид

$$u = A_0 \cos \sqrt{\frac{\alpha}{m}} \cdot t \quad (1.26)$$

Следовательно, угловая частота колебаний атома ω определяется как

$$\omega = \sqrt{\frac{\alpha}{m}},$$

частота ν (так называемая **эйнштейновская частота**) — как

$$\nu = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{\alpha}{m}} \quad (1.27)$$

Поскольку массы атомов известны из экспериментальных измерений, можно рассчитать частоту колебаний, если известна постоянная α . К счастью, величину α можно оценить достаточно просто.

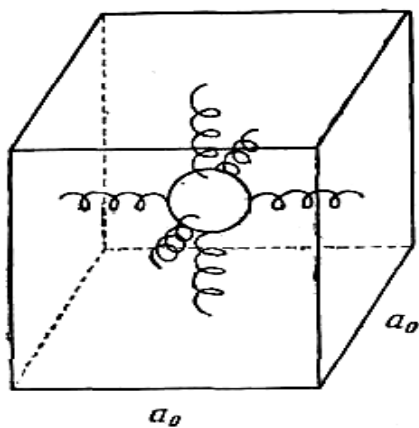


Рисунок 1.30

Допустим, что к элементарному кубу (рисунок 1.30) можно применить закон Гука. Растяжение Δa , которое возникает под действием силы F , приложенной к элементарному кубу, определяется из выражения

$$Y \frac{\Delta a}{a_0} = \frac{F}{a_0^2} \quad (1.28)$$

Здесь a_0^2 — площадь грани куба с ребром a_0 . Тогда, α определяется как сила, необходимая для удлинения куба на расстояние, равное его ребру. Модуль Юнга Y имеет по-

рядок 10^{11} Н/м². Следовательно, величина α , приблизительно равна 25 Н/м.

Теперь можно рассчитать частоты колебаний. У элементов, находящихся в середине периодической таблицы (например, у меди, железа, германия и т.

д.), масса атома составляет около 10^{-25} кг. Поэтому в соответствии с предлагаемой моделью частота колебаний этих атомов составляет около $3 \cdot 10^{12}$ Гц.

Более точная оценка α дает значение, немного превышающее 25 Н/м. Соответственно величина ν приближается к 10^{13} Гц. Ниже будет показано, что амплитуда колебаний (при комнатной температуре) составляет несколько сотых ангстрема, т. е. несколько процентов от межатомного расстояния.

Описанная выше **модель атомных колебаний** пригодна для многих целей. Разумеется, допущение о неподвижности соседей данного атома в реальных кристаллах не оправдывается, так как они тоже перемещаются. При анализе всех возможных движений атомов и атомных групп было установлено, что существует множество других частот. Эти частоты начинаются примерно от значения ν , рассчитанного ранее, и понижаются вплоть до основной частоты акустических колебаний в твердом теле данных размеров. Известно, что низкочастотные колебания — это **звуковые волны**. Каждое отдельное механическое колебание данной частоты называется **фононом**. Смещение любого атома в кристалле определяется суммированием всех фононов, причем каждый фонон обладает и энергией (т. е. амплитудой колебаний), и частотой.

1.3.3 Тепловая энергия твердых тел

Наиболее важными способами **поглощения тепловой энергии** твердым телом являются:

- 1) увеличение интенсивности колебаний атомов;
- 2) увеличение энергии поступательного движения электронов (возбуждение);
- 3) увеличение вращательной энергии молекул.

Первый механизм присущ всем твердым телам, поскольку можно заставить двигаться атомы любого твердого тела. Этот механизм наиболее важен из всех трех. Только в узких температурных интервалах могут преобладать другие эффекты.

Общая энергия твердого тела складывается из двух слагаемых. Одним из них является тепловая энергия, другим — энергия, которой могут обладать твердые тела при абсолютном нуле температуры. Сумма этих величин называется **внутренней энергией E** . Эта энергия представляет собой точно определяемую величину, которая лишь в очень слабой степени зависит от малых концентраций кристаллических дефектов. Конечно, величина E зависит от температуры. Для многих твердых тел значения E измерены и их можно найти в соответствующих таблицах. Однако исторически наука развивалась так, что больше внимания уделялось производной внутренней энергии по температуре, которая является **теплоемкостью** при постоянном объеме

$$C_v = \left(\frac{\partial E}{\partial T} \right)_v \quad (1.29)$$

Точный расчет теплоемкости твердого тела чрезвычайно сложен, поскольку для этого необходимо знать сумму кинетической и потенциальной энергий каждого колеблющегося атома твердого тела. Мы не будем проводить такое вычисление, тем более что на практике обычно и не идут по этому пути. Вместо этого используют широкие допущения о характере колебаний атомов, тем самым значительно упрощая расчеты. Наиболее удачна в этом плане **теория Дебая**. На рисунке 1.31 сплошной линией представлена кривая, соответствующая уравнению, которое следует из теории Дебая; там же приведены экспериментальные значения теплоемкостей C_v для серебра и алюминия. Вполне очевидно хорошее соответствие теории с экспериментальными данными.

Некоторые температурные области, показанные на рисунке 1.31, представляют особый интерес. При абсолютном нуле теплоемкость равна нулю. При температурах несколько выше абсолютного нуля теплоемкость быстро возрастает — пропорционально T^3 . При высоких температурах теплоемкость становится почти постоянной и составляет около 6 кал/моль·К. Необходимо обратить внимание на то, что в данном случае используется шкала «приведенной» температуры, т. е. значение T делится на константу. Эта константа θ_D , называемая **дебаевской температурой**, имеет различную величину для каждого твердого тела. При $T = \theta_D$ теплоемкость уже составляет примерно 96% от ее окончательного значения. В таблице 1.8 приведены дебаевские температуры θ_D некоторых материалов.

Таблица 1.8

Металлы	θ_D , К	Полупроводники	θ_D , К
Hg	75	Sn (серое)	260
Pb	95	Ge	250-400
Na	160	Si	650
Au	170		
Sn	200		
Ag	230		
W	270	Изоляторы	
Cu	340	H	100
Fe	360	AgBr	150
Al	375	NaCl	280
Be	1200	Алмаз	1850

По определению величина θ_D связана с характеристической максимальной частотой колебаний атома ν_D соотношением

$$\theta_D = \frac{h\nu_D}{k} \quad (1.30)$$

где h — постоянная Планка,
 k — постоянная Больцмана.

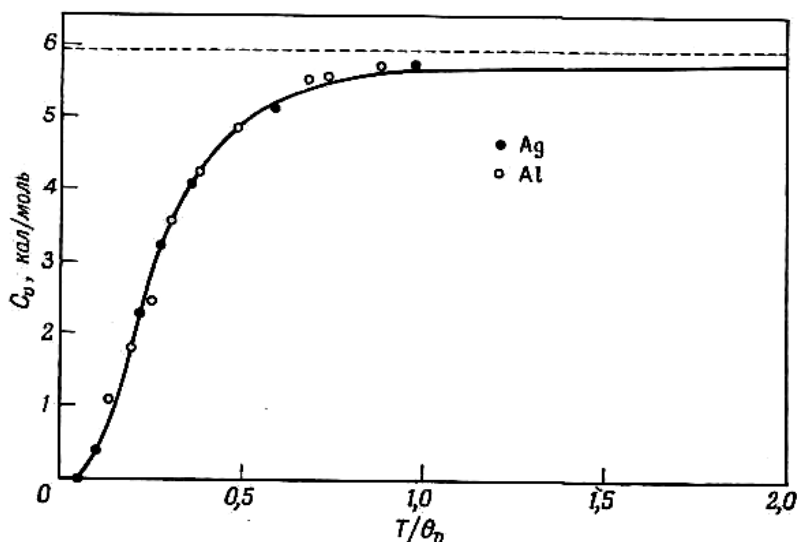


Рисунок 1.31

от температуры константой порядка 6 кал/моль·К. Следовательно, расчеты согласовывались с экспериментами для области высоких температур, но вносили серьезную ошибку при низких температурах. Выход был найден Эйнштейном и Дебаем, которые применили для анализа колебаний атомов **квантовомеханические** представления. Дебаевская температура приблизительно соответствует границе между областью высоких температур, где осцилляторы подчиняются

классическим законам, и областью низких температур, в которой важную роль играют квантовые эффекты.

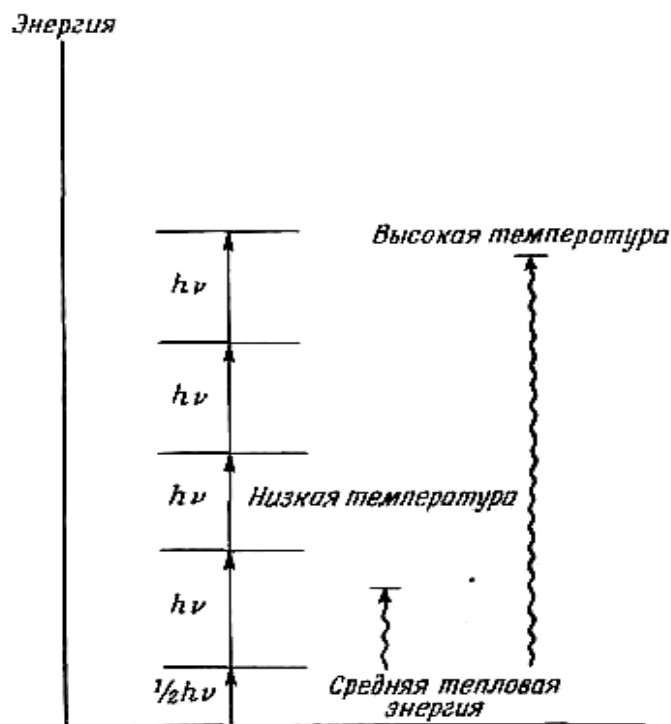


Рисунок 1.32

на рисунке 1.32 представлено тепловое возбуждение энергетических уровней осциллятора.

При **низких** температурах увеличение энергии осциллятора с частотой ν от одного уровня до следующего происходит редко, так как соседние уровни

Для детального объяснения квантовых эффектов нет простых путей. Однако значение этих эффектов можно наглядно продемонстрировать с помощью физических представлений. При низких температурах теплоемкость меньше, чем при высоких. Возбуждение колеблющихся атомов при **низких** температурах сравнительно затруднено. Это обусловлено тем, что колеблющиеся атомы не могут обладать любой произвольной энергией. Возможны только **дискретные** уровни, отстоящие друг от друга на величину $h\nu$ (рисунок 1.32). На рисунке 1.32 представлено тепловое возбуждение энергетических уровней осциллятора.

сильно удалены друг от друга по сравнению с имеющейся тепловой энергией. Например, для такого твердого тела, как медь, расстояния между уровнями составляют около 0,05 эВ. Поскольку такие переходы редки, возбуждаются лишь немногие осцилляторы. В результате и теплоемкость, и тепловая энергия малы.

При **высоких** температурах (выше θ_D) расстояние между уровнями мало по сравнению с тепловой энергией kT . Поэтому дискретный характер уровней энергии имеет меньшее значение, и система приближается к классической модели.

1.3.4 Теплоемкость твердых тел (классическая модель)

Проведем более детальное обсуждение теплоемкости с классической точки зрения. Это поможет читателю получить более глубокие представления о колебаниях самих атомов.

Первый шаг состоит в определении теплоемкости осциллятора. Предположим, что общую теплоемкость всего твердого тела, состоящего из N атомов, можно поровну разделить между $3N$ осцилляторами (каждый атом принимается за три осциллятора, так как атом может перемещаться в трех взаимно перпендикулярных направлениях). Тогда задача сводится к тому, чтобы объяснить, почему теплоемкость одного осциллятора будет равна $3R/3N$. Чтобы решить эту задачу, мы сначала рассмотрим **теплоемкость идеального газа**, поскольку температурная шкала установлена именно для идеального газа. Если мы сможем установить связь между энергией атомов идеального газа и его температурой, мы тем самым сумеем выявить процессы, которые приводят к поглощению энергии твердым телом при повышении его температуры. Напишем **уравнение состояния идеального газа**, занимающего объем V при давлении P и температуре T :

$$PV = RT \quad (1.31)$$

Чтобы рассчитать теплоемкость, надо выразить давление газа в замкнутом объеме через его внутреннюю энергию и подставить затем это выражение в уравнение (1.29). Мы не будем подробно приводить все выкладки. Некоторые промежуточные стадии этого вывода оставлены в качестве задач для студентов.

Определим давление, которое оказывает газ на стенки сосуда. Пусть сосуд имеет форму куба и площадь каждой стенки равна 1 м^2 . Тогда сила F , действующая на стенку, равна P . Предположим, что в этом объеме находится N атомов газа. Будем также считать, что их движение беспорядочно, т. е. параллельно каждой координатной оси перемещается $N/3$ атомов. Пусть скорость всех атомов одинакова и равна v . Тогда все атомы обладают одинаковым импульсом p . При каждом ударе атома о стенку ей передается импульс $2p$. По закону Ньютона сила равна dp/dt . Поэтому для всех N атомов можно написать

$$p = \frac{N}{3} m v^2 \quad (1.32)$$

где m — масса атома.

Это выражение можно преобразовать так, чтобы в него вошла энергия. Кинетическая энергия E каждого атома равна $\frac{1}{2} m v^2$.

Поэтому уравнение (1.32) можно написать в виде

$$p = \frac{2}{3} N E \quad (1.33)$$

Подставив значение P в уравнение (1.31), окончательно получим

$$E_{\text{газ}} = \frac{3RT}{2N}. \quad (1.34)$$

Если N — число Авогадро, то молярная теплоемкость C_v равна

$$C_v = \frac{3R}{2}, \quad (1.35)$$

Для идеального газа теплоемкость не зависит от температуры, а ее значение хорошо согласуется с измерениями для **одноатомных** газов. Тепловая энергия, приходящаяся на каждую степень свободы атома относительно пространственных координат, равна $kT/2$.

Теперь задача заключается в выводе для **твердого тела** уравнения, аналогичного выражению (1.35). Очевидно, что для твердого тела такой вывод нельзя дублировать, так как атомы твердого тела не ударяются о стенку сосуда, и давление равно нулю. Может показаться, что уравнение (1.35) вообще неприменимо для любых твердых тел. Однако значение этого уравнения очень велико и не ограничивается тем особым случаем, для которого оно было выведено. На каждое нормальное колебание системы приходится тепловая энергия $kT/2$ (в предельном случае высоких температур).

Нетрудно определить, как происходит изменение энергии гармонического осциллятора. Колеблющийся атом обладает и кинетической, и потенциальной энергиями. Обе эти составляющие не постоянны; только их сумма, общая энергия E_T , является константой. В течение периода кинетическая энергия изменяется от нуля до E_T . Среднее значение кинетической энергии в действительности равно точно $E_T/2$; такое же среднее значение имеет и потенциальная энергия. Вспомним, что для газа в замкнутом объеме тепловая энергия атома, отнесенная к каждой координате его перемещения, составляет ровно $kT/2$. Вспомним также, что для газа вся тепловая энергия есть энергия кинетическая, а потенциальной энергией газ не обладает. Предположим, что для осциллятора средняя кинетическая энергия $E_T/2$ имеет величину $kT/2$. Тогда общая теп-

ловая энергия каждого осциллятора равна kT , а суммарная тепловая энергия всего твердого тела, состоящего из JV атомов, будет составлять

$$E_{\text{тв}} = 3NkT \quad (1.36)$$

Из этого выражения следует, что молярная теплоемкость твердых тел равна

$$C_{V,\text{тв}} = 3Nk = 3R \quad (1.37)$$

Для температур выше дебаевских это уравнение дает классическое значение $6 \text{ кал/моль} \cdot \text{К}$. Отметим, что это ровно вдвое больше значения теплоемкости $3R/2$ для идеального газа, поскольку осциллятор может накапливать тепло и в виде потенциальной энергии. К уравнению (1.36) можно прийти и другим путем, который рассматривался ранее. Этот вывод основан на том, что каждый способ поглощения энергии допускает накопление ее в количестве $kT/2$ на каждую степень свободы. Тепловая энергия линейного осциллятора складывается из двух слагаемых: величины $kT/2$, приходящейся на долю кинетической энергии, и величины $kT/2$ — вклада потенциальной энергии. Следовательно, тепловая энергия твердого тела, рассматриваемого как совокупность $3N$ осцилляторов, опять равна $3NkT$.

Необходимо подчеркнуть, что аргументы, приводящие к выводу уравнения (1.37), в принципе корректны, но использованные количественные соотношения далеко не всегда точно отражают реальное положение дел.

Зная, что тепловая энергия осциллятора имеет порядок kT (по доказанному выше), можно вычислить амплитуду колебаний атома. При максимальном смещении $x_{\text{макс}}$ энергия осциллятора становится целиком потенциальной. Поскольку эта энергия равна $\alpha x_{\text{макс}}^2 / 2$ (см. рисунок 1.28),

$$x_{\text{макс}} = \left(\frac{2E_{\text{т}}}{\alpha} \right)^{1/2}.$$

Для атома, у которого коэффициент упругости «пружины» $\alpha \approx 25 \text{ н/м}$ (согласно оценке α , сделанной в параграфе 1.3.2 данного раздела), $x_{\text{макс}}$ при комнатной температуре имеет порядок $0,2 \text{ \AA}$. Этот результат хорошо согласуется с экспериментальными измерениями атомных смещений рентгеновскими методами.

1.3.5 Флуктуации энергии

Из уравнений, приведенных в предыдущих разделах, видно, что тепловая энергия твердого тела возрастает от нуля (при абсолютном нуле температуры) до нескольких сотен калорий на моль при комнатной температуре. В среднем эта энергия имеет порядок kT в расчете на каждую составляющую колебаний атома (или около $0,025$ эВ на атом при комнатной температуре). На первый взгляд может показаться, что при повышенных температурах энергия будет распределена равномерно между всеми атомами, но на самом деле это не так. Для колебаний атомов характерны флуктуации энергии колебаний каждого данного атома. Напомним, что **флуктуации** (от английского слова fluctuation – колебания) – это незначительные, случайные отклонения физических величин от их средних значений.

Колебания атомов реального кристалла весьма сложны, но качественные особенности этого явления можно легко продемонстрировать на **модели из двух обычных маятников**. Пусть эти маятники имеют одинаковую длину (рисунок 1.33а), а их движение не демпфируется. Тогда, если оба маятника приведены в колебание с одинаковой амплитудой (следовательно, и с равной энергией), они будут неограниченно долго качаться с такой же энергией. Общая энергия маятников остается постоянной, и на долю любого из них всегда приходится половина общей энергии.

Однако картина резко меняется, если два маятника соединены друг с другом гибкой связью, и их колебания перестают быть независимыми. Для получения такой связи удобно закрепить маятники на качающейся подвеске, например, на нити (рисунок 1.33б).

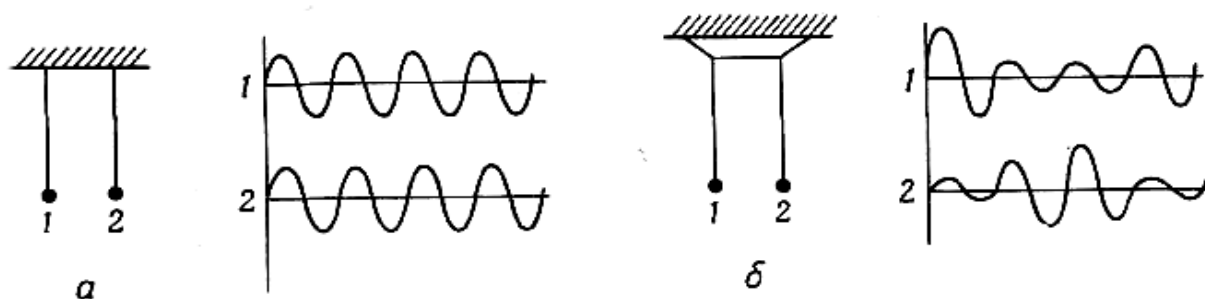


Рисунок 1.33

Пусть теперь маятники начали качаться с некоторой произвольной разностью фаз в исходный момент времени. Тогда их дальнейшие колебания не будут независимы, поскольку на движение каждого маятника через подвеску влияют колебания другого. Отклонения каждого маятника от положения равновесия изменяются со временем так, как это показано на рисунке 1.33б. Поскольку потенциальная энергия любого маятника пропорциональна квадрату амплитуды, колебательная энергия каждого маятника осциллирует как функция времени. Общая энергия всей системы неизменна (в отсутствие затуханий), а

средняя энергия каждого маятника составляет ровно половину общей. Мгновенные значения энергии отдельного атома претерпевают относительно этой средней величины периодические флуктуации в пределах от нуля до удвоенной средней энергии. Поэтому в действительности в каждый данный момент времени маятники обладают средней энергией очень редко.

Колебания атомов в реальном кристалле гораздо сложнее, чем процессы в этом простом примере. Тем не менее, физические принципы одинаковы в обоих случаях. Точно так же колебания атома приводят к появлению сил, которые действуют на соседние атомы и влияют на их колебания. Эти силы взаимодействия между атомами выполняют в кристалле роль связи между двумя маятниками. Поэтому движение атомов в кристалле с качественной стороны должно быть таким же, как у маятников. Конечно, общая энергия кристалла остается неизменной, но с течением времени колебательная энергия отдельного атома испытывает беспорядочные флуктуации относительно средней энергии. Единственное очень важное различие между атомами в кристалле и связанными маятниками состоит в том, что в кристалле существует огромное множество колебательных систем. Поэтому вместо регулярных периодических изменений энергии атома (относительно ее среднего уровня) она испытывает из-за сложности системы хаотические флуктуации.

Если флуктуации энергии действительно хаотичны, то они подчиняются **законам теории вероятностей**. Таким образом, в любой данный момент времени в определенных малых участках кристалла должны происходить флуктуации различной величины. Совершенно очевидно, что большие отклонения от средней величины менее вероятны, чем малые отклонения (подобно тому, как при подбрасывании монеты длинная серия одинаковых приземлений менее вероятна, чем короткая). Вероятность появления флуктуации данного размера определяется **уравнением Больцмана**

$$p(E) = A(T)e^{-E/kT} \quad (1.38)$$

Здесь $p(E)$ — вероятность пребывания атома в состоянии с энергией E ; k — постоянная Больцмана; T — температура; $A(T)$ — функция температуры и других физических параметров системы, подбираемая таким образом, чтобы интегральная вероятность существования атома в одном из состояний равнялась единице. $A(T)$ есть количественная характеристика всей системы. Для двух любых состояний системы с энергиями E_1 и E_2 относительная вероятность нахождения атома в этих состояниях равна

$$\frac{p(E_1)}{p(E_2)} = \frac{e^{-E_1/kT}}{e^{-E_2/kT}}. \quad (1.39)$$

Очень важен диапазон флуктуаций, возможных при данной температу-

ре. На рисунке 1.34 представлено больцмановское распределение вероятностей в зависимости от энергии состояний.

График уравнения (1.38) приведен на рисунке 1.34, причем за $E = 0$ принята энергия наинизшего состояния. При $E = kT$ значение $p(E)$ падает до 37%, а при $E = 3kT$ — до 5% от начального значения. Следовательно, флуктуации, превышающие несколько kT , происходят редко. Отметим, что вероятность флуктуации данной величины растет с повышением температуры. По этой

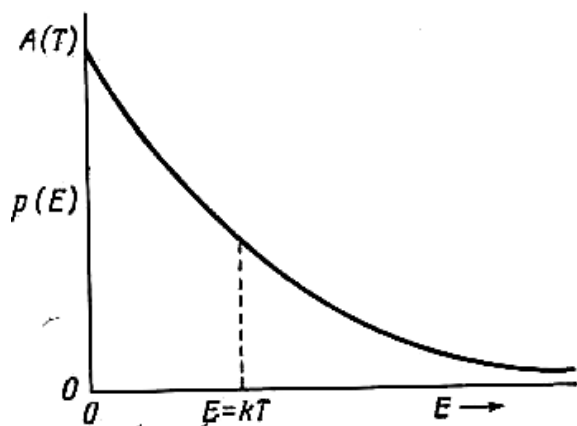


Рисунок 1.34

причине многие физические и химические процессы при высоких температурах протекают быстрее, чем при низких. Важными примерами такой закономерности являются диффузия в твердых телах и электропроводность в полупроводниках.

Уравнение (1.38) было введено для описания флуктуаций энергии данного атома, происходящих с течением времени. Однако это уравнение можно истолковать несколько иным, хотя и равноценным путем. Твердое тело состоит из атомов. Колебательная энергия каждого из них испытывает флуктуации, происходя-

щие точно таким образом, как рассмотрено выше. Следовательно, уравнение (1.38) описывает также распределение атомов твердого тела по различным энергетическим состояниям в любой момент времени. Атомы могут распределяться по уровням колебательной энергии множеством разнообразных способов (конечно, при условии постоянства общей энергии). В качестве меры количества способов, с помощью которых можно осуществить такое распределение, используется энтропия.

Энтропия (обозначается S) максимальна, когда максимально количество способов распределения энергии между атомными колебаниями (иными словами, при максимальной хаотичности). Через внутреннюю энергию E и энтропию S можно выразить важную термодинамическую функцию F — **свободную энергию** (по Гельмгольцу):

$$F = E - TS \quad (1.40)$$

где T — абсолютная температура. Свободная энергия используется при анализе механических систем, которые наиболее устойчивы в состояниях с минимальной внутренней энергией. Для систем с малой энтропией это приближение очень близко к реальному положению дел. Точное условие равновесия любых систем состоит в том, что должна быть **минимальна свободная энергия**.

1.3.6 Смещенные атомы

Тепловые колебания атомов твердого тела имеют большое значение, но они не приводят к серьезным нарушениям идеальной структуры кристалла. Каждый атом находится в среднем на своем собственном месте. Поэтому каждый атом окружен необходимым числом ближайших соседей, которые расположены на расстояниях, примерно соответствующих совершенной структуре. Невыполнение этих условий приводит к образованию некоторых дефектов решетки: либо у атомов неправильное количество ближайших соседей, либо нарушаются расстояния до ближайших соседей. Эти дефекты в зависимости от их геометрии можно разделить на три группы: точечные, линейные и поверхностные.

Точечные дефекты — это нарушения решетки в изолированных друг от друга точках решетки. Например, точечными дефектами являются вакансии, т. е. узлы решетки, в которых нет атомов (рисунок 1.35а). Точечными дефектами могут быть атомы внедрения, т. е. лишние атомы, поместившиеся в промежутках между атомами, расположенными в узлах решетки (рисунок 1.35б). Это могут быть примеси — инородные атомы, занимающие места в решетке (рисунок 1.35в). Отметим, что размеры этих дефектов примерно равны атомному диаметру.

К **линейным** дефектам относятся дислокации, имеющие заметную протяженность только в одном направлении. Такие дефекты оказывают большое влияние на механические свойства твердых тел. Подробное описание дислокаций будет дано в главе 2.

Поверхностные дефекты бывают двух типов: наружные и внутренние. Наружные дефекты точно соответствуют своему названию — это несовершенства, обусловленные тем, что поверхность твердого тела граничит с другой фазой. Твердые тела обладают **поверхностной энергией**; для металлов она имеет порядок 1 Дж/м^2 . Внутренние дефекты появляются в тех местах, где происходит переход от одной пространственной ориентации кристаллической решетки к другой. Относительная ориентация двух соседних кристаллических зерен может принимать бесконечное множество значений; соответственно существует бесконечное разнообразие границ между зернами. Большинство обычных твердых тел состоит из множества зерен, т. е. эти тела являются **поликристаллами**.

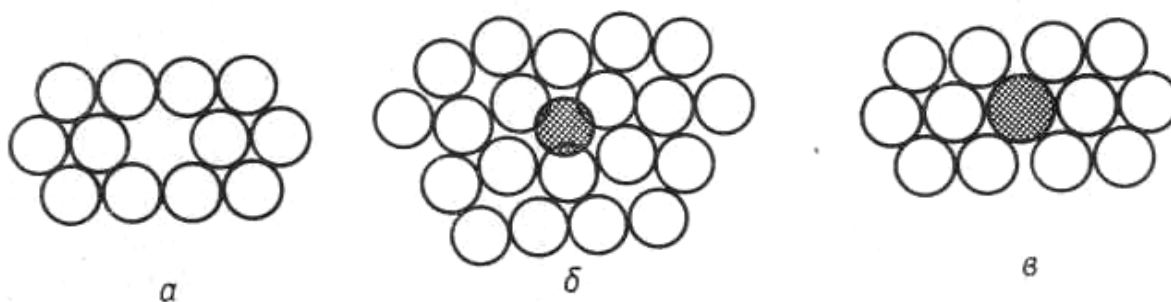


Рисунок 1.35

1.3.7 Вакансии и атомы внедрения

И вакансии, и атомы внедрения — это дефекты атомных размеров, и их нельзя увидеть в обычный микроскоп. На рисунке 1.36 приведена фотография Мюллера, полученная с помощью ионного проектора. Увеличение около 10^7

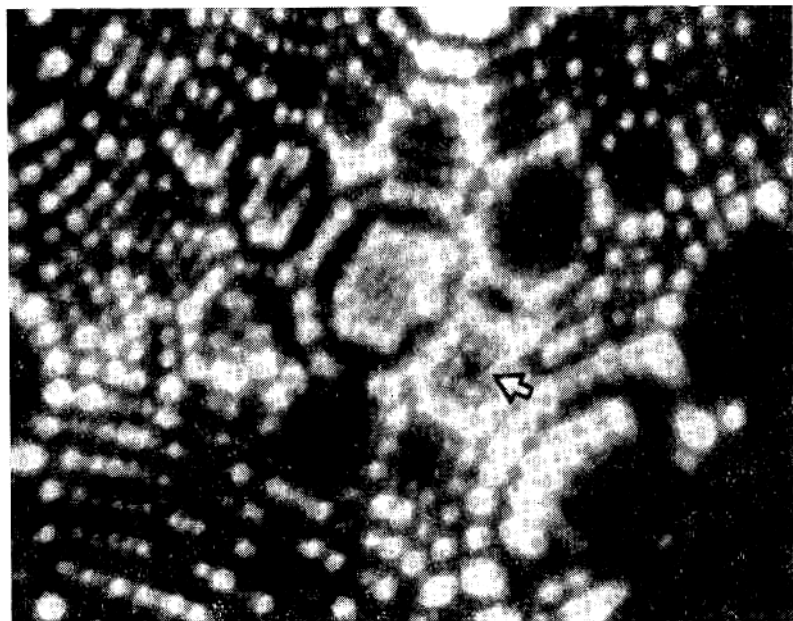


Рисунок 1.36

раз. Стрелкой показана вакансия в плоскости (202) на поверхности кристалла платины. Точечные дефекты играют существенную роль в некоторых наиболее важных процессах, происходящих в кристаллах. В связи с этим существует обширная литература по косвенным методам изучения свойств этих дефектов.

Сначала рассмотрим **вакансии**. Они имеются во всех кристаллах, как бы тща-

тельно последние ни выращивались. Под действием тепловых флуктуаций в реальном кристалле постоянно зарождаются и исчезают вакансии. Формально схему образования такого дефекта для двумерного кристалла можно проследить по рисунку 1.37. Внутренний атом может сорваться со своего узлового положения в решетке и перейти на поверхность. Для этого перехода необходима энергия. Вычислить точное значение этой энергии E_v очень трудно, а точное экспериментальное измерение возможно лишь при соблюдении особенной тщательности в проведении опытов. Поэтому количество энергии, потребляемой в этом процессе, известно только в немногих случаях. Для большинства кристаллов эта энергия имеет порядок 1 эВ на вакансию.

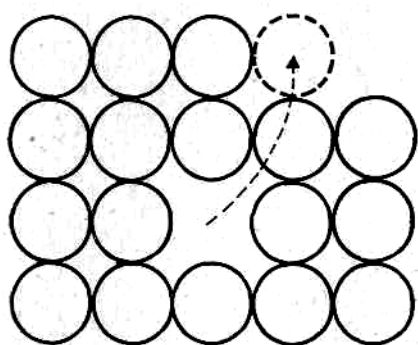


Рисунок 1.37

Хотя точное определение энергии образования вакансии действительно представляет трудную задачу, можно, тем не менее, понять физические причины происхождения основной части этой энергии. Предположим, что в двумерной решетке на рисунке 1.37 каждый атом взаимодействует только со своими соседями. Это взаимодействие мы называем **связью**. Такой подход является расширением теории реально существующей химической связи, хотя для твердых тел он недостаточно обоснован. Тем не менее, использование этих представлений

может помочь в проведении простого расчета энергии образования вакансий.

Когда срывается со своего места внутренний атом, разрываются четыре связи, а когда он занимает место в углу на поверхности, восстанавливаются только две связи. Следовательно, работа, необходимая для образования вакансии, просто равна энергии двух связей. Аналогичные рассуждения для трехмерного кристалла приводят к несколько более высокому числу невосстановленных связей, скажем, от четырех до шести. Поскольку энергия химических связей по порядку величины равна $\frac{1}{2}$ эВ на связь, эта простая оценка дает для энергии образования вакансий значения приблизительно 2—3 эВ на вакансию. Эта величина несколько завышена, поскольку не были учтены некоторые факторы. Главным среди них является незначительное сближение атомов, окружающих вакансию; в результате энергия образования вакансии снижается примерно до 1 эВ (для обычных металлов). В двумерной модели энергия образования вакансий при отсутствии релаксаций равна энергии связи в расчете на атом. Этот вывод является общим принципом. Однако если релаксации имеют большое значение, энергия образования вакансий уменьшается примерно вдвое.

Детальный механизм образования вакансий в кристаллической решетке не таков, как это показано на рисунке 1.37. Атом, находящийся внутри кристалла, не может перескочить на поверхность так, как это предполагалось выше. Такой переход возможен только в том случае, если атом обладает огромной кинетической энергией, необходимой для прохождения через всю решетку. Тем не менее, если атомы в узлах кристаллической решетки располагают необходимой энергией в 1 эВ, вакансии будут образовываться. (Это предположение соответствует духу всех термодинамических расчетов, в которых исследуется только характер равновесия, а не способы, какими система приходит к равновесию.)

Расчеты тепловой энергии атомов в решетке показывают, что их средняя колебательная энергия при обычных температурах гораздо меньше 1 эВ. Следовательно, атом решетки приобретает энергию образования вакансии только в результате большой флуктуации, величина которой достигает или превышает значение E_v . Относительная вероятность пребывания атома в состоянии с энергией, превышающей энергию основного состояния на величину E_v , равна $\exp(-E_v/kT)$. Следовательно, и вероятность существования вакансии подчиняется той же закономерности. В кристалле, содержащем N атомных узлов, количество вакантных мест n_v равно

$$n_v = Ne^{-E_v/kT} \quad (1.41)$$

Атомы внедрения — это избыточные атомы, проникшие в решетку, но не занимающие ее узлов. Эти дефекты могут быть двух видов: 1) атомы внедрения такого же типа, как в узлах регулярной решетки; 2) атомы внедрения другого типа (примеси).

Дефекты этих двух видов могут существовать в любой решетке и даже сосуществовать в одной и той же решетке.

Распределение энергии между атомами твердого тела, как и между моле-

кулами газа и жидкости, является **весьма неравномерным**. При любой температуре в кристалле имеются атомы, энергия которых во много раз больше и во много раз меньше среднего значения, отвечающего закону равномерного распределения ее по степеням свободы. Атомы, обладающие в данный момент достаточно высокой энергией, могут не только удалиться на значительное расстояние от положений равновесия, но преодолеть потенциальный барьер, созданный соседними атомами, и перейти в новое окружение, в новую ячейку. Такие атомы приобретают способность как бы «испаряться» из своих узлов решетки и «конденсироваться» во внутренних ее полостях — в междоузлиях (рисунок 1.38а). Этот процесс сопровождается возникновением вакантного узла (*вакансии*) и *атома в междоузлии (дислоцированного атома)*. Такого рода дефекты решетки называются **дефектами по Френкелю**.

Расчет показывает, что равновесное количество внедрившихся атомов n_{Φ} при данной температуре определяется следующим соотношением:

$$n_{\Phi} = ANe^{-E_{\Phi}/kT}, \quad (1.42)$$

где E_{Φ} — энергия образования внедрения, по порядку величины равная единицам электронвольт; N — число узлов решетки в данном объеме; A — целое число (обычно близкое 1), характеризующее количество одинаковых междоузлий в расчете на один атом решетки.

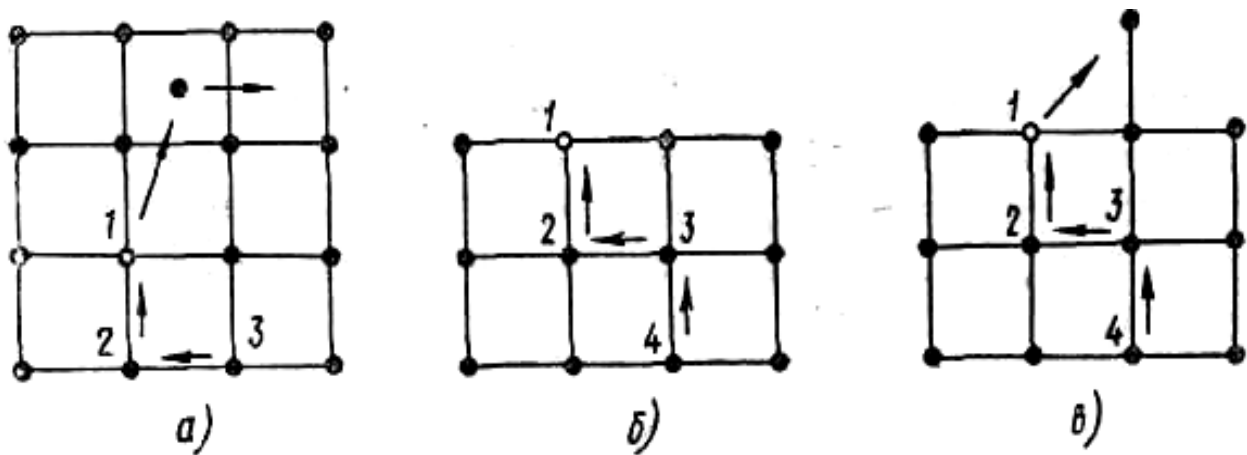


Рисунок 1.38

Помимо внутреннего испарения возможно полное или частичное испарение атомов с поверхности кристалла. При полном испарении атом покидает поверхность кристалла и переходит в пар (рисунок 1.38б). При частичном испарении атом переходит с поверхности в положение над поверхностью (рисунок 1.38в). В том и другом случаях в поверхностном слое кристалла образуется вакансия. При замещении вакансии глубжележащим атомом она втягивается внутрь кристалла и диффундирует по его объему. Этим вакансиям уже нельзя сопоставить дислоцированные атомы, так как их образование не сопровождается одновременным внедрением атомов в междоузлия. Такого рода ва-

кансии называют *дефектами по Шоттки*. Расчет показывает, что в кристалле, содержащем N узлов, равновесное количество вакансий $n_{\text{ш}}$ равно

$$n_{\text{ш}} = Ne^{-\frac{E_{\text{ш}}}{kT}}, \quad (1.43)$$

где $E_{\text{ш}}$ — энергия образования вакансии. Она несколько ниже $E_{\text{ф}}$ и для алюминия, например, составляет 0,75 эВ. Подставив это в (1.43) и положив $T = 300$ К, получим $n_{\text{ш}} \approx 10^{18} \text{ м}^{-3}$; при $T \approx 923$ К, т. е. при температуре, близкой точке плавления алюминия ($T_{\text{пл}} = 933$ К), $n_{\text{ш}} \approx 10^{25} \text{ м}^{-3}$. Это значение характерно для всех металлов вблизи их точки плавления.

Энергия образования дефектов по Френкелю приблизительно равна сумме образования вакансии и внедрения.

Дефекты по Френкелю и по Шоттки оказывают большое влияние на многие процессы в кристаллах. Они являются центрами рассеяния носителей, понижающими их подвижность. Дефекты могут служить источником носителей, т. е. действовать подобно донорам и акцепторам (обычно дефекты проявляют акцепторное действие); могут оказывать сильное влияние на оптические, магнитные, механические и термодинамические свойства кристаллов, особенно на свойства тонких полупроводниковых пленок и мелкокристаллических образцов.

Примеси являются одним из наиболее важных и распространенных дефектов структуры реальных кристаллов. Современные способы очистки не позволяют получать абсолютно чистые материалы. Даже наиболее чистые из них содержат до $10^{-9}\%$ примесей, что соответствует содержанию 10^{17} атомов примеси в 1 м^3 вещества. Чтобы образно представить себе степень чистоты такого вещества, укажем, что она эквивалентна загрязнению примерно 10 т пшеницы одним зерном ячменя.

В зависимости от природы примесей они могут находиться в кристалле

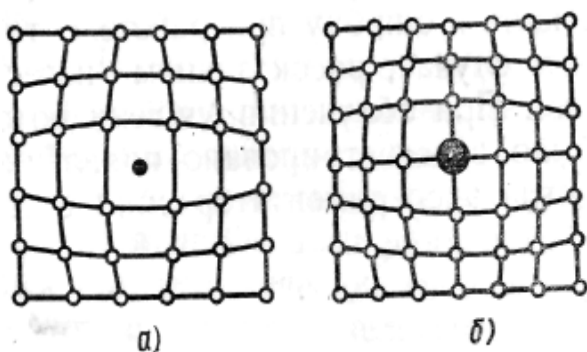


Рисунок 1.39

или в растворенном состоянии, или в виде более или менее крупных включений. Процесс растворения состоит в том, что примесные атомы внедряются в промежутки между атомами кристалла или замещают часть этих атомов, размещаясь в узлах решетки. В первом случае твердый раствор называют **раствором внедрения** (рисунок 1.39а), во втором случае — **раствором замещения** (рисунок 1.39б).

Так как чужеродные атомы по своей физической природе и размерам отличаются от атомов основного кристалла, то их присутствие вызывает искажение решетки кристалла. Поэтому при небольших размерах примесного атома энергия E_i должна быть мала. Небольшие атомы (водорода, углерода, кислорода и азота) должны, поэтому легко образовывать

дефекты внедрения в решетках металлов. Этот вывод соответствует действительности: металлические кристаллы часто поглощают очень большое количество указанных примесей. Например, при подходящих условиях цирконий будет поглощать так много водорода, что атомы водорода займут почти все междоузлия решетки.

Примеси могут оказывать существенное влияние на химические, оптические, магнитные и механические свойства твердых тел. Они являются эффективными центрами рассеивания носителей тока, обуславливая электрическое сопротивление, не исчезающее при абсолютном нуле. В полупроводниковых кристаллах примеси создают новые энергетические уровни и приводят к появлению *примесной проводимости*. Как показывает расчет, совершенно чистый кремний должен иметь удельное сопротивление порядка 2000 Ом·м; содержание в нем активных примесей в количестве $10^{-9}\%$ снижает удельное сопротивление до единиц. Технически чистый германий долгое время считался металлом, так как его удельное сопротивление такого же порядка, что и у металлов. Только глубокая очистка, доведшая содержание примесей в германии до 10^{-7} — $10^{-8}\%$, «сделала» его типичным полупроводником.

Интересные данные получены по исследованию свойств *предельно чистых металлов*. Так, тщательно очищенное железо оказалось химически инертным и не подвергается коррозии даже в условиях тропической влажности; титан, хром, висмут, вольфрам, молибден, имевшие репутацию хрупких, оказались пластичными даже в условиях глубокого охлаждения; олово, очищенное до содержания примесей $\approx 5 \cdot 10^{-6}\%$, настолько мягко, что изгибается под действием собственного веса, как тесто.

Несмотря на значительные успехи, достигнутые в области получения сверхчистых веществ, требования к дальнейшему повышению степени их очистки непрерывно растут и уже в ближайшем будущем потребуются материалы с содержанием примесей, не превышающим 10^{-10} – $10^{-12}\%$. Это относится, прежде всего, к материалам, используемым в установках по термоядерному синтезу, к материалам для микроэлектроники и для других отраслей промышленности. Такие материалы не только трудно получать, но и сохранять в них достигнутую степень чистоты, особенно если они перед применением должны проходить какую-либо обработку. Чтобы проиллюстрировать, насколько легко впасть в ошибку при работе с такими веществами, напомним об одном случае, рассказанном известным немецким физиком Гейзенбергом. При облучении мишени потоком нейтронов в масс-спектрометре было зарегистрировано появление ядер золота. Этот эффект исчез, когда экспериментатор снял с себя и убрал очки в золотой оправе.

Для улучшения свойств (механических, физических, химических и т. д.) твердых тел наряду с созданием бездефектных, сверхчистых кристаллов применяется другой способ, прямопротивоположный этому. Он состоит в максимальном искажении внутренней структуры кристалла введением в него примесей, выделением дисперсных фаз, сильным пластическим деформированием и т. д.

Как отмечалось выше, в кристалле в состоянии термодинамического

равновесия содержится конечное число вакансий и внедренных атомов. Кроме точечных дефектов, возникающих в результате тепловых флуктуаций, могут появляться точечные дефекты *иного происхождения*. Один из методов получения избыточного (для данной температуры) количества точечных дефектов состоит в резком охлаждении от более высокой температуры (*закалке*).

Другой способ создания избыточных дефектов заключается в сильной *деформации* кристаллической решетки, например ковкой или прокатыванием. Хотя решетка по-прежнему сохраняет в основном свою кристаллическую природу, при такой обработке возникают многочисленные дефекты структуры.

Третий метод увеличения количества точечных дефектов состоит в *бомбардировке* твердого тела атомами или частицами с высокой энергией, например путем облучения в циклотроне или нейтронным облучением в ядерном реакторе. Быстрые частицы соударяются с атомами решетки и смещают их, образуя при этом дефекты по Френкелю. При этом количество дефектов зависит не от температуры (за исключением процесса отжига, в ходе которого происходит «залечивание» дефектов), а только от природы кристалла и от бомбардирующих частиц. С помощью такой бомбардировки могут достигаться заметные концентрации смещенных атомов, что приводит к значительному изменению свойств материалов.

1.3.8 Контрольные вопросы к разделу 1.3

- 1 Какие свойства кристаллической решетки называются объемными или структурно-чувствительными?
- 2 Что называют несовершенствами или дефектами структуры?
- 3 На какие свойства кристалла оказывают влияние дефекты структуры?
- 4 Какова величина тепловых колебаний атомов (при обычных температурах) необходимых для перемещения атомов из равновесного положения на заметные расстояния?
- 5 Изобразите графически зависимость потенциальной энергии атома от расстояния между атомами в решетке твердого тела. Опишите характер этой зависимости.
- 6 Чему равно изменение энергии ΔE , связанное с изменением координаты атома от x_0 до x ?
- 7 Исходя из какого закона можно рассматривать атом, закрепленный в определенном узле решетки, как простой гармонический осциллятор?
- 8 Запишите выражение для силы f , действующей на каждый атом, а также дифференциальное уравнение, описывающее смещение атома. Какой вид имеет решение этого уравнения?
- 9 Чему равна угловая частота колебаний атома? эйнштейновская частота?
- 10 Что представляет собой постоянная α ? Как можно оценить величину α ?
- 11 Как можно рассчитать частоты колебаний? Чему равна амплитуда колебаний при комнатной температуре? Как называют низкочастотные колеба-

ния?

- 12 Что называется фононом? Как определяется смещение атома в кристалле?
- 13 Назовите способы поглощения тепловой энергии твердым телом.
- 14 Из каких слагаемых складывается общая энергия твердого тела? Что называется внутренней энергией E ? теплоемкостью при постоянном объеме? От чего зависит величина E ?
- 15 Какой вид имеет экспериментальная кривая теплоемкости? Изобразите ее графически и опишите температурные области: при абсолютном нуле; при температурах несколько выше абсолютного нуля; при высоких температурах.
- 16 Какую величину называют дебаевской температурой θ_D ? Каким соотношением связана величина θ_D с характеристической максимальной частотой колебаний атома ν_D ?
- 17 Кто из ученых применил для анализа колебаний атомов квантовомеханические представления? Какие законы действуют в области высоких температур? в области низких температур?
- 18 Почему при низких температурах теплоемкость меньше, чем при высоких?
- 19 Проведите детальное обсуждение теплоемкости с классической точки зрения: рассмотрите теплоемкость идеального газа, определите теплоемкость осциллятора, вычислите амплитуду колебаний атома.
- 20 Дайте определение флуктуации. На модели из двух обычных маятников рассмотрите колебания атомов реального кристалла.
- 21 Каким законам подчиняются колебания атомов, если флуктуации энергии хаотичны? Каким уравнением определяется вероятность появления флуктуации данного размера?
- 22 Чему равна относительная вероятность нахождения атома в состояниях системы с энергиями E_1 и E_2 ?
- 23 Представьте графически больцмановское распределение вероятностей в зависимости от энергии состояний.
- 24 По какой причине многие физические и химические процессы при высоких температурах протекают быстрее, чем при низких?
- 25 Что описывает уравнение Больцмана?
- 26 Какая величина используется в качестве меры количества способов, с помощью которых можно осуществить распределение атомов по уровням колебательной энергии?
- 27 В каком случае энтропия S максимальна?
- 28 Что такое свободная энергия (по Гельмгольцу)? В каких случаях используется понятие свободной энергии?
- 29 Какие дефекты называют точечными? линейными? поверхностными? Приведите примеры перечисленных дефектов.
- 30 Какой порядок имеет величина поверхностной энергии металлов? Какие тела являются поликристаллами?
- 31 Объясните схему образования вакансии для двумерного кристалла. Какой

порядок имеет величина энергии образования вакансии? величина энергии химических связей?

- 32 Каким соотношением определяется количество вакантных мест n_v в кристалле, содержащем N атомных узлов?
- 33 Что называют атомами внедрения? Какого рода дефекты решетки называются дефектами по Френкелю? дефектами по Шоттки? Приведите схему образования перечисленных дефектов.
- 34 Каким соотношением определяется равновесное количество внедрившихся атомов при данной температуре? равновесное количество вакансий?
- 35 Какое влияние оказывают дефекты по Френкелю и по Шоттки на процессы в кристаллах? на свойства кристаллов?
- 36 Что называют примесями? В каком состоянии примеси могут находиться в кристалле?
- 37 В каком случае твердый раствор называют раствором внедрения? раствором замещения? Какое влияние на свойства твердых тел могут оказывать примеси?
- 38 С какой целью в твердом теле искусственно создаются дефекты? Перечислите способы создания избыточных дефектов.
- 39 Что такое закалка? Какие дефекты образуются при бомбардировке твердого тела атомами или частицами с высокой энергией?

2 Механические свойства твердых тел

Из всех свойств, которыми обладают твердые тела, наиболее характерными являются механические свойства — прочность, твердость, пластичность, износостойкость и др. Именно благодаря этим свойствам твердые тела получили столь широкое практическое применение в качестве конструктивных, строительных, электротехнических, магнитных и других материалов, без которых немыслимо развитие материального производства. Даже названия целых эпох ранней цивилизации связаны с названием твердых тел, механические свойства которых обусловили качественный скачок в развитии человеческого общества, — каменный век, бронзовый век, железный век и т. д.

В настоящей главе кратко излагаются современные физические представления о механических свойствах твердых тел, закономерностях их пластического течения и разрушения, физической природе прочности и перспективах разработки материалов с уникальными механическими свойствами.

2.1 Деформации твердого тела

2.1.1 Упругая и пластическая деформации. Закон Гука

При действии на кристалл внешней растягивающей нагрузки расстояние между атомами увеличивается и равновесное расположение их в кристалле нарушается. Это приводит к нарушению равенства сил притяжения и отталкивания, характерного для равновесного состояния атомов в решетке, и возникновению внутренних сил, стремящихся вернуть атомы в первоначальные положения равновесия. Величину этих сил, рассчитанную на единицу площади поперечного сечения кристалла, называют **напряжением**. Вычислим его.

Ранее было показано, что энергия взаимодействия частиц **1** и **2** в твердом теле является функцией расстояния r между ними и описывается кривой $U(r)$, схематически показанной на рисунке 2.1. При смещении частицы **2** из положения равновесия на расстояние x , т. е. при увеличении расстояния между частицами до $r = r_0 + x$, энергия частицы увеличивается, становясь равной $U(r)$. Изменение энергии $U(x) = U(r) - U(r_0)$ можно найти, разлагая $U(r)$ в ряд Тейлора по степеням x :

$$U(x) = \left(\frac{\partial U}{\partial r} \right)_0 x + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 U}{\partial r^2} \right)_0 x^2 + \frac{1}{6} \left(\frac{\partial^3 U}{\partial r^3} \right)_0 x^3 + \dots \quad (2.1)$$

Ограничиваясь квадратичным членом разложения и учитывая, что $(\partial U / \partial r)_0$ в точке O равна нулю, находим

$$U(x) \approx \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 U}{\partial r^2} \right)_0 x^2 = \frac{1}{2} \beta x^2, \quad (2.2)$$

где β — жесткость связи.

Мы получили приближенное выражение для изменения энергии частицы вследствие смещения ее из положения равновесия на расстояние x . Приближенным оно является потому, что в разложении (2. 1) мы ограничились квадра-

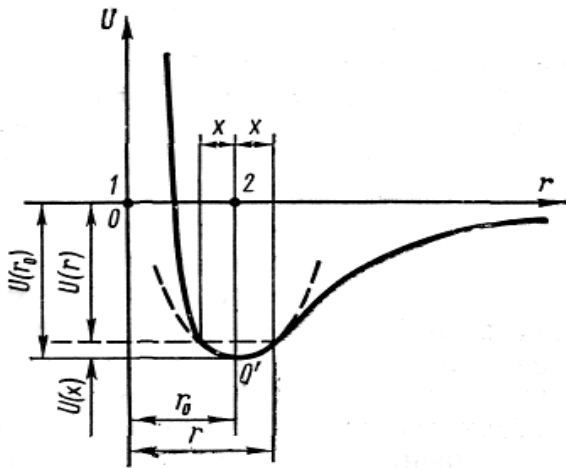


Рисунок 2.1

тичным членом и отбросили члены более высокого порядка. Графически зависимость в таком приближении выражается параболой, показанной на рисунке 2.1 пунктиром. Сила, которая возникает между частицами 1 и 2 при изменении расстояния между ними на x , равна

$$f = -\frac{\partial U(x)}{\partial x} = -\beta x. \quad (2.3)$$

Как видно из (2.3), сила пропорциональна первой степени смещения x и направлена к положению равновесия, на что указывает знак минус. Известно,

что под действием такой силы тело совершает гармонические колебания. Поэтому такую силу называют **гармонической**, а приближение (2.2), приведшее к гармонической силе, называют **гармоническим** приближением. График зависимости $f(x)$ в области малых значений x представляет собой прямую.

Теперь представим себе, что к стержню с поперечным сечением S и длиной L приложена растягивающая сила F , которая изменяет расстояние между соседними атомными плоскостями 1 и 2 на x , вызывая тем самым удлинение стержня на ΔL . Эта сила будет уравновешена внутренней силой $F_{\text{вн}}$, численно равной

$$F_{\text{вн}} = fN = N\beta x, \quad (2.4)$$

где N — число частиц, находящихся в атомном слое площадью S . Напряжения σ , которые возникнут в растянутом стержне, будут равны

$$\sigma = \frac{F_{\text{вн}}}{S} = \frac{N}{S} \beta x = cx, \quad (2.5)$$

где $c = N\beta/S$. Умножая и деля правую часть (2.5) на расстояние между атомными плоскостями r_0 , получим

$$\sigma = cr_0 \frac{x}{r_0} = E\varepsilon, \quad (2.6)$$

где

$$E = cr_0 = \frac{N}{S} \beta r_0 \quad (2.7)$$

называется **модулем упругости**, или **модулем Юнга**, а

$$\varepsilon = x / r_0 \quad (2.8)$$

представляет собой **относительное изменение параметра решетки** в направлении действия внешней силы F .

Умножая числитель и знаменатель выражения (2.8) на число атомных слоев $N_{\text{сл}}$, размещающихся на длине образца L , найдем

$$\varepsilon = \frac{xN_{\text{сл}}}{r_0N_{\text{сл}}} = \frac{\Delta L}{L} \quad (2.9)$$

Таким образом, ε представляет собой **относительное удлинение образца**, вызванное действием внешней растягивающей силы.

Из формулы (2.6) видно, что до тех пор, пока выполняется гармоническое приближение, т. е. пока силы, возникающие при смещении частиц относительно друг друга вследствие деформации тела, остаются **линейными** функциями смещения, напряжения σ , формирующиеся в теле, будут пропорциональны относительной деформации тела:

$$\sigma = E\varepsilon.$$

Коэффициентом пропорциональности служит **модуль упругости** E .

Формула (2.6) выражает известный **закон Гука**. Как видим, он справедлив лишь постольку, поскольку справедливо гармоническое приближение, т. е. для очень малых относительных деформаций ε .

Из формулы (2.6) легко установить физический смысл модуля упругости. По размерности модуль определяется как Н/м^2 или Дж/м^3 . Следовательно, модуль является фундаментальной характеристикой материала, определяющей плотность энергии связи атома.

В качестве примера в таблице 2.1 приведены значения модуля упругости для ряда металлических кристаллов.

Из данных таблицы 2.1 видно, что модуль упругости твердых тел имеет весьма высокое значение (порядка 10^{10} — 10^{11} Па), что свидетельствует о том, что в этих телах силы связи очень велики.

Таблица 2.1

Вещество	Е, ГПа		G, ГПа	
	максимум	минимум	максимум	минимум
Алюминий	77	64	29	25
Вольфрам	400	400	155	155
Железо	290	135	118	60
Магний	514	437	184	171
Медь	194	68	77	31
Цинк	126	365	497	278

Для ряда кристаллов модуль упругости существенно зависит от **направления**, в котором происходит деформация решетки. В таблице 2.1 приведены значения E для направлений, в которых он максимален и минимален. Отношение $E_{\text{макс}}/E_{\text{мин}}$ для некоторых кристаллов достигает 3, что указывает на высокую **анизотропию** таких кристаллов.

Модуль упругости зависит только от природы атомов (молекул), образующих тело, и от их взаимного расположения. Изменить его можно лишь путем значительного изменения состава или внутренней структуры твердого тела. Однако и в этом случае наблюдается лишь сравнительно небольшое изменение E . Так, введение в сталь значительных количеств легирующих добавок, термическая обработка, холодная прокатка и т. д. сильно увеличивают ее твердость и другие механические характеристики и лишь незначительно изменяют (до 10%) модуль упругости; введение в медь до 40% цинка не меняет практически модуль упругости, хотя другие свойства меняются при этом очень сильно. Мы рассмотрели деформацию растяжения. Однако все рассуждения и полученные результаты остаются справедливыми и для других видов деформации — **сжатия и сдвига**. В последнем случае следует брать вместо модуля упругости **модуль сдвига** G , значения которого также приведены в таблице 2.1.

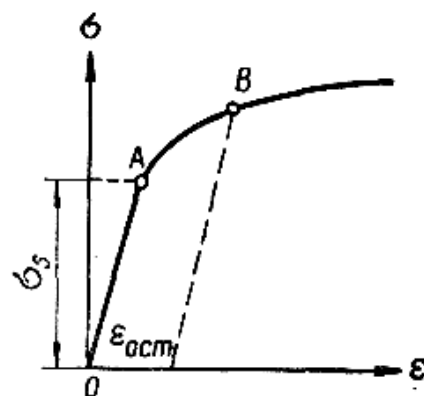


Рисунок 2.2

При непрерывном увеличении внешней нагрузки непрерывно растут напряжение σ и деформация ϵ (рисунок 2.2). При некотором напряжении σ_s , характерном для каждого материала, наблюдается или разрушение кристалла, или нарушение прямой пропорциональности между σ и ϵ и возникновение остаточной (пластической) деформации $\epsilon_{\text{ост}}$, не исчезающей после снятия внешней нагрузки. В первом случае материал является **хрупким**, во втором — **пластичным**. Напряжение σ_s , при котором начинается заметное течение тела, называется **пределом текучести**; области OA и AB — соответственно областями упругой и пластической деформации. Максимальное напряжение, возникающее в теле до разрушения, называется **пределом прочности** (σ_p). В хрупких материалах предел упругости совпадает с пределом прочности, поэтому они разрушаются без видимой пластической деформации. В пластичных же металлах

предел упругости и текучести, как правило, значительно меньше предела прочности. Поэтому разрушение таких материалов происходит после значительной пластической деформации.

2.1.2 Основные закономерности пластического течения кристаллов

Остаточная деформация возникает во всех случаях испытания пластичных кристаллов на растяжение и сжатие, если напряжение в кристалле превысит предел текучести. Однако причиной появления этой деформации не могут служить ни растяжение, ни сжатие как таковые. Увеличение степени растяжения кристалла может привести лишь к увеличению расстояния между атомными плоскостями, перпендикулярными действующей силе. При достаточном удалении этих плоскостей друг от друга силы притяжения между ними могут оказаться неспособными уравновесить внешнюю нагрузку и кристалл разрушется. Сжатие может вызвать лишь сближение атомных плоскостей, продолжающееся до тех пор, пока возникающие силы отталкивания между атомами не уравновесят внешнюю нагрузку. Деформация в этом случае является *идеально упругой* и не может привести к необратимым перемещениям частей решетки.

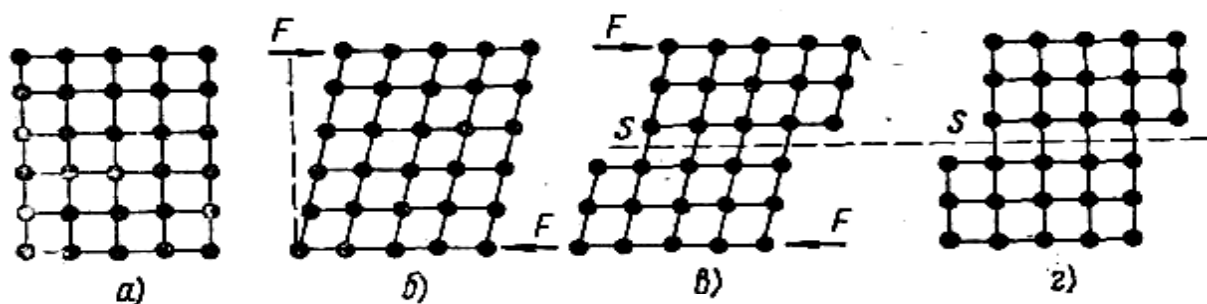


Рисунок 2.3

Пластическая деформация может возникнуть в результате действия лишь скалывающих напряжений, способных вызвать смещение одних частей кристалла относительно других без нарушения связи между ними. Такое смещение называют *скольжением*. Оно составляет сущность процесса пластического течения кристаллических тел. На рисунке 2.3 показано возникновение и развитие остаточной деформации в кристалле (рисунок 2.3 а) при действии сдвигающей силы F . До тех пор пока не достигнут предел упругости, кристалл деформируется упруго (рисунок 2.3 б) и касательные напряжения τ растут пропорционально относительной деформации сдвига γ (закон Гука):

$$\tau = G\gamma \quad (2.10)$$

(G — модуль сдвига); после снятия внешней нагрузки атомы возвращаются в свои первоначальные положения. При превышении предела упруго-

сти внутри кристалла вдоль определенных плоскостей S , называемых **плоскостями скольжения**, происходит сдвиг одной части кристалла относительно другой (рисунок 2.3 в) на одно или несколько атомных расстояний. После снятия внешней нагрузки упругие напряжения решетки снимаются, однако одна часть кристалла остается смещенной относительно другой (рисунок 2.3 г). Из таких малых необратимых смещений, протекающих во многих плоскостях скольжения, складывается остаточная деформация кристалла в целом.

Способность кристалла к пластической деформации определяется, прежде всего, характером сил связи между его структурными элементами.

Ковалентная связь, обладающая строгой направленностью, резко ослабляется уже при незначительных смещениях атомов друг относительно друга. При сдвиге эта связь разрушается раньше, чем атомы успевают устанавливать ее с другими своими соседями. Поэтому кристаллы валентного типа (алмаз, кремний, германий, сурьма, висмут, мышьяк и др.) не проявляют способности к пластической деформации. По исчерпанию упругой деформации они хрупко разрушаются.

Металлическая связь, не имеющая направленного характера, меняется, наоборот, очень слабо при тангенциальных смещениях атомов друг относительно друга. Поэтому возможны весьма большие смещения (на тысячи атомных расстояний) одних частей решетки относительно других, что и определяет высокую степень пластичности кристаллов этого типа.

Ионная связь занимает промежуточное положение между металлической и ковалентной связями. Она не столь направленная, как ковалентная, но и не столь гибкая, как металлическая. Типичные ионные кристаллы NaCl , CaF_2 , KCl и т. д. являются почти такими же хрупкими, как и кристаллы валентного типа. В то же время кристаллы хлористого серебра обладают достаточно высокой пластичностью.

Скольжение в кристалле протекает по определенным кристаллографическим плоскостям и направлениям. Таковыми являются обычно наиболее плотно упакованные атомные плоскости и направления. Объясняется это тем, что плотно упакованные плоскости и направления являются наиболее прочными, так как расстояния между атомами в них наименьшие и связь между ними наибольшая. С другой стороны, расстояние между такими плоскостями наибольшее [см. (1.3)], вследствие чего связь между ними наименьшая. Скольжение вдоль этих плоскостей и направлений протекает при минимальном нарушении в расположении атомов и является, поэтому наиболее легким.

Совокупность плоскости скольжения и направления скольжения, лежащего в этой плоскости, образует **систему скольжения**.

В кубической гранецентрированной решетке плоскостью скольжения является плоскость октаэдра (111) , направлением скольжения — направление пространственной диагонали $[111]$. В гексагональных кристаллах плоскостью скольжения SS является плоскость базиса (0001) , направлением скольжения X — одна из трех осей, лежащих в плоскости базиса (рисунок 2.4; P — внешнее деформирующее усилие).

Таблица 2.2

Металл	Содержание примесей, 10^{-4}	Плоскость скольжения	Направление скольжения	$\tau_k \cdot 10^7$ Па
Кадмий	0,4	(0001)	[100]	0,058
Магний	5	(0001)	[100]	0,083
Медь	10	(111)	[101]	0,1
Никель	20	(111)	[101]	0,58
Серебро	1	(111)	[101]	0,06
Цинк	4	(0001)	[100]	0,094

Многочисленные исследования показали, что сдвиг в кристалле по данной системе скольжения происходит лишь начиная с момента, когда скалывающее напряжение τ , действующее в этой системе скольжения, достигает критического значения τ_k , называемого **критическим скалывающим напряжением**. В таблице 2.2 приведены значения критических скалывающих напряжений для ряда чистых металлических монокристаллов.

Из данных таблицы 2.2 видно, что для наиболее пластичных монокристаллов критическое скалывающее напряжение не превышает 10^6 Па.

Критическое скалывающее напряжение сильно зависит от степени предварительной деформации кристалла, увеличиваясь с ее ростом. Это явление по-

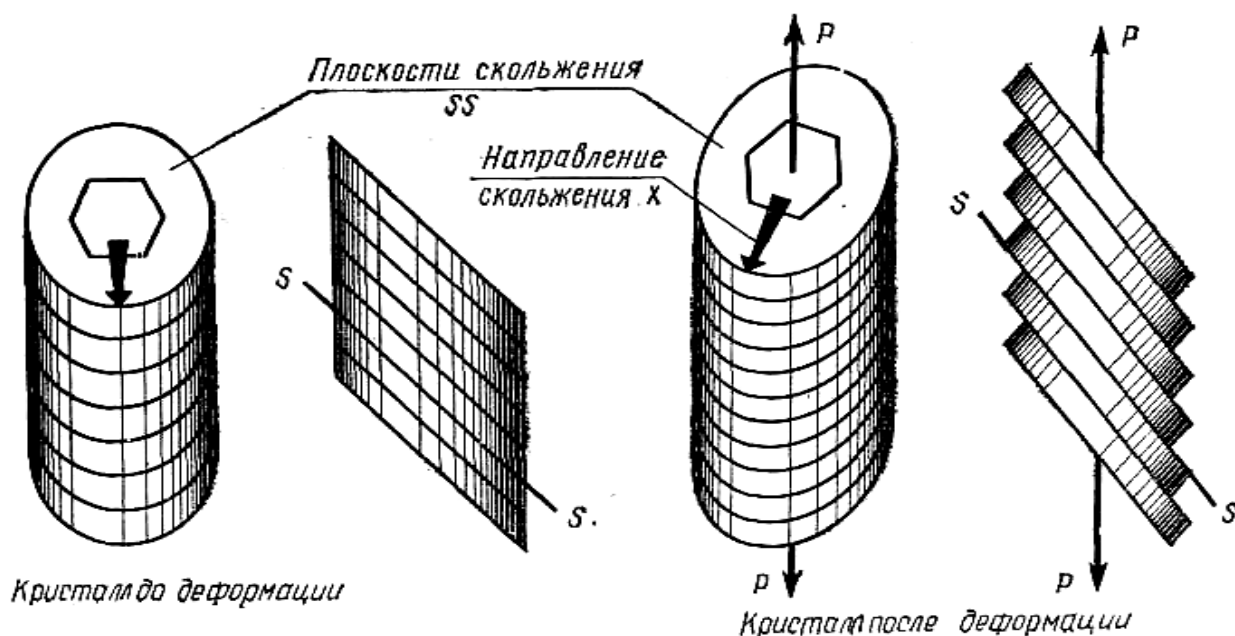


Рисунок 2.4

лучило название **упрочнения**, или наклепа. Так, предварительная деформация монокристаллов магния на 350% приводит к увеличению τ_k примерно в 25 раз. Еще большее упрочнение испытывают кристаллы кубической системы — алюминий, медь, никель и другие.

Упрочнение кристаллов свидетельствует о протекании в них не-

обратимых процессов, связанных с перемещением атомов и отдельных частей кристалла друг относительно друга, что должно приводить к изменению **внутренней энергии** кристаллов. Экспериментальное изучение этого явления показало, что в процессе пластического деформирования твердых тел их внутренняя энергия действительно увеличивается. В таблице 2.3 приведены максимальные количества энергии, которые накапливают различные металлы в процессе деформации.

Таблица 2.3

	Q, Дж / кг
Алюминий	4400
Медь	2000
Железо	4800
Никель	3120
Латунь	2000

Если бы эта энергия была превращена в теплоту, то ее оказалось бы достаточно для нагревания металла на несколько градусов.

Так как накопление энергии в кристалле в процессе пластического деформирования связано с необратимыми смещениями атомов и частей кристалла друг относительно друга, то эта энергия представляет по существу энергию **остаточных напряжений**, возникающих в упруго искаженных участках кристаллической решетки.

Повышенное значение внутренней энергии холоднодеформированного кристалла делает его термодинамически менее устойчивым по сравнению с отожженным состоянием. Это приводит к возникновению и развитию в кристалле процессов, стремящихся приблизить его к равновесному состоянию. Такими процессами являются отдых и рекристаллизация.

Отдых состоит в рассасывании внутренних напряжений вследствие перемещения атомов искаженных областей решетки в свои равновесные положения. Этот процесс протекает без видимого изменения структуры кристалла и приводит к частичному или полному снятию упрочнения, полученного в результате пластического деформирования. Являясь диффузионным процессом, отдых протекает со скоростью, резко зависящей от температуры и скрытой энергии деформирования. Металлы с низкой точкой плавления (олово, свинец, кадмий, цинк и др.) уже при комнатной температуре имеют сравнительно высокую скорость самодиффузии, поэтому отдыхают с заметной скоростью. В то же время в пластически деформированных тугоплавких металлах отдых при комнатной температуре практически не идет, но он резко усиливается с повышением температуры (при 315°C за 1 мин протекает такой же отдых, какой происходит при комнатной температуре за 100 лет).

При температуре, составляющей примерно четверть температуры плавления металла (в абсолютной шкале), интенсивно развивается другой процесс, также приводящий к разупрочнению наклепанного кристалла, — процесс **рекристаллизации**. В отличие от отдыха, протекающего без видимого изменения

структуры кристалла, при рекристаллизации в образце возникают и растут новые кристаллы, свободные от внутренних напряжений. Центры этих кристаллов зарождаются в первую очередь в наиболее искаженных областях решетки, богатых избыточной свободной энергией. Происходит, таким образом, полное изменение микроструктуры образца и переход его в общем случае от монокристалльного к поликристалльному состоянию. Скрытая энергия, которая была накоплена в деформированном кристалле, выделяется при рекристаллизации в форме теплоты.

2.1.3 Механическое двойникование

Пластическая деформация может протекать также путем **двойникования**, представляющего собой процесс последовательного смещения друг относительно друга атомных плоскостей, параллельных плоскости двойникования, на одно и то же расстояние, составляющее некоторую часть параметра решетки. На рисунке 2.5 приведена схема двойникования кристалла AECDA; область ABCDA представляет собой недеформированную часть кристалла, BECB — часть, испытавшую двойникование, BC — ось двойникования. Крестиками обозначены положения атомов до двойникования. Плоскость, проходящая через ось двойникования и отделяющая двойниковую область от неискаженной части кристалла, называется **плоскостью двойникования**.

На рисунке 2.5 видно, что при двойниковании атомы плоскости **11** сдвинуты относительно плоскости двойникования BC в направлении двойникования на часть атомного расстояния. Плоскость **22** сдвинута на такую же часть атомного расстояния относительно плоскости **11** и на удвоенную часть этого расстояния относительно плоскости двойникования и т. д. Иначе говоря, каждая атомная плоскость, параллельная плоскости двойникования, смещается вдоль самой себя на расстояние, пропорциональное расстоянию ее от плоскости двойникования. В результате этого атомы в двойниковой области занимают положения, соответствующие зеркальному отображению структуры недеформированной части кристалла относительно плоскости двойникования.

Двойникование, как и скольжение, развивается только по определенным кристаллографическим плоскостям. Для гранецентрированных кубических решеток такой плоскостью является плоскость (112), для гексагональных плотно упакованных кристаллов — плоскость (1012) и т. д. Для осуществления двойникования необходимо, чтобы касательные напряжения достигали критического значения. Развивается этот процесс очень быстро и сопровождается обычно характерным потрескиванием.

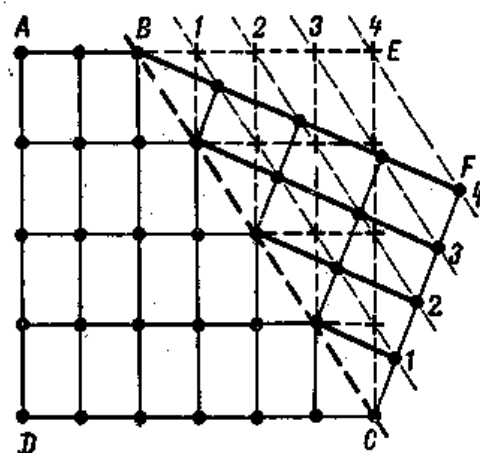


Рисунок 2.5

Так как при двойниковании происходят лишь незначительные смещения соседних атомных плоскостей друг относительно друга, то оно не может привести к большой остаточной деформации. Так, в цинке полный переход кристалла к двойниковой ориентировке вызывает удлинение его только на 7,39%. Поэтому в кристаллах, способных к пластическому течению путем скольжения, на двойникование приходится обычно лишь незначительная доля общей пластической деформации. У валентных же кристаллов, у которых процесс скольжения развиваться не может, незначительная деформация перед разрушением обеспечивается двойникованием. У гексагональных кристаллов, неблагоприятно ориентированных по отношению внешней силы, двойникование, вызывающее изменение ориентации кристалла и значительные внутренние напряжения, может привести к значительной остаточной деформации путем обычного скольжения.

2.1.4 Теоретическая и реальная прочности кристаллов на сдвиг

Основным механизмом пластического течения кристаллов является *сдвигообразование*. Долгое время считалось, что такое сдвигообразование происходит путем жесткого смещения одной части кристалла относительно другой одновременно по всей плоскости скольжения SS (рисунок 2.6).

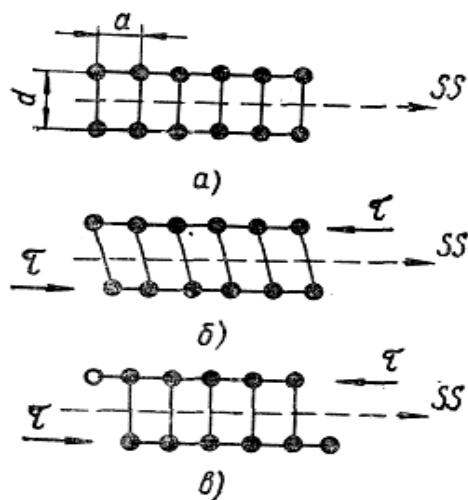


Рисунок 2.6

Произведем грубую оценку величины касательного напряжения, необходимого для производства такого сдвига.

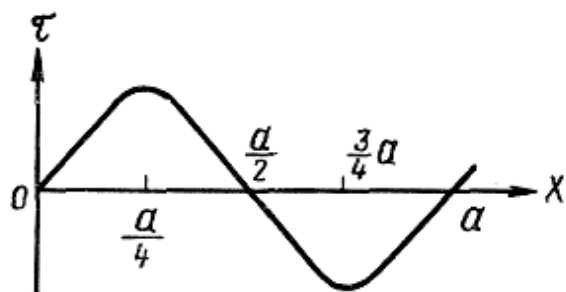


Рисунок 2.7

В неискаженной решетке атомы двух соседних параллельных плоскостей занимают положения равновесия, отвечающие минимуму потенциальной энергии (рисунок 2.6 а). Силы взаимодействия между ними равны нулю. При постепенном смещении одной атомной плоскости относительно другой возникают касательные напряжения τ , препятствующие сдвигу и стремящиеся восстановить нарушенное равновесие (рисунок 2.6 б). Принимая для этих напряжений синусоидальный закон изменения с величиной смещения (рисунок 2.7), сопротивление сдвигу можно выразить следующим образом:

$$\tau = A \sin \frac{2\pi\chi}{b}, \quad (2.11)$$

где x — смещение атомов от положения равновесия, $b = a$ — расстояние между атомами в плоскости скольжения, A — постоянная. Для малых смещений $\sin \frac{2\pi x}{b} \approx \frac{2\pi x}{b}$, поэтому

$$\tau \approx A 2\pi x / b \quad (2.12)$$

С другой стороны, для малых смещений справедлив закон Гука:

$$\tau = Gx / d, \quad (2.13)$$

где G — модуль сдвига, d — расстояние между плоскостями. Из (2.12) и (2.13) получим $A = \frac{b}{d} \frac{G}{2\pi}$. Поэтому

$$\tau = \frac{b}{d} \frac{G}{2\pi} \sin \frac{2\pi x}{b} \quad (2.14)$$

При $x = b/4$ касательное напряжение τ достигает максимального значения τ_k , которое и принимается за **теоретическую прочность**:

$$\tau_k = \frac{b}{d} \frac{G}{2\pi} \quad (2.15)$$

Полагая $b = d$, найдем

$$\tau_k = \frac{G}{2\pi} \quad (2.16)$$

Критическое скалывающее напряжение должно составлять, таким образом, примерно десятую долю от модуля сдвига. Более строгий учет характера сил взаимодействия между атомами приводит к незначительному уточнению этой величины. Наименьшее значение, которое получено для τ_k , равно $G/30$. В таблице 2.4 приведено для ряда металлических кристаллов τ_k , определенное из опыта и вычисленное теоретически. Сравнение этих величин показывает, **что реальная прочность кристаллов на сдвиг на 3—4 порядка меньше теоретически вычисленной прочности этих кристаллов. Это свидетельствует о том, что сдвиг в кристаллах происходит не путем жесткого смещения атомных плоскостей друг относительно друга, а осуществляется таким механизмом, при котором в каждый момент имеет место смещение относительно малого количества атомов.** Это привело к развитию дислокационной теории пластического течения кристаллов.

Таблица 2.4

Металл	$\tau_K, 10^7 \text{ Па}$	$G, 10^7 \text{ Па}$	$\tau_K, 10^7 \text{ Па}$ (теоретическое)	
			$G / 2\pi$	$G / 30$
Медь	0,10	4620	735	154
Серебро	0,06	2910	455	97
Никель	0,58	7800	1240	260
Железо	2,90	6900	1100	230
Магний	0,08	1770	280	59
Цинк	0,09	3780	600	126
Кадмий	0,06	2640	420	88

2.1.5 Контрольные вопросы к разделу 2.1

- 1 Какую величину называют напряжением?
- 2 Получите приближенное выражение для изменения энергии частицы вследствие смещения ее из положения равновесия на расстояние x . Изобразите графически зависимость в таком приближении.
- 3 Чему равна сила, которая возникает между частицами при изменении расстояния между ними на x ? Почему силу называют гармонической, а приближение, приведшее к гармонической силе, называют гармоническим приближением?
- 4 Что называется модулем упругости, или модулем Юнга? Каков физический смысл модуля упругости? От чего зависит модуль упругости? Как можно изменить его?
- 5 Каков порядок модуля упругости твердых тел? Приведите в качестве примера значения модуля упругости для некоторых металлических кристаллов.
- 6 Что представляет собой относительное изменение параметра решетки в направлении действия внешней силы?
- 7 Запишите формулу, выражающую закон Гука. Когда он справедлив?
- 8 Что называется пределом текучести? пределом прочности?
- 9 Что является причиной появления остаточной деформации? Покажите с помощью рисунка возникновение и развитие остаточной деформации в кристалле при действии сдвигающей силы.
- 10 Какое смещение называют скольжением? Скольжение вдоль каких плоскостей и направлений является наиболее легким?
- 11 Какая плоскость является плоскостью скольжения в кубической гранецентрированной решетке? в гексагональных кристаллах? Назовите направления скольжения для этих решеток.
- 12 Какое напряжение называют критическим скалывающим напряжением? От чего зависит критическое скалывающее напряжение? Приведите в качестве примера значения критических скалывающих напряжений для некоторых

чистых металлических монокристаллов.

- 13 Какое явление получило название упрочнения или наклепа? Какой процесс называется отдыхом? рекристаллизацией? В чем отличие рекристаллизации от отдыха?
- 14 Чем определяется способность кристалла к пластической деформации?
- 15 Как ведут себя при пластической деформации кристаллы с ковалентной связью? металлической связью? ионной связью?
- 16 Что представляет собой процесс двойникования?
- 17 Какая плоскость называется плоскостью двойникования?
- 18 Приведите на рисунке схему двойникования кристалла и поясните ее.
- 19 По каким кристаллографическим плоскостям развивается двойникование в гранецентрированных кубических решетках? в гексагональных плотно упакованных кристаллах?
- 20 Что необходимо для осуществления двойникования?
- 21 У каких кристаллов незначительная деформация перед разрушением обеспечивается двойникованием?
- 22 У каких кристаллов двойникование может привести к значительной остаточной деформации путем обычного скольжения?
- 23 Опишите механизм пластического течения кристаллов путем сдвигообразования. Произведите оценку величины касательного напряжения, необходимого для производства такого сдвига.
- 24 Какое напряжение принимается за теоретическую прочность?
- 25 Почему реальная прочность кристаллов на сдвиг на 3—4 порядка меньше теоретически вычисленной прочности этих кристаллов?

2.2 Дислокации

2.2.1 Понятие о дислокациях. Основные типы дислокаций

Дислокационная теория пластического течения исходит из предположения, что процесс скольжения начинается всегда в местах нарушения структуры кристалла и распространяется по плоскости сдвига путем последовательного перемещения этого искажения, охватывающего в каждый момент лишь относительно небольшое количество атомов. Искажения такого рода называются дислокациями. Рассмотрим основные типы дислокаций.

Линейные дислокации. Пусть в кристалле К по плоскости ABCD (рисунок 2.8) произошло скольжение в направлении вектора $\vec{b}$ на участке AHED. Атомные плоскости, расположенные по обе стороны от плоскости скольжения AHED, претерпевают смещение друг относительно друга на расстояние b в направлении скольжения. Граница HE, отделяющая область AHED, в которой скольжение произошло, от области HBCE, которая не охвачена еще скольжением, представляет собой линейную дислокацию; вектор $\vec{b}$ называется **вектором сдвига**, или **вектором Бюргерса**. Он характеризует степень развития скольжения в области AHED.

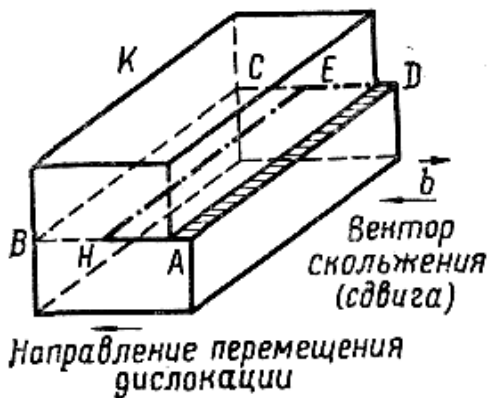


Рисунок 2.8

На рисунке 2.9 показано расположение атомов в плоскости, перпендикулярной линии дислокации. В результате сдвига, произошедшего на участке

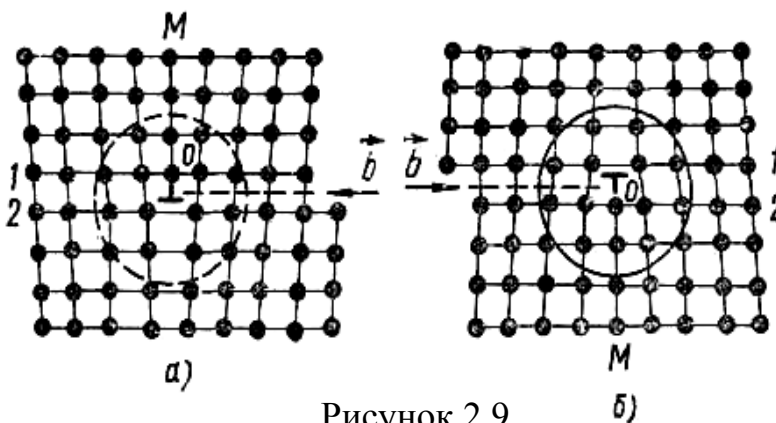


Рисунок 2.9

AHED, в верхней части решетки оказывается на одну атомную плоскость (на плоскость OM) больше, чем в нижней части решетки. Вследствие этого атомный ряд 1, лежащий над плоскостью сдвига, содержит на один атом больше, чем ряд 2, расположенный под этой плоскостью. Расстояние между атомами

верхнего ряда у точки O (центр дислокации) будет поэтому меньше нормального (решетка сжата), а расстояние между атомами нижнего ряда у точки O будет больше нормального (решетка растянута). По мере перемещения от центра дислокации вправо и влево, вверх и вниз искажение решетки постепенно уменьшается и на некотором расстоянии от O в кристалле восстанавливается нормальное расположение атомов. В направлении же, перпендикулярном плоскости

чертежа, дислокация проходит через весь кристалл или значительную его часть.

Таким образом, характерным для линейной дислокации является наличие «лишней» атомной плоскости OM в части решетки кристалла. Поэтому образование такой дислокации можно представить себе как процесс раздвигания решетки и введения в нее дополнительной плоскости. Эту плоскость называют **экстраплоскостью**. Если плоскость введена в верхнюю часть решетки, линейная дислокация считается **положительной** (рисунок 2.9 а), если же дополнительная плоскость введена в нижнюю часть решетки, дислокация считается **отрицательной** (рисунок 2.9 б). Дислокацию, у которой вектор смещения равен постоянной решетки, называют **единичной** дислокацией, или дислокацией единичной мощности. Прохождение единичной дислокации через сечение кристалла приводит к смещению одной его части относительно другой на b . Про-

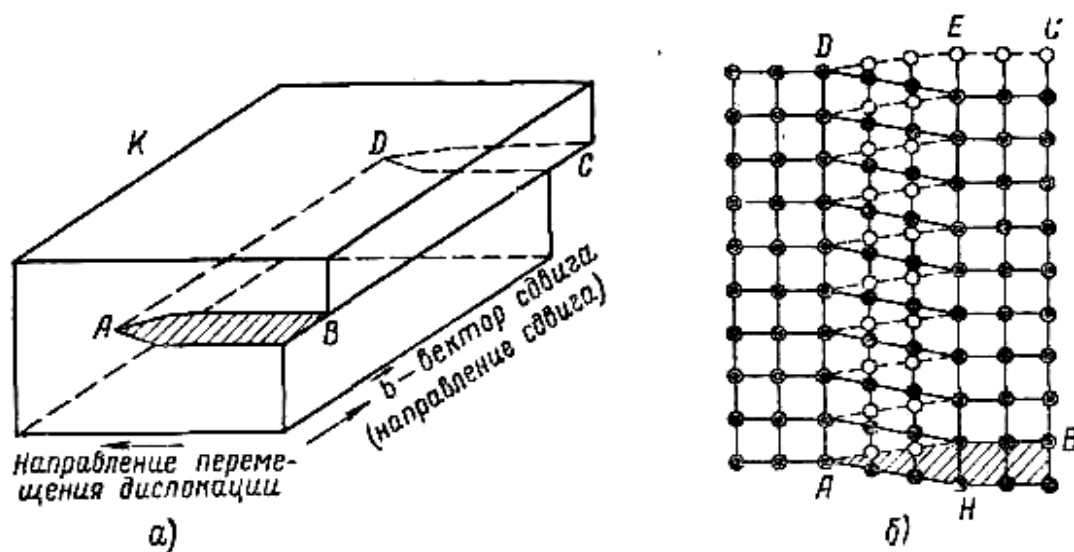


Рисунок 2.10

движение положительной дислокации влево вызывает такое же смещение частей решетки, как и прохождение отрицательной дислокации вправо (рисунок 2.9 а, б).

Винтовые дислокации. Предположим, что в кристалле К произведен незавершенный единичный сдвиг в направлении вектора $\vec{b}$ на площади ABCD, как показано на рисунке 2.10 а; AD — граница распространения сдвига.

На рисунке 2.10 б белыми кружками показаны атомы плоскости, расположенной непосредственно над плоскостью скольжения, черными кружками — атомы атомной плоскости, расположенной под плоскостью скольжения. В недеформированной части кристалла, лежащей левее границы AD, атомы этих плоскостей располагаются друг над другом, поэтому черные кружки совмещены с белыми (белый кружок с точкой в центре). В правой части кристалла, где произошел сдвиг на одно атомное расстояние, т. е. в области, лежащей правее EH, атомы рассматриваемых плоскостей располагаются также один над другим. В узкой же полоске ADEH атомы верхней плоскости смещены относительно атомов нижней плоскости и тем сильнее, чем дальше они отстоят от границы AD. Это смещение вызывает местное (локальное) искажение решетки, полу-

чившее название *винтовой дислокации*; граница AD называется *осью дислокации*.

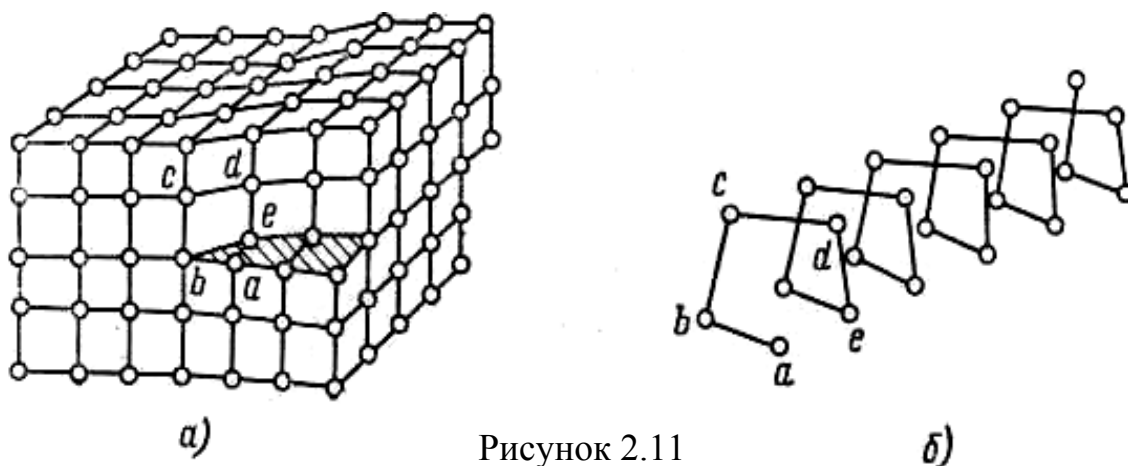


Рисунок 2.11

Происхождение названия винтовой дислокации легко понять из рисунка 2.11: перемещение от атома *a* к атомами *b, c, d, e* и т. д. (рисунок 2.11 а), лежащим в области винтовой дислокации, происходит, как видно из рисунка 2.11 б, по винтовой линии. Различают правую и левую винтовые дислокации (рисунок 2.12); перемещение их в противоположных направлениях приводит к сдвигу одного направления.

Из сравнения рисунков 2.8 и 2.10 а видно, что в то время как линейная дислокация перпендикулярна вектору сдвига $\vec{b}$, винтовая дислокация параллельна этому вектору; перемещение линейной дислокации происходит в направлении вектора сдвига $\vec{b}$, перемещение винтовой дислокации происходит в направлении, перпендикулярном этому вектору.

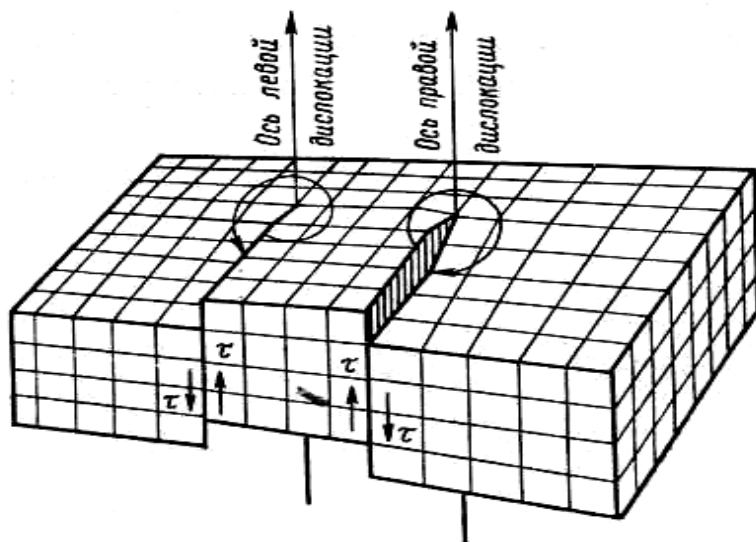


Рисунок 2.12

В настоящее время разработаны экспериментальные методы прямого наблюдения дислокаций. В качестве примера на рисунке 2.13 а показано схематическое изображение электронномикроскопического снимка тонкой пленки платинового фталоцианина, а на рисунке 2.13 б, в - электронномикроскопический снимок кристалла сульфида меди, полученный с использованием специальной методики.

Темные полосы на этих снимках представляют собой следы атомных плоскостей, которые у платинового фталоцианина располагаются на расстоянии $12 \text{ \AA}$, у сульфида меди — на расстоянии $1,88 \text{ \AA}$.

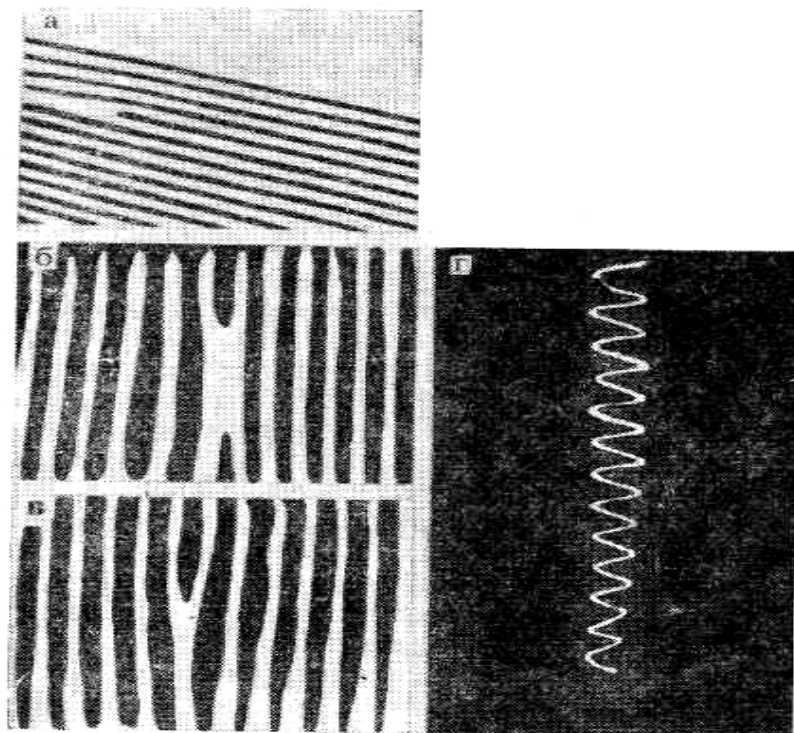


Рисунок 2.13

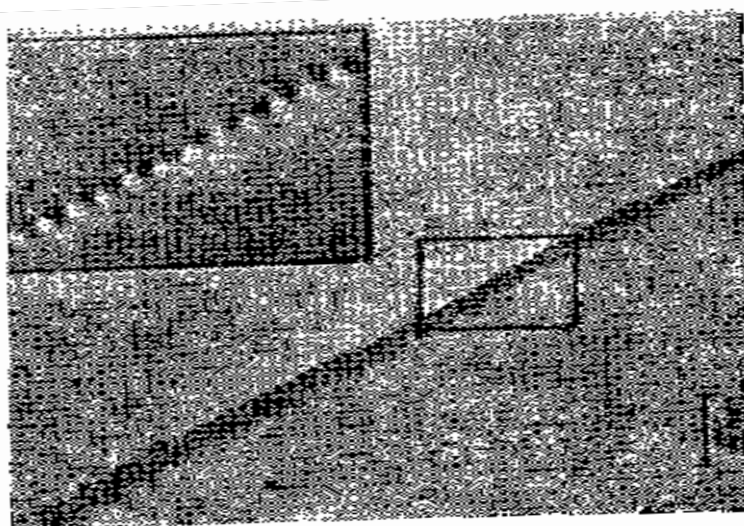


Рисунок 2.14

На снимках хорошо видны экстраплоскости, обрывающиеся внутри кристалла и образующие линейные дислокации. На рисунке 2.13 г приведена микрофотография винтовой дислокации в кристаллах CaF_2 , выявленной **методом декорирования**. Этот метод применяется для прозрачных кристаллов и состоит в осаждении вдоль ядра дислокации примесных атомов, которые делают дислокацию видимой в оптическом микроскопе. Достойно восхищения удивительно хорошее согласие этих картин с теоретическими представлениями о дислокациях, показанных на рисунках 2.9 и 2.11.

Выход дислокаций на поверхность кристалла можно установить **методом травления**. При травлении поверхности кристалла специально подобранным травителем в первую очередь протравливаются участки, в которых решетка искажена наиболее сильно, так как атомы этих участков обладают избыточной энергией и химически более активны. Такими участками являются как раз места выхода дислокаций на поверхность кристалла.

В качестве примера на рисунке 2.14 показана фотография протравленной поверхности германия. Темные пятна, располагающиеся у границы зерна, представляют собой места выхода дислокаций.

2.2.2 Силы, необходимые для перемещения дислокаций

Пусть в плоскости S возможного скольжения кристалла находится положительная дислокация с центром в точке o и границами в точках a и k (рисунок 2.15 а). В равновесном состоянии результирующая сила, действующая на эту дислокацию со стороны решетки, равна нулю. Это легко понять из *роликовой*

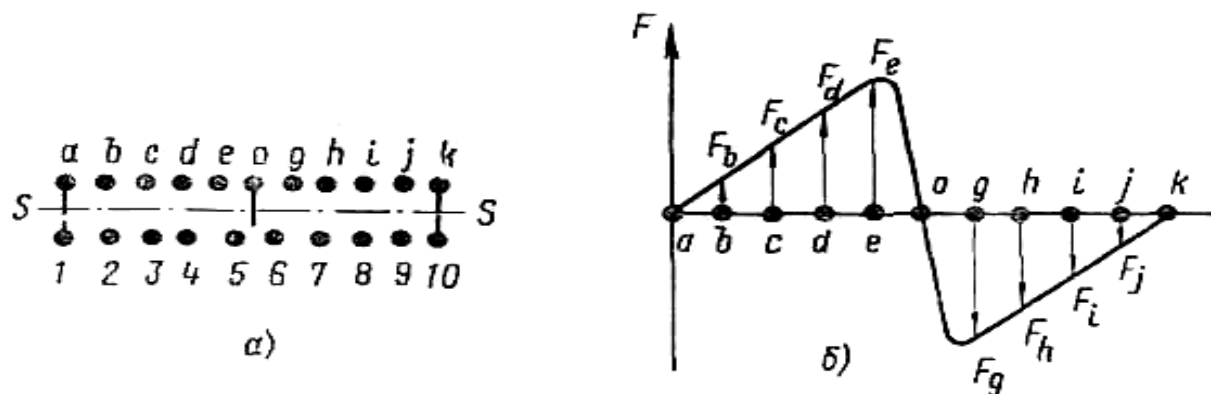


Рисунок 2.15

модели, показанной на рисунке 2.16. В верхнем ряду роликов, располагающихся нормально во впадинах нижнего ряда, произведено «нарушение структуры»: на участке АВ, который раньше занимался 6 роликами, размещено только 5.

Такое нарушение приводит к возникновению сил, стремящихся вернуть ролики 1, 2, 4, 5 в устойчивое положение равновесия (силы $\vec{F}_1, \vec{F}_2, \vec{F}_4, \vec{F}_5$). Силы, приложенные к роликам 1, 5 и 2, 4, равны по величине и направлены в противоположные стороны. Поэтому если ролики верхнего ряда соединены между собой упругой пружиной, играющей роль связи, то силы $\vec{F}_1$ и $\vec{F}_5$, $\vec{F}_2$ и $\vec{F}_4$ компенсируют друг друга, и система будет находиться в равновесии.

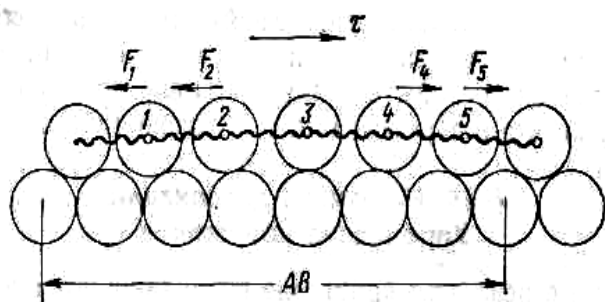


Рисунок 2.16

дислокация находится в равновесии. Однако при небольшом смещении дислокации в плоскости скольжения симметрия в расположении атомов относительно центра дислокации нарушается (ролики 1-5 на рисунке 1.16 сместились из впадин), вследствие чего появляется сила, препятствующая движению дислокации. Из рисунка 2.16 видно, что эта сила не может быть большой, так как перемещение роликов 1 и 2 в новое положение равновесия происходит в значи-

тельной мере под влиянием сил, действующих со стороны роликов 4 и 5, также стремящихся занять положение устойчивого равновесия. Расчет показывает, что **касательное напряжение**, необходимое для того, чтобы сдвинуть дислокацию, равно

$$\tau_0 = \frac{2G}{1-\nu} e^{\frac{2\pi b}{d(1-\nu)}} \quad (2.17)$$

где G — модуль сдвига, ν — коэффициент Пуассона, b — расстояние между атомами в направлении сдвига, d — расстояние между соседними плоскостями скольжения. Напряжение τ_0 представляет собой теоретическое значение критического скалывающего напряжения.

Полагая $b = d$ и $\nu = 0,3$, получим $\tau_0 = 3 \cdot 10^{-4} G$. Это по порядку величины совпадает с опытными значениями τ_K .

Таким образом, теория дислокаций устраняет противоречие между теоретическим и практическим значениями прочности кристаллов на сдвиг.

2.2.3 Источники дислокаций. Упрочнение кристаллов

Дислокации в **реальном кристалле** возникают в процессе его роста из расплава или раствора. На рисунке 2.17 а показаны границы двух блоков, растущих навстречу друг другу. Блоки повернуты друг относительно друга на небольшой угол φ . При срастании блоков ряд атомных плоскостей не проходит

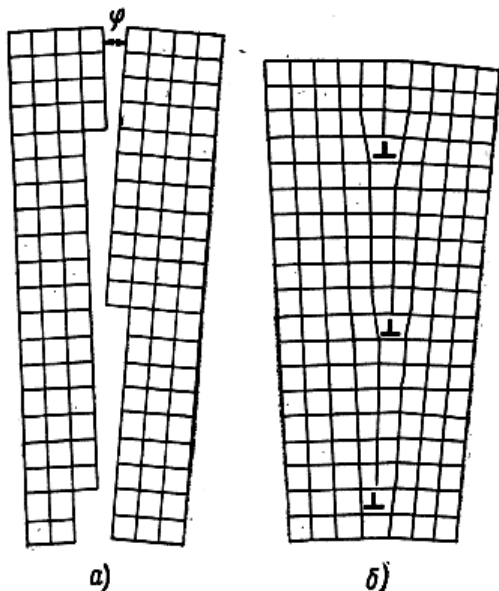


Рисунок 2.17

через весь кристалл и заканчивается на границах блоков. В этих местах и возникают дислокации (рисунок 2.17 б). Такая же картина наблюдается и при срастании различных ориентированных зерен в **поликристаллическом** образце. Вследствие того, что в реальных твердых телах протяженность границ блоков и зерен исключительно велика, количество дислокаций в них громадно. Подсчет показывает, что в хорошо отожженных металлах плотность дислокаций составляет $10^{11} — 10^{12} \text{ м}^{-2}$. После холодной обработки (прокатки, волочения и т. п.) плотность дислокаций увеличивается до $10^{15} — 10^{16} \text{ м}^{-2}$. В этих дислокациях концентрируется почти вся энергия, поглощенная металлом при пластическом деформировании.

Источником дислокаций в **недеформированном** кристалле могут служить также скопления вакансий. На рисунке 2.18 показан пример образования положительной и отрицательной дислокаций из скопления вакансий.

Сдвигообразование в кристалле, развивающееся под действием внешней силы, представляет собой движение дислокаций по плоскостям скольжения и выход их на поверхность кристалла. Если бы сдвигообразование происходило только за счет выхода дислокаций, уже имеющихся в кристалле, то процесс пластического деформирования приводил бы к истощению дислокаций и переводу кристалла в более совершенное состояние. Это противоречит опыту, который показывает, что с ростом степени деформации искажение решетки не уменьшается, а, наоборот, растет, следовательно, увеличивается и плотность дислокаций. Поэтому в настоящее время принято считать, что дислокации, обуславливающие пластическую деформацию, *генерируются* в процессе самого сдвигообразования под действием внешней силы, приложенной к кристаллу. Механизм такого генерирования был открыт в 1950 г. Франком и Ридом.

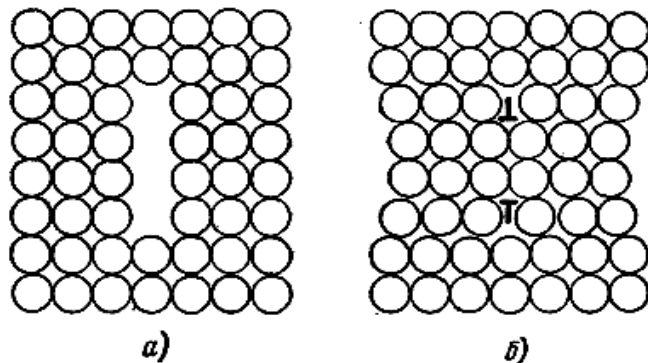


Рисунок 2.18

Для пояснения этого механизма рассмотрим процесс образования мыльных пузырей с помощью трубки (рисунок 2.19). При смачивании конца трубки мыльным раствором образуется плоская пленка, закрывающая отверстие.

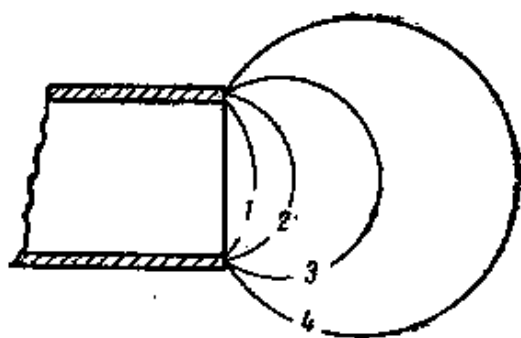


Рисунок 2.19

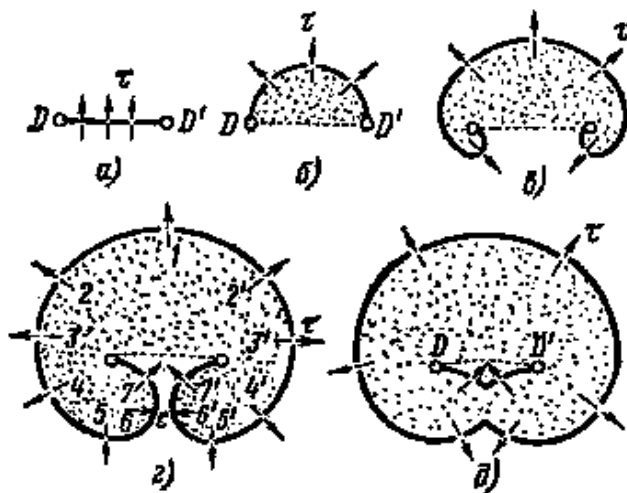


Рисунок 2.20

При постепенном повышении давления воздуха в трубке пленка выпучивается, проходя стадии 1, 2, 3, 4 и т. д. До тех пор пока она не примет форму полусферы (стадии 3), ее состояние является неустойчивым: с уменьшением давления пленка сокращается, стремясь к первоначальному состоянию 1. После прохождения стадии 3 состояние пузыря меняется: он может развиваться не только при постоянном, но и при постепенно уменьшающемся давлении до тех пор, пока не отделится от конца трубки. Вслед за первым пузырем начинает формиро-

ваться второй, за ним — третий и т. д.

Теперь рассмотрим действие *источника Франка — Риды*. На рисунке 2.20 а показана линейная дислокация DD' , расположенная в плоскости скольжения; точки D и D' закреплены неподвижно и в перемещении дислокации не участвуют. Такое закрепление может произойти в местах пересечения данной дислокации с другими дислокациями, на примесных атомах и т. д. Под действием внешнего напряжения дислокация начинает выгибаться подобно мыльной пленке и в какой-то момент времени принимает форму полуокружности (рисунок 2.20 б). Как и в случае мыльных пузырей, выгибание дислокации может происходить лишь при непрерывно растущем напряжении τ , которое достигает максимального значения в момент, когда дислокация принимает форму полуокружности. Дальнейшее ее развитие происходит самопроизвольно путем образования двух спиралей (рисунок 2.20 в), которые после встречи в точке C (рисунок 2.20 г) приводят к разделению дислокации на две: на внешнюю, замыкающуюся в виде наружной окружности (рисунок 2.20 д), и на внутреннюю, приходящую в первоначальное положение DD' . Наружная дислокация разрастается до внешней поверхности кристалла и приводит к элементарному сдвигу; внутренняя, заняв исходное положение DD' , под действием напряжения τ начинает снова выгибаться и разрастаться, как описано выше. Такой процесс может повторяться какое угодно число раз, обеспечивая появление на данной плоскости скольжения заметного смещения одной части кристалла относительно другой.

Низкая прочность кристалла на сдвиг обусловлена наличием в нем уже готовых дислокаций и генерированием их в процессе сдвигообразования. С другой стороны, известно, что по мере развития пластической деформации и роста количества дефектов кристалл упрочняется. Сущность такого упрочнения состоит во взаимодействии дислокаций друг с другом и с различного рода дефектами решетки, приводящем к затруднению перемещения их в решетке.

Взаимодействие дислокаций. Каждая дислокация, вызывая упругое искажение решетки, создает вокруг себя силовое поле, характеризующееся в каждой точке определенными касательным τ и нормальным σ напряжениями. При попадании в это поле другой дислокации возникают силы, стремящиеся или сблизить, или оттолкнуть дислокации друг от друга. Одноименные дислокации, расположенные в одной и той же плоскости, отталкиваются друг от друга, разноименные — притягиваются друг к другу. Поэтому по мере накопления дислокаций в данной плоскости скольжения сопротивление сдвигу непрерывно растет и кристалл упрочняется.

Преодоление препятствий. Предположим, что дислокация, перемещающаяся в плоскости скольжения под действием касательных напряжений τ , встречает на своем пути неподвижное препятствие D . Таким препятствием могут быть пересечение дислокации с другой дислокацией, атом примеси и другие дефекты. На рисунке 2.21 показана теоретическая схема преодоления препятствия D дислокацией AB : при приближении к D (положения 1, 2, 3) дислокация постепенно искривляется и образует петлю, огибающую препятствие; за препятствием петля замыкается и дислокация $A'B'$ снова становится прямо-

линейной. На рисунке 2.22 приведена фотография реальной картины, которая возникает при встрече дислокации с неподвижным препятствием (темные линии изображают дислокации, выявленные травлением). Сходство картин не оставляет никаких сомнений в правильности теоретической схемы показанной на рисунке 2.21.

Огибание дислокацией препятствия связано с ее удлинением и резким усилением искажения решетки, требующим затраты дополнительной работы. Поэтому на участке преодоления дефекта дислокация испытывает значительно большее сопротивление перемещению, чем в неискаженных областях решетки. В этом и состоит сущность **упрочнения** кристалла при возникновении в нем дефектов. Так как с ростом степени пластического деформирования число дислокаций в кристалле увеличивается, то возрастает и число препятствий, возникающих в местах пересечения дислокаций. Поэтому рост степени деформации сопровождается упрочнением кристалла.

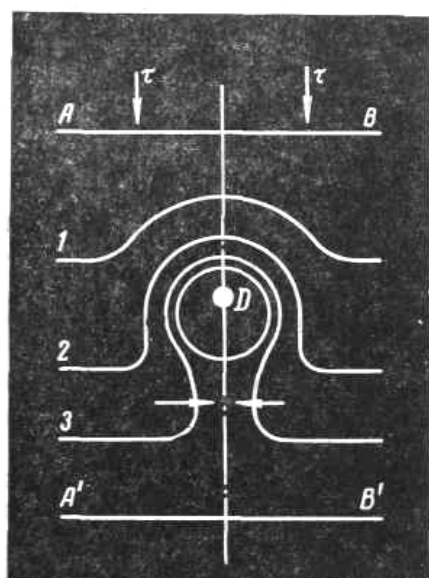


Рисунок 2.21

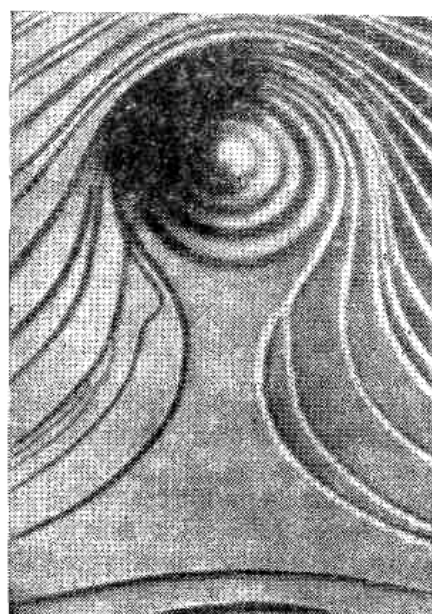


Рисунок 2.22

Подобное же действие оказывают и **атомы примесей**: вызывая местные искажения решетки, они затрудняют перемещение дислокаций и тем самым приводят к росту сопротивления кристалла сдвигу. Особенно сильное тормозящее действие оказывают границы блоков, границы зерен и обособленные включения, содержащиеся в решетке. Они резко увеличивают сопротивление перемещению дислокаций и для своего преодоления требуют более высоких напряжений. Явление упрочнения при холодном деформировании (наклеп), при введении примесных атомов (легирование) и при формировании в сплавах обособленных включений (закалка, старение и т. п.) находит широкое практическое применение, позволяя улучшить механические свойства машиностроительных материалов.

2.2.4 Контрольные вопросы к разделу 2.2

- 1 Что представляет собой линейная дислокация?
- 2 Что называется вектором сдвига, или вектором Бюргерса? Что он характеризует? Какую плоскость называют экстраплоскостью?
- 3 Представьте на рисунке схему образования линейной дислокации.
- 4 В каком случае линейная дислокация считается положительной? отрицательной? единичной?
- 5 Что представляет собой винтовая дислокация? Что называется осью дислокации?
- 6 Представьте на рисунке схему образования винтовой дислокации.
- 7 Какая дислокация перпендикулярна вектору сдвига? параллельна этому вектору?
- 8 Перемещение какой дислокации происходит в направлении вектора сдвига $\vec{b}$? в направлении, перпендикулярном этому вектору?
- 9 Где применяется и в чем состоит сущность метода декорирования? метода травления?
- 10 Что представляет собой роликовая модель?
- 11 Чему равно касательное напряжение, необходимое для того, чтобы сдвинуть дислокацию?
- 12 В результате чего возникают дислокации в реальном кристалле? в поликристаллическом образце?
- 13 Что является источником дислокаций в недеформированном кристалле?
- 14 Рассмотрите действие источника Франка — Рида.
- 15 Чем обусловлена низкая прочность кристалла на сдвиг?
- 16 Почему по мере развития пластической деформации кристалл упрочняется? В чем состоит сущность такого упрочнения?
- 17 Покажите с помощью рисунка схему преодоления препятствия дислокацией.
- 18 Почему атомы примесей приводят к росту сопротивления кристалла сдвигу?

2.3 Прочность твердых тел

2.3.1 Теоретическая прочность твердых тел

У твердых тел наблюдается два основных типа разрушения: хрупкое и пластическое, или вязкое.

Хрупкое разрушение происходит в том случае, если предел прочности материала оказывается ниже предела упругости. Такой материал перед разрушением испытывает лишь упругую деформацию. Никаких необратимых изменений в таком материале при разрушении не происходит.

У пластичных материалов предел упругости ниже не только предела прочности, но и предела текучести. Поэтому процессу разрушения предшествует значительная пластическая деформация, подготовляющая этот процесс. Прочность при этом существенно зависит от времени действия разрушающего усилия, являясь типичной кинетической величиной.

Рассмотрим сначала хрупкую прочность твердых тел. Делались многочисленные попытки вычислить прочность твердых тел, исходя из сил молекулярного взаимодействия в них. Определенную таким образом прочность σ_0 называют **теоретической**.

Познакомимся с некоторыми методами оценки теоретической прочности σ_0 .

1) Метод Поляни. Простейший метод оценки теоретической прочности твердых тел был предложен Поляни. Сущность этого метода состоит в следующем.

Пусть к стержню сечением 1 м^2 приложено растягивающее напряжение σ (рисунок 2.23). Под действием этого напряжения расстояние между атомными плоскостями увеличивается. Предполагается, что для осуществления разрыва необходимо приложить такое напряжение σ_0 , которое способно увеличить расстояние между атомными плоскостями на величину порядка параметра решетки a . **Работа**, которая потребуется для удаления одной атомной плоскости от другой на расстояние a , принимается равной $\sigma_0 a$. Далее считается, что эта работа переходит в **свободную энергию** двух вновь образующихся при разрыве поверхностей общей площадью 2 м^2 , т. е. равна 2α , где α — поверхностная энергия («поверхностное напряжение») твердого тела. Таким образом,

$$\sigma_0 a = 2\alpha$$

Отсюда находится теоретическая прочность σ_0 :

$$\sigma_0 = 2\alpha / a \quad (2.18)$$

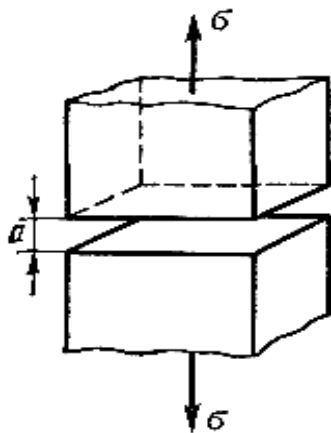


Рисунок 2.23

Для меди $\alpha \approx 1,7 \text{ Дж/м}^2$; $a = 3,6 \cdot 10^{-10} \text{ м}$ и $\sigma_0 \approx 1 \cdot 10^{10} \text{ Па}$; для серебра $\alpha \approx 1,14 \text{ Дж/м}^2$; $a = 4 \cdot 10^{-10} \text{ м}$ и $\sigma_0 \approx 0,6 \cdot 10^{10} \text{ Па}$.

2) Определение σ_0 по теплоте сублимации. Для испарения моля твердого тела требуется энергия, равная теплоте сублимации Q_c . Для испарения одного молекулярного слоя с площади 1 м^2 требуется энергия W , во столько раз меньшая Q_c , во сколько раз масса этого слоя m меньше массы моля M :

$$W = Q_c m / M.$$

$$\text{Но } m = N\mu, \quad M = N_A\mu,$$

где μ — масса молекулы,

$N_A = 6,06 \cdot 10^{23} \text{ моль}^{-1}$ — постоянная Авогадро,

N_s — число молекул на 1 м^2 поверхности твердого тела.

При межмолекулярном расстоянии, равном a , площадь, приходящаяся на одну молекулу, равна $\approx a^2$, число молекул на 1 м^2

$$N_s \approx \frac{1}{a^2}. \text{ Поэтому}$$

$$W = Q_c \frac{N_s}{N_A} \approx \frac{Q_c}{N_A a^2}.$$

Если предположить, что испаряющиеся молекулы теряют связь с поверхностью твердого тела при удалении от нее на расстояние порядка параметра решетки a , то усилие, которое потребовалось бы для одновременного удаления всего слоя от поверхности на это расстояние, равнялось бы

$$\sigma_0 \approx \frac{W}{a} \approx \frac{Q_c}{N_A} \frac{1}{a^3}. \quad (2.19)$$

Усилие σ_0 и принимается за теоретическую прочность тела. Для меди $Q_c = 3 \cdot 10^5 \text{ Дж/моль}$; $a = 3,6 \cdot 10^{-10} \text{ м}$ и $\sigma_0 \approx 10^{10} \text{ Па}$. Аналогичные вычисления дают: для железа $\sigma_0 \approx 2,3 \cdot 10^{10} \text{ Па}$; для алюминия $\sigma_0 \approx 0,6 \cdot 10^{10} \text{ Па}$; для серебра $\sigma_0 \approx 0,6 \cdot 10^{10} \text{ Па}$.

3) Вычисление σ_0 из сил молекулярного взаимодействия. Рассмотрим, наконец, схему расчета теоретической прочности твердых тел из сил молекулярного взаимодействия. На рисунке 2.24 показана кривая изменения потенциальной энергии $U(x)$ и силы взаимодействия $f(x)$ между частицами твердого тела с изменением расстояния между ними. Так как установить точный закон изменения $f(x)$ трудно, то эту кривую аппроксимируют различными функциями. В частности, Поляни и Орован аппроксимировали ее половиной синусоиды ви-

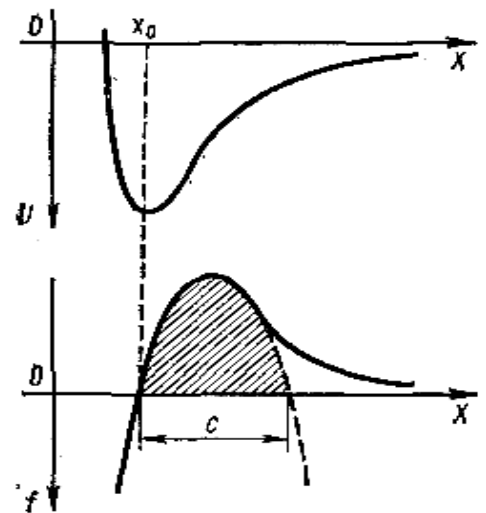


Рисунок 2.24

да
$$f(x) = f_M \sin \frac{2\pi x}{c} \quad (2.20)$$

При медленном разъединении тела на две части по сечению 1 м^2 требуется усилие $\sigma = fN_s$, где N_s - число частиц на 1 м^2 поперечного сечения. Подставляя сюда f из (2.20), находим

$$\sigma = \sigma_0 \sin \frac{2\pi x}{c} \quad (2.21)$$

где $\sigma_0 = f_M N_s$ представляет собой теоретическую прочность на отрыв. При небольших смещениях x соотношение (2.21) можно переписать так:

$$\sigma = \sigma_0 2\pi x / c$$

с другой стороны, при небольших смещениях выполняется закон Гука

$$\sigma = Ex / c$$

Приравнивая правые части этих соотношений, получим

$$\sigma_0 \approx \frac{E}{2\pi} \approx 0,1E \quad (2.22)$$

Более точная оценка характера сил связи в твердых телах приводит, как показали расчеты, лишь к незначительному исправлению соотношения (2.22). В таблице 2.5 приведены модуль упругости E и теоретическая прочность σ_0 , вычисленная по формуле (2.22) для ряда технических материалов.

Таблица 2.5

Вещество	Модуль упругости $E, 10^7 \text{ Па}$	Теоретическая прочность $\sigma_0 \approx 0,1 E,$ 10^7 Па	Техническая прочность $\sigma_p, 10^7 \text{ Па}$	Отношение σ_0 / σ_p
Алюминий	6000	600	9,0	65
Серебро	8000	800	18,0	45
Медь	12000	1200	23	50
Железо	21000	2100	30	70
Стекло	8000	800	8,0	100
Каменная соль	4000	400	0,5	800

Сравнение теоретической прочности σ_0 , вычисленной тремя различными методами, показывает, что все они приводят примерно к одним и тем же значениям, по порядку величины равным $0,1 E$. Поэтому правомочно принять

$$\sigma_0 \approx 0,1E \quad (2.23)$$

Это огромная величина, по порядку равная $10^9 — 10^{10}$ Па.

2.3.2 Реальная (техническая) прочность твердых тел.

Прочность реальных кристаллов и твердых тел, используемых в технике, называют **реальной**, или **технической**, прочностью σ_p . В качестве примера в таблице 2.5 приведены модуль упругости E , теоретическая прочность $\sigma_0 \approx 0,1E$, техническая прочность σ_p и отношение σ_0 / σ_p для ряда материалов.

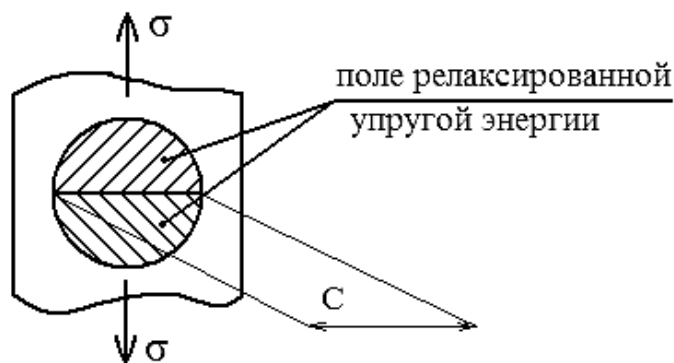


Рисунок 2.25

Из данных таблицы 2.5 видно, что техническая прочность σ_p твердых тел на 2 - 3 порядка ниже их теоретической прочности σ_0 .

Долгое время было принято считать, что такое различие между σ_p и σ_0 объясняется наличием в реальных твердых телах всевозможного рода дефектов, в частности **микротрещин**, снижающих прочность тел. Впервые такая точка зре-

ния была высказана английским физиком Гриффитсом (1921г); ему принадлежит и метод расчета технической прочности материала.

Рассмотрим схему этого расчета. Возьмем образец в форме тонкой пластины и приложим к нему растягивающее напряжение σ . На рисунке 2.25 приведена схема сквозной трещины длиной C в теле под действием растягивающих напряжений σ . Плотность упругой энергии в таком упруго растянутом образце равна $\sigma^2 / (2E)$.

В самом деле, под действием напряжения σ образец испытывает **относительную деформацию** $\varepsilon = \sigma / E$; **абсолютная деформация** $\Delta L = \varepsilon L = \sigma L / E$ (L — длина образца). **Работа**, которую совершают напряжения σ , растягивая образец на величину ΔL , равна $\frac{1}{2} \sigma S \Delta L = \frac{\sigma^2}{2E} SL = \frac{\sigma^2}{2E} V$ (S — площадь поперечного сечения образца, V — его объем). Эта работа переходит в **упругую энергию** образца, имеющего объем V . Поэтому в сплошном теле, упруго нагруженном, накоплена энергия (**объемная плотность упругой энергии**) $\sigma^2 / (2E)$.

Теперь представим себе, что в образце образовалась поперечная ми-

кратрещина длиной C , простирающаяся на всю толщину образца h . С появлением трещины образец в объеме $V = C^2 h$ разгружается от упругих напряжений и его упругая энергия уменьшается: $W_1 \approx C^2 h \sigma^2 / (2E)$. Если принять, что трещина имеет ширину, равную единице $h = 1$ и площадь равную $\pi C^2 / 4$, то

$$W_1 = -\frac{\pi C^2 \sigma^2}{8E}, \text{ Дж} \quad (2.24)$$

С другой стороны, появление трещины приводит к образованию внутри образца *свободной поверхности* $S \approx 2Ch$ и к увеличению энергии образца на $\Delta W_1 \approx 2Ch\gamma$ (γ — *свободная поверхностная энергия* образца, Дж/м²).

$$W_2 = 2\gamma C \quad (2.25)$$

Общее изменение энергии образца ΔW , связанное с возникновением в нем трещины, будет равно

$$\Delta W = 2\gamma C - \frac{\pi C^2 \sigma^2}{8E} \quad (2.26)$$

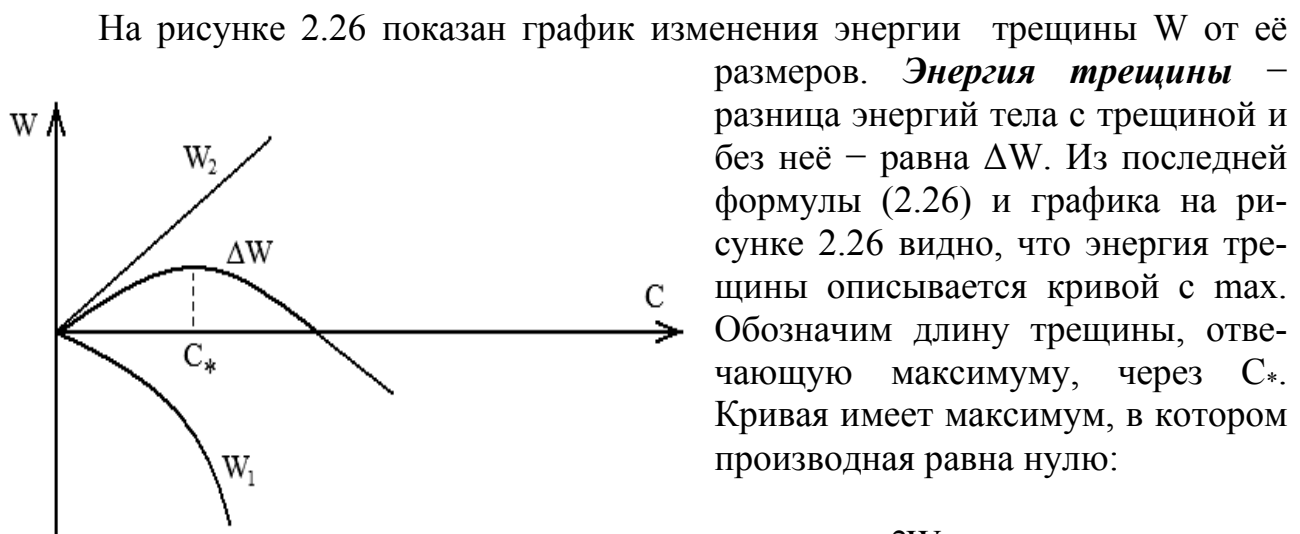


Рисунок 2.26

$$\frac{\partial W}{\partial C} = 0, \quad \text{что даёт}$$

$$-\frac{\sigma^2 \pi C_*}{4E} + 2\gamma = 0,$$

откуда

$$C_* = C_{\text{Гриф}} = \frac{8\gamma E}{\pi \sigma^2} = \delta \left(\frac{\gamma E}{\sigma^2} \right) \quad (2.27)$$

Здесь δ - постоянный коэффициент, который зависит от формы и положения трещины, то есть от геометрии задачи.

Формула (2.27) и рисунок 2.26 означают, что при условии $C^* = C_{\text{Гриф}}$ упругой энергии ($\sim C^2$) релаксирует больше, чем уходит на образование новых поверхностей ($\sim C$), следовательно, трещина спонтанно **саморазгоняется**. При $C > C^*$ рост трещины энергетически выгоден, т. к. удлинение щели вызывает уменьшение энергии образца, поэтому происходит самопроизвольно, приводя к хрупкому его разрушению. При $C < C^*$, пока размер трещины остается меньше критического, ее развитие под действием напряжения энергетически не выгодно. Выгодно **захлопывание** трещины.

По формуле (2.27) можно оценить **внешнее критическое напряжение**, при котором рост трещины энергетически выгоден

$$\sigma_* = \sigma_{\text{Гриф}} = \sqrt{\frac{\delta \gamma E}{C_*}} = \sqrt{\frac{8 \gamma E}{\pi C_*}} \quad (2.28)$$

Таким образом, **реальную прочность** твердых тел, имеющих микротрещины, следует вычислять по Гриффитсу из соотношения (2.28). Расчетные значения длины трещины C показали, что для того чтобы прочность твердых тел понизилась от теоретического значения до значения технической прочности, необходимо, чтобы к моменту разрушения в них сформировались микротрещины **размером порядка единиц микрон**.

Источником таких трещин могут быть многие факторы. Трещины могут

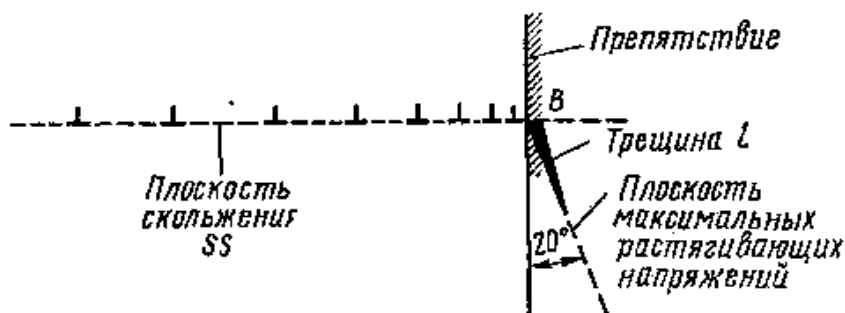


Рисунок 2.27

возникать в процессе получения твердого тела и, особенно при его механической обработке. Об этом свидетельствует, в частности, резкая зависимость прочности от размера образца, особенно в области малых размеров. Так, у стеклянной нити диаметром $\approx 2,5$ мкм прочность

почти в 100 раз больше, чем у массивных образцов. Объясняется это тем, что с уменьшением размера образца уменьшается вероятность появления в нем большой трещины, приводящей к низкой прочности. Такая зависимость прочности от размера образцов получила название **масштабного фактора**. Трещины могут возникать в результате слияния большого числа вакансий.

На рисунке 2.27 показан дислокационный механизм возникновения трещин. Дислокации одного знака, перемещаясь по плоскости скольжения SS и встречая на своем пути препятствие B, начинают скапливаться у этого препят-

ствия. У головы такого скопления могут развиваться высокие напряжения, способные вызвать появление трещины С.

Отметим, что изложенные выше рассуждения справедливы для очень острой трещины в **хрупком** материале (например, в стекле) при отсутствии пластической деформации.

Критерий Гриффитса – **термодинамический (энергетический)** критерий разрушения. Согласно же **силовому** критерию условие безактивационного разрыва требует, чтобы локальное максимальное напряжение у вершины трещины (или в месте её зарождения) было сравнимо с теоретической прочностью материала.

$$\sigma_{\max} = \sigma_{\text{теор}} \quad (2.29)$$

Когда критерий Гриффитса удовлетворяет силовому критерию? Решение упругой задачи о концентрации напряжения на кончике длиной „С” с радиусом вершины трещины ρ имеет вид:

$$\sigma_{\max} = \beta \sigma \sqrt{\frac{C}{\rho}} \quad (2.30)$$

где $\beta \approx 1$ – геометрический параметр. Используем выражение для трещины Гриффитса (2.27), получим

$$\sigma_{\max} = \delta^{0,5} \beta \sqrt{\frac{\gamma \cdot E}{\rho}} \quad (2.31)$$

Учтём тот факт, что поверхностная энергия

$$\gamma \approx \sigma_{\text{теор}} \cdot a \approx \frac{E \cdot a}{10} \approx \frac{G \cdot a}{8} \quad (2.32)$$

где G и E – модули сдвига и Юнга соответственно, a – постоянная кристаллической решётки, Тогда

$$\sigma_{\max} \approx \frac{\delta^{0,5} \beta \cdot E}{3} \sqrt{\frac{a}{\rho}} \quad \text{или} \quad \sigma_{\max} \approx \sigma_{\text{теор}} \sqrt{\frac{a}{\rho}} \quad (2.33)$$

Последний результат очень важен. Только при условии $\rho \approx a$ критерий Гриффитса удовлетворяет силовому критерию безактивационного разрушения. Тогда трещина идеально острая, радиус вершины равен постоянной кристаллической решётки.

Если $\rho \gg a$, то $\sigma_{\max} \ll \sigma_{\text{теор}}$ и безактивационный рост трещины невоз-

можен.

Силовой критерий – критерий механической неустойчивости. Разрыв связей происходит со скоростью звука. Энергетический критерий связан с существованием потенциального барьера, это критерий термической неустойчивости и является основным в кинетической термофлуктуационной концепции академика С. Н. Журкова *длительной* прочности твёрдых тел.

В металле разрыв – коллективный процесс перестройки атомов. Энергия активации разрыва $U_{\text{актив}} \sim n E_{\text{связи}} \approx 20(1 \div 5) \text{эВ} \approx (20 \div 100) \text{эВ}$. Такая тепловая флуктуация невозможна.

2.3.3 Временная прочность твердых тел

Рассмотренная теория прочности, исходящая из условия (2.28), описывает, по существу, конечную стадию разрушения, на которой в теле уже возникли трещины, способные привести к хрупкому разрыву.

Однако не менее важными являются начальные стадии развития процесса разрушения, на которых происходят зарождение и рост трещин до критических размеров S_* . Этот процесс протекает более или менее постепенно и для своего завершения требует определенного времени τ . Время τ , необходимое для развития процесса разрушения от момента нагружения тела до момента его разрыва, называется *временной прочностью*, или *долговечностью материала*.

Первые систематические опыты по исследованию временной прочности были проведены С. Н. Журковым и Г. М. Бартеневым с сотрудниками. Им же принадлежит и развитие современных представлений о физической природе временной прочности.

Экспериментально было установлено, что долговечность тела τ , растягивающее напряжение σ и абсолютная температура тела T связаны следующим соотношением:

$$\tau = \tau_0 e^{\frac{U_0 - \gamma\sigma}{kT}}, \quad (2.34)$$

где τ_0 , U_0 и γ — постоянные величины, зависящие от природы и структуры тела.

При $T = \text{const}$ формулу (2.34) можно переписать так:

$$\tau = A e^{-\beta\sigma} \quad (2.35)$$

$$\text{где } A = \tau_0 \cdot e^{\frac{U_0}{kT}}, \quad \beta = \frac{\gamma}{kT}.$$

Формулы (2.34) и (2.35) проверялись на большом числе разнообразных материалов (металлы, стекла, полимеры, галоидные соединения и т. д.) при из-

менении τ на 8—10 порядков и изменении абсолютной температуры T в широких пределах. В качестве примера на рисунке 2.28 приведены в координатах $\lg \tau$, σ зависимость долговечности τ алюминия (1), органического стекла (2) и хлористого серебра (3) от приложенного напряжения σ для нескольких температур. Из рисунка 2.28 видно, что в полулогарифмических координатах зависимость $\tau(\sigma)$ хорошо описывается прямой линией. Совокупность таких прямых, полученных для данного материала при различных температурах, образует веер, исходящий из одной точки; эту точку называют **полюсом**. Из уравнения (2.34) следует, что τ не будет зависеть от T и прямые $\lg \tau(\sigma)$, снятые при разных температурах, сойдутся в одной точке (полюсе) только в том случае, если $U_0 - \gamma\sigma = 0$; но тогда $\lg \tau = \lg \tau_0$. Следовательно, полюс располагается под осью абсцисс на расстоянии, равном $\lg \tau_0$.

Из рисунка 2.28 видно, что для исследованных материалов полюсы размещаются практически на одной прямой, параллельной оси абсцисс. Это означает, что τ_0 у всех материалов приблизительно одинаково. Как показали опыты, оно равно примерно 10^{-12} - 10^{-13} с, т.е. близко к периоду тепловых колебаний атомов в твердых телах.

Прологарифмируем (2.34):

$$\lg \tau = \lg \tau_0 + \frac{U_0 - \gamma\sigma}{kT} = \lg \tau_0 + \frac{U}{kT},$$

$$U = U_0 - \gamma\sigma. \quad (2.36')$$

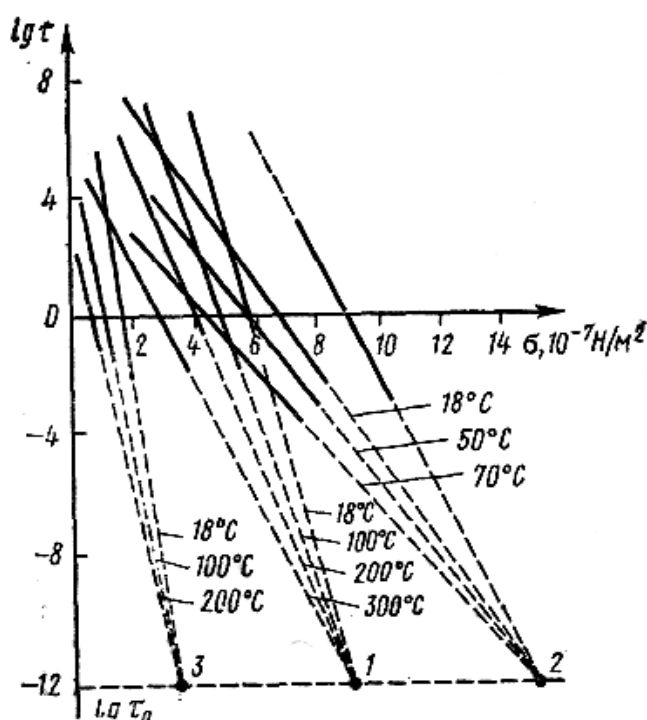


Рисунок 2.28

Строя зависимость $\lg \tau$ от $1/T$ для данного σ , можно экспериментально определить U при различных напряжениях σ ; U имеет размерность энергии и называется **энергией активации процесса разрушения**.

Тщательные опыты, проведенные С. Н. Журковым с сотрудниками и другими исследователями на разнообразных материалах, показали, что для металлов U_0 хорошо совпадает с энергией сублимации Q_c , а для полимеров — с энергией термической де-

струкции Q_d .

В качестве примера в таблице 2.6 приведены для ряда материалов U_0 , Q_c и Q_d . Как видно, U_0 с большой степенью точности совпадает с Q_c или Q_d .

Универсальность полученных закономерностей позволяет заключить, что процесс разрушения твердого тела имеет кинетический характер (т. е. протека-

ет во времени) и природа его для всех тел одинакова. **Физический механизм** этого процесса представляется в настоящее время следующим образом.

Атомы твердого тела совершают тепловые колебания с периодами $\tau_0 \approx 10^{-12} - 10^{-13}$ с. Под действием тепловых флуктуаций время от времени происходит разрыв химических связей. Вероятность этого процесса зависит от высоты активационного барьера разрушения U и температуры T , увеличиваясь с повышением T и уменьшением U . В отсутствие внешнего напряжения σ энергия, необходимая для разрыва связи, равна, очевидно, энергии самой связи. Поэтому высота активационного барьера U_0 , полученная из опытов по механическому разрушению твердых тел, оказалась равной теплоте сублимации для металлов и энергии термической деструкции для полимеров.

Напряжение σ , созданное в теле, уменьшает высоту активационного барьера процесса разрыва связей с U_0 до $U_0 - \gamma\sigma$ и тем самым увеличивает вероятность разрыва этих связей, а следовательно, и число их в единице объема.

Образование субмикроскопических областей с разорванными связями и их слияние друг с другом приводят, в конце концов, к зарождению и развитию трещин. Когда эти трещины достигают критического размера, тело под действием приложенного напряжения разрушается.

Таблица 2.6

Вещество	Энергия активации процесса разрушения $U_0, 10^{-5}$ Дж / моль	Энергия сублимации $Q_c, 10^{-5}$ Дж / моль	Энергия термической деструкции $Q_d, 10^{-5}$ Дж / моль
Алюминий	2,16	2,2	-
Цинк	1,0	1,08	-
Серебро	2,56	2,72	-
Никель	3,48	3,4	-
Платина	4,8	5,1	-
Полиметилметакрилат	2,16	-	2,1-2,2
Капрон	1,8	-	1,72
Поливинилхлорид	1,4	-	1,28
Тефлон	3,0	-	3,0-3,1

Чем выше σ , тем сильнее понижается активационный барьер $U_0 - \gamma\sigma$, тем быстрее и в большем количестве возникают разорванные связи, поэтому тем меньше требуется времени для развития процесса разрушения, т. е. тем меньше должна быть длительная прочность тела, что и имеет место в действи-

тельности.

С рассматриваемой точки зрения разрушение твердых тел должно происходить при любых напряжениях; дело только во времени, в течение которого напряжение действует. Но тогда кажется непонятным, почему не разрушаются мосты и другие сооружения, построенные много веков назад и находящиеся под постоянно действующей нагрузкой.

Для объяснения этого факта обратимся еще раз к рисунку 2.28. Из этого рисунка видно, что чем ниже температура, тем слабее выражена временная зависимость прочности. При достаточно низких температурах эта зависимость практически не проявляется. Для стекол и тугоплавких металлов уже комнатные температуры являются низкими. Поэтому для них предел прочности является фактически однозначной характеристикой материала. Во всех других условиях нельзя говорить о прочности без указания времени, в течение которого материал будет находиться под нагрузкой. Так, изделия из органического стекла при годичной службе могут нести нагрузку, не превышающую 30% от их мгновенной прочности; лопатки паровых турбин, работающие при высоких температурах, рассчитывают только с учетом их временной прочности, и т. д.

2.3.4 Пути повышения прочности твердых тел

Механизм зарождения разрывов сплошности и распространения трещин существенно зависит от атомной структуры твердых тел. По этому прочность является структурночувствительным свойством этих тел.

В кристаллах напряжения вызывают появление дислокаций и перемещение их по плоскостям скольжения. Так осуществляются пластические сдвиги, приводящие к пластической деформации. Встречая на своем пути препятствия в виде примесей, границ зерен, блоков, пересечения плоскостей скольжения и т. д., дислокации затормаживаются и кристалл упрочняется. Как указывалось ранее, у головы скопления дислокаций могут возникать напряжения, способные привести к появлению трещин.

Для увеличения прочности таких тел необходимо затруднить возникновение дислокаций, зарождение и распространение трещин. Осуществить это можно двумя путями.

1. Путем *изготовления бездефектных кристаллов, в которых устранены источники внутренних напряжений, приводящие, в конечном счете, к зарождению трещин.*

Этот путь реализован пока лишь в нитевидных кристаллах, получивших название «усов». Они представляют собой монокристаллы, выращенные в специальных условиях методом разложения или восстановления соответствующих химических соединений, путем конденсации паров чистых металлов при соответствующих температурах в среде водорода или инертного газа, или методом электроосаждения металлов из растворов на очень маленькие электроды. Размеры нитевидных кристаллов находятся обычно в пределах от 2 до 10

мм в длину и от 0,05 до 5 мкм в толщину.

Замечательной особенностью таких кристаллов являются исключительно высокие механические свойства. Прочность их оказалась близкой к теоретической прочности твердых тел. Так, у нитевидных кристаллов железа прочность составляет $\approx 1,34 \cdot 10^{10}$ Па, у меди $\approx 3 \cdot 10^9$ Па, у цинка $\approx 2,3 \cdot 10^9$ Па, в то время как у обычных образцов, изготовленных из этих металлов, она равна соответственно $3 \cdot 10^8$, $2 \cdot 10^8$ и $\approx 1,8 \cdot 10^8$ Па. Нитевидные кристаллы железа деформируются только упруго, причем упругая деформация у них достигает огромной величины—порядка 5,6%; по достижении этой деформации кристаллы хрупко разрушаются. Напомним, что у обычного железа уже при деформации $\varepsilon \approx 0,01\%$ начинается заметное пластическое течение.

Необычно высокие механические свойства нитевидных кристаллов объясняются «идеально» правильной их внутренней структурой. Такие кристаллы практически не содержат дислокаций и других дефектов; обладают предельно высокой чистотой; поверхность их настолько совершенна, что даже при увеличении в 40 000 раз на ней не удастся обнаружить следов шероховатости. Такое совершенство достигается не только условиями роста, но и малыми размерами кристаллов, обуславливающими небольшую вероятность попадания в них дефектов решетки.

Из-за отсутствия в нитевидных кристаллах дислокаций и других дефектов сдвиг по плоскостям скольжения может протекать лишь в форме жесткого сдвига, при котором преодолеваются связи одновременно у всех атомов плоскости скольжения. Для осуществления такого сдвига требуются усилия, близкие к теоретической прочности кристалла, что и имеет место в действительности.

Необычно высокая упругая деформация «усов» обусловлена отсутствием легкоподвижных дислокаций, которые у обычных кристаллов вызывают пластическую деформацию уже при очень низких напряжениях.

Таким образом, первый путь — путь изготовления бездефектных бездислокационных кристаллов — сулит получение материалов с предельно высокой прочностью, близкой к теоретической прочности твердых тел.

2. Второй путь прямо противоположен первому. Он состоит в **максимальном искажении внутренней структуры кристалла введением в него примесей, выделением дисперсных фаз, сильным пластическим деформированием и т. д.** Такие дефекты затрудняют перемещение дислокаций и распространение трещин и тем самым упрочняют материал, о чем более подробно указывалось ранее. Наука и техника получения прочных и сверхпрочных материалов использовала пока только этот путь, достигнув прочности порядка $4 \cdot 10^9$ Па. Что дало это технике, видно из следующего примера. Вес современного авиационного двигателя составляет примерно ≈ 1 кг на 1 л. с. его мощности; в начале же нашего века он составлял примерно 250 кг на 1 л. с.

В настоящее время начинают появляться композиционные материалы, состоящие из матрицы, наполненной нитевидными кристаллами. В качестве матрицы используют нержавеющую сталь, никель, титан и другие материалы.

Матрицы наполняются нитями вольфрама, «усами» из окиси алюминия и т. д. Достигнутые результаты позволяют надеяться, что в ближайшее время на этом пути могут быть получены материалы, обладающие в 5—10 раз большей прочностью (особенно при высоких температурах), чем у лучших сталей, и в 1,5—2 раза более легкие.

Не менее чувствительной к внутренней структуре оказывается и прочность аморфных тел и стеклообразных полимеров. Свежевытянутые при высокой температуре стеклянные и кварцевые нити, практически не содержащие дефектов, обладают прочностью, примерно в 100 раз превышающей прочность обычных образцов и мало отличающейся от теоретической прочности.

Неориентированные стеклообразные полимеры обладают при комнатной температуре прочностью порядка 10^8 Па. Пленки и волокна из них, в которых достигнута ориентированная структура, имеют прочность порядка 10^9 Па, что сопоставимо с прочностью хороших сталей. При предельно высокой ориентации цепей полимерных молекул, которой можно достичь путем направленной полимеризации, прочность получающихся игольчатых кристаллов полимера достигает величины порядка $3 \cdot 10^9$ Па. Если учесть, что плотность полимеров мало отличается от единицы, то можно представить, какую ценность для техники могут иметь такие материалы.

Требования к материалам, которые предъявляют современная наука и техника, непрерывно и быстро растут. Уже в настоящее время требуются материалы, которые способны выдерживать температуры в несколько тысяч градусов, обладать при таких температурах необходимой прочностью и не испытывать заметной пластической деформации при нормальном нагружении.

Каковы перспективы получения подобных материалов?

На один из принципиально возможных путей получения подобных сверхпрочных и жаростойких материалов указал советский физик А. В. Степанов, обративший внимание на особенность таких молекулярных кристаллов, как сера. Кристалл серы построен из молекул, которые связаны в нем относительно слабыми молекулярными силами. Поэтому кристалл обладает малой прочностью и низкой точкой плавления (115°C). В самой же молекуле серы атомы удерживаются мощными химическими связями. Если бы решетку серы удалось построить из атомов, сохранив между ними такие же связи, какие действуют в молекуле, то получился бы очень прочный кристалл с точкой плавления около 34700°C . Аналогичные изменения можно было бы внести и в другие молекулярные кристаллы.

Реально это или нет? Тот факт, что нам удалось мягкий графит и гексагональный нитрид бора превратить в исключительно прочные, твердые и тугоплавкие кристаллы алмаза и боразона путем замены слабых ван-дерваальсовых сил на мощные ковалентные связи, свидетельствует о том, что подобная надежда имеет под собой реальную основу. Возможности же, которые могут открыть такие материалы, столь грандиозны, что любой труд, затраченный на их получение, окупится с лихвой.

2.3.5 Контрольные вопросы к разделу 2.3

- 1 В каком случае происходит хрупкое разрушение? пластическое или вязкое разрушение?
- 2 Перечислите основные методы оценки теоретической прочности σ_0 .
- 3 В чем состоит сущность метода Поляни? Приведите расчет нахождения теоретическая прочность σ_0 по методу Поляни. Каково значение σ_0 для меди и для серебра?
- 4 Приведите метод расчета нахождения теоретическая прочность на отрыв σ_0 по теплоте сублимации. Каково значение σ_0 для железа, алюминия и серебра?
- 5 Произведите вычисление σ_0 исходя из сил молекулярного взаимодействия.
- 6 Приведите кривую изменения потенциальной энергии $U(x)$ и силы взаимодействия $f(x)$ между частицами твердого тела с изменением расстояния между ними.
- 7 Приведите в качестве примера значения модуля упругости E и теоретической прочности σ_0 для ряда технических материалов.
- 8 Какую прочность называют реальной или технической прочностью σ_p ? В чем различие между технической σ_p и теоретической прочностью σ_0 ? Как объясняется это различие?
- 9 Кто впервые предложил метод расчета технической прочности материала? Приведите схему этого расчета.
- 10 Чему равно общее изменение энергии образца ΔW , связанное с возникновением в нем трещины?
- 11 Приведите график изменения энергии трещины W от её размеров. Что такое энергия трещины?
- 12 Напишите условия, необходимые для: захлопывания трещины; спонтанного саморазгона трещины; роста трещины и хрупкого разрушения.
- 13 По какой формуле можно оценить внешнее критическое напряжение, при котором рост трещины энергетически выгоден?
- 14 Какие факторы могут быть источником микротрещин? Какая зависимость получила название масштабного фактора?
- 15 Приведите схему и объясните дислокационный механизм возникновения трещин.
- 16 Когда критерий Гриффитса удовлетворяет силовому критерию? Напишите это условие.
- 17 Что называется временной прочностью или долговечностью материала? Каким соотношением связаны долговечность тела τ , растягивающее напряжение σ и абсолютная температура тела T ?
- 18 Почему τ_0 у всех материалов приблизительно одинаково? Каково примерное значение τ_0 , исходя из опытных данных?
- 19 Что называется энергией активации процесса разрушения? Приведите в ка-

честве примера для ряда материалов значения U_0 , Q_c и Q_d .

- 20 Что означает выражение, что процесс разрушения твердого тела имеет кинетический характер?
- 21 Как объясняется в настоящее время физический механизм процесса разрушения?
- 22 Почему не разрушаются мосты и другие сооружения, построенные много веков назад и находящиеся под постоянно действующей нагрузкой?
- 23 Какими двумя путями можно прийти к увеличению прочности твердых тел? Что для этого необходимо?
- 24 Почему прочность нитевидных кристаллов, получивших название «усов» оказалась близкой к теоретической прочности твердых тел?
- 25 Каковы перспективы получения композиционных материалов? аморфных тел и стеклообразных полимеров?

3 Синергетическая парадигма современной науки

3.1 Основные понятия и определения синергетики

3.1.1 К истории вопроса

К концу XX века в традиционной фундаментальной науке произошли заметные перемены. Взамен анализа и дробления наук, на смену детерменизма, линейности, обратимости и континуальности приходит синтез наук, осознание реальных структур, вероятности эволюции сложных, нелинейных, динамических систем. Принципиально новые, систематические, синергетические подходы к явлениям природы и социума позволили определить основные изменения в фундаментальной науке:

- развивается иерархичность и фрактальность сложных реальных структур материалов и природных объектов;
- наблюдается стохастичность и вероятность хода эволюции сложных реальных систем взамен детерменизма;
- определена необратимость, неравновесность, нелинейность и непредсказуемость в реальных термодинамически открытых системах;
- вскрыта автоволновость в развитии любых живых и природных объектов, социума и Вселенной;
- установлена общность единых парадигм для макро -, мезо - и микромира;
- развивается междисциплинность подходов к явлениям природы, основанная на интеграции наук.

Стало очевидным, что исследования не должны ограничиваться состояниями равновесия. Во многих областях науки, прежде всего в химии, механике жидкости, оптике и биологии и т. д., важная роль необратимых процессов получила общее признание, а отсюда возникла необходимость развития этого направления. Классическая наука делала основной упор на равновесие и стабильность. Мы же наблюдаем флуктуации, нестабильности и эволюционные процессы. Всюду вокруг нас необратимые процессы, в которых симметрия во времени нарушена.

К сожалению, большинство вводных курсов посвящено изучению *равновесных состояний и идеализированных процессов*. Ограничение равновесными ситуациями скрывает некоторые существенные особенности поведения вещества и энергии. Примером может служить роль флуктуаций. Атомная структура вещества приводит к флуктуациям. Но в состоянии равновесия или вблизи равновесия эти флуктуации не имеют каких-либо важных последствий.

Действительно, характерной особенностью равновесной термодинамики является существование принципов экстремумов. Для изолированных систем энтропия возрастает и поэтому достигает максимума в состоянии равновесия. В других ситуациях (например, при постоянной температуре) существуют функции, называемые термодинамическими потенциалами, которые также обладают

экстремумами (максимумами или минимумами) в состоянии равновесия. Из этого обстоятельства проистекают важные следствия. За флуктуацией, приводящей к отклонению от равновесия, следует отклик (реакция), возвращающий систему в экстремум термодинамического потенциала. Равновесный мир – мир устойчивый.

В *нелинейных неравновесных* ситуациях это не так. Основная новация заключается в том, что в сильно неравновесных ситуациях принцип экстремумов редко находит свое осуществление. В результате любая флуктуация более не может быть подавлена. Устойчивость перестает быть следствием общих законов физики. Флуктуации могут нарастать и охватывать всю систему. Флуктуации могут усиливаться необратимыми диссипативными процессами и приводить к новым пространственно-временным структурам, которые были названы И. Пригожиным «диссипативными структурами», чтобы отличить их от равновесных структур, например, кристаллов. В сильно неравновесных ситуациях мы начинаем наблюдать новые свойства вещества, которые в состоянии равновесия не проявляются или пребывают в скрытом виде.

Таким образом, отклонение от состояния равновесия становится параметром, до некоторой степени аналогичным температуре. При понижении температуры система переходит от газообразного состояния к жидкому, а затем к твердому. Как мы увидим из дальнейшего, с учетом таких процессов разнообразие еще больше.

Равновесие остается интересной областью исследования, но при современном состоянии науки представляется существенным включить в сферу исследований и необратимые процессы. Необратимость обуславливает возможность *самоорганизации* в открытых системах – ситуации, где традиционные абстракции классической и квантовой физики (понятие траектории и волновой функции) перестают отвечать экспериментальным данным.

Обратимся к истории. Наука XIX века пришла к двум противоположным концепциям эволюции — в виде теории «создания структуры» Ч. Дарвина и теории «разрушения структур», которой, в сущности, является классическая термодинамика. Эволюционная теория Ч. Дарвина обосновала развитие живой материи от низших форм к высшим, т. е. усложнение организации в процессе эволюции. Классическая термодинамика, в частности закон возрастания энтропии и беспорядка в замкнутой системе выражает эволюцию как дезорганизацию или разрушение изначально заданной структуры при эволюции к равновесию.

Максимальная *энтропия* означает низкую степень организованности и, таким образом, определяет наибольшую неупорядоченность. В то же время окружающий мир является высокоупорядоченным. Из теории Дарвина следует, что в основе принципа отбора лежит повышение организованности биологических систем. Это противоречит второму закону термодинамики, согласно которому энтропия системы с течением времени увеличивается.

Возникла проблема, как дополнить классическую термодинамику отсутствующей в ней теорией «создания структуры». В последнее время физики, химики и биологи сумели приблизиться к пониманию процессов формирования структур в открытых системах, т. е. в системах, обменивающихся веществом и энергией с окружающей средой. Ответ на вопрос о причинах и общих закономерностях самоорганизации содержится, как теперь стало ясно, в термодинамике, точнее в термодинамике необратимых процессов или **неравновесной термодинамике**. Неравновесная термодинамика является сравнительно молодым и интенсивно развивающимся разделом физики. Она сформировалась в законченную область физики в 50-х годах XX века, классическая термодинамика сформировалась примерно на 100 лет раньше, во второй половине XIX века.

Интересно отметить, что первые работы, положившие начало классической термодинамике и неравновесной, появились почти одновременно: в 1822 г. вышла работа Ж. Б. Ж. Фурье «Аналитическая теория тепла», а в 1824 г. — «Размышления о движущейся силе огня» Н. Карно. Время и производные по времени содержались только у Фурье, в работе Карно время не фигурировало. Закон теплопроводности, установленный Фурье, был удивительно прост и изящен: поток теплоты пропорционален градиенту температуры. Закон Фурье стал первым примером описания необратимого процесса. Когда теплота «течет» по закону Фурье — от более высокой температуры к более низкой температуре, возникает выделенное направление времени.

В дальнейшем развитие этих двух основных направлений термодинамики на протяжении нескольких десятилетий шло независимо. Идеи Фурье развивались в направлении нахождения уравнений динамики различных процессов. Г. Ом вывел в 1827 г. свой знаменитый закон, А. Фик в 1855 г. — уравнение диффузии и т. д. В становлении термодинамики выдающуюся роль сыграли работы Н. Карно, Б. Клапейрона, Р. Майера, У. Томсона, Р. Клаузиуса и других. Прошло много времени, прежде чем стало ясно, что термодинамика фактически является **термостатикой**, а уравнения Фурье — Ома — Фика и Навье — Стокса представляют собой эмбрион будущей термодинамики. В течение этого периода лишь изредка появлялись работы, в которых делались попытки найти уравнения, содержащие производные по времени, и выражения, отражающие **необратимость**.

Решительный шаг в развитии неравновесной термодинамики был сделан в 1931 г. американским ученым норвежского происхождения Ларсом Онзагером, который выдвинул принцип, представляющий собой обобщение физических соображений, использованных при выводе уравнений типа Фурье. Его линейная неравновесная термодинамика возникла в результате обобщения классической термодинамики на области малых (линейных) отклонений системы от равновесия. Онзагером были сформулированы основополагающие принципы **линейной** термодинамики.

После второй мировой войны (в 50-60 годы) в значительной мере благодаря работам голландско-бельгийской школы (И. Пригожин, С. де Гроот, П.

Мазур и их сотрудники) была развита **термодинамика сильно неравновесных (нелинейных)** открытых систем. Эта теория еще далека от завершения, однако ее принципы стали основной **парадигмой** современной науки.

Противоречие между эволюционной теорией Ч. Дарвина и вторым законом термодинамики было снято с введением в кибернетике представлений об эволюции системы как связанной с самоорганизующимися и саморегулирующимися процессами и с развитием **синергетики**. К концу XX века синергетика определилась как новое объединяющее направление в науке. Цель синергетики – выявить общие идеи, общие методы и закономерности в самых различных областях естествознания и социологии.

Синергетика имеет много общего с нелинейной термодинамикой, занимающейся самоорганизацией в открытых системах. Только термодинамика ограничивается в основном физико-химическими процессами, а синергетика охватывает значительно более широкий круг дисциплин (начиная от физики, химии и биологии и заканчивая лингвистикой и социологией), используя строгие и не очень строгие аналогии.

Название «синергетика» происходит от греческого synergetikos, что означает совместное, или кооперативное, действие. Впервые этот термин был введен, и именно в этом смысле, великим английским физиологом Шеррингтоном около ста лет назад в ходе исследования мышечных систем и управления ими со стороны спинного мозга. Именно заключенный в этом слове смысл коллективного эффекта позволил Г. Хаккену дать название новому научному направлению, связанному с изучением закономерностей неравновесных процессов. **Физическая природа синергетики** состоит в том, что в нелинейной области, вдали от равновесного состояния, система теряет устойчивость, и малые флуктуации приводят к новому режиму – совместному кооперативному движению многих частиц, больших групп молекул или других элементарных структурных единиц системы.

Установлено, что в нелинейной области неравновесности открытые системы способны развиваться, т.е. спонтанно образовывать упорядоченные структуры, **самоорганизовываться**. Отдельные примеры подобных процессов были известны. Это возникновение турбулентности, вихрей, образование ячейистой структуры в неоднородно нагретом горизонтальном слое жидкости и т. д.

Теория самоорганизации – синергетика возникла на стыке кибернетики (теории управления), нелинейной физики колебаний и волн, термодинамики открытых систем, далеких от равновесия, статистической физики открытых систем. Таким образом, **синергетика – это направление в науке, в котором изучаются процессы самоорганизации, устойчивости и распада структур различной природы, формирующихся в системах, далеких от равновесия.**

В неравновесных системах между макроскопически различными частями возникает корреляция. Этим неравновесные системы отличаются от равновесных, в которых радиус действия корреляций ограничен короткодействующими межмолекулярными силами. В результате ситуации, которые не могут

быть реализованы в равновесном состоянии, становятся возможными в сильно неравновесных системах. Это приводит к важным применениям в материаловедении и технике. Оказалось, что, используя неравновесные технологии можно получать новые материалы, избегая ограничений, налагаемых правилом фаз. Неравновесные структуры встречаются также на всех уровнях в биологии. В настоящее время общепризнано, что биологическая эволюция представляет собой комбинированный результат дарвиновского естественного отбора и самоорганизации, возникающей вследствие необратимых процессов.

Стало очевидным, что **неравновесные состояния** более высокоорганизованные, чем равновесные, так как в них движущей силой процесса является не минимум свободной энергии, как это характерно для равновесных процессов, а минимум производства энтропии. Хакен (основоположник синергетики) считает, что общие законы термодинамики должны получаться из общих законов синергетики как предельные случаи. Это связано с тем, что, с одной стороны, открытую систему всегда можно погрузить в объемлющую ее замкнутую систему, а с другой — открытую систему можно рассматривать в пределе как замкнутую, когда потоки энергии и вещества стремятся к нулю.

Огромной заслугой синергетики и неравновесной термодинамики является установление того факта, что самоорганизация присуща не только «живым» системам. В химических и физических процессах образования относительно устойчивых структур при соответствующих условиях проявляются те же свойства самоорганизации, самовоспроизведения структур, которые ранее рассматривались как специфичные для живой природы. В этом (и только в этом) смысле относительно устойчивые структуры, возникающие в нелинейных системах, как бы оживают: рождаются, претерпевают направленные необратимые изменения и разрушаются, умирают.

Синергетика и нелинейная термодинамика вводит принципиально новое видение мира и новое понимание процессов развития. Оно ново по сравнению с тем преобладающим способом видения, который господствовал на протяжении предшествующих столетий в классической науке: случайность исключалась как нечто внешнее и несущественное; процессы в мире представлялись как обратимые во времени, предсказуемые и ретросказуемые на неограниченно большие промежутки времени; эволюция — как процесс, лишенный отклонений, возвратов, побочных линий.

Синергетика и нелинейная термодинамика основана на идеях:

1) **системности** или, можно сказать, **целостности** и мира и научного знания о нем, общности закономерностей развития объектов всех уровней материальной и духовной организации.

2) **нелинейности** (т. е. многовариантности и необратимости). Нелинейность — одно из центральных понятий в синергетике. Что такое линейное и нелинейное поведение системы? Основным признаком **линейности** является прямо пропорциональный отклик системы на внешнее воздействие. В этом случае результат суммы воздействий на систему равен сумме их результатов (принцип суперпозиции). Принципом **нелинейности** является нарушение принципа су-

перпозиции, т.е. в этом случае целое не есть сумма его частей. При нелинейном поведении системы сохранение ее целостности связано с самоорганизацией структур при переходе через границу неустойчивости. **Нелинейные системы** – системы, свойства которых зависят от происходящих в них процессах. Нелинейными являются механические системы, в которых модуль упругости зависит от деформации, или коэффициент трения между поверхностями тел зависит от относительной скорости этих тел. При этом нарушаются законы трения, закон Гука. В электродинамике нарушается закон Ома (сила тока линейно не зависит от напряжения), в оптике – закон преломления (нарушается линейная зависимость синуса угла преломления от синуса угла падения) и т. д. Такие системы описываются нелинейными уравнениями. Нелинейные уравнения имеют несколько (более одного) решений. Отсюда качественный физический смысл нелинейности. Множеству решений нелинейного уравнения соответствует множество путей эволюции системы, описываемой этими уравнениями. Нелинейность в самом общем, мировоззренческом плане, может быть развернута посредством идеи многовариантности (или, как сейчас говорят, альтернативности) путей эволюции, идеи выбора из альтернатив и вытекающей отсюда идеи необратимости эволюции.

3) **открытости**. Мир, в котором мы живем - сложноорганизован. Он открыт, т.е. является не ставшим, а становящимся, не просто существующим, а непрерывно возникающим миром. Открытые системы в отличие от идеализированных замкнутых (изолированных) систем могут обмениваться с окружающими телами как энергией и веществом, так и информацией. Спектр открытых систем чрезвычайно широк. Их роль могут играть атомы и молекулы в физике и химии, клетки и микроскопические живые существа в биологии, высокоорганизованные организмы в социологии, планеты и звезды в астрономии.

4) **глубинной взаимосвязи хаоса и порядка** (случайности и необходимости). Синергетика вновь открывает случайность как элемент мира. Хаос, беспорядок, случайности необходимы для рождения нового, основа для процесса развития. Как правило, всякий процесс развития сопровождается огромным фоном случайностей. Они имеют слабое, несоизмеримое с основным течением влияние, никак не сказываются, забываются, не определяют динамику развертывания процесса, его «судьбу». Когда же и какой случайности удастся стать существенной, прорваться с микроуровня на макроуровень, с малого масштаба в масштаб системы в целом? Синергетика показывает, при каких условиях и для каких систем (сред) случайности (флуктуации) могут привести к возникновению порядка, новой пространственно-временной структуры. Для объяснения этого перехода И. Пригожин вводит принцип «порядок через флуктуацию». Механизмы образования и разрушения структур, механизмы перехода от хаоса к порядку и обратно не зависят от конкретной природы элементов или подсистем. Они присущи и миру природных (живых и неживых), и миру человеческих, социальных процессов.

Большое разнообразие научных школ, направлений, идей свидетельствуют о том, что синергетика представляет собой скорее парадигму, чем теорию

(**парадигма** – совокупность общепринятых в научном сообществе идей и методов научного исследования). Синергетику как новую парадигму можно охарактеризовать тремя ключевыми словами: нелинейность, самоорганизация и открытые системы.

Наука не имеет окончательной формулировки. В своем развитии наука движется от статической геометрической картины к описанию, в котором существенную роль играют эволюция и история. Основой нового описания Природы служит термодинамика и синергетика.

3.1.2 Аттракторы

Синергетика имеет свой язык. Одним из важных понятий синергетики и нелинейной термодинамики является понятие аттрактора.

Аттрактор – конечное состояние диссипативной системы (системы, в которой энергия рассеивается). Понятие «аттрактор» близко к понятию «цель».

Под аттрактором в синергетике понимают относительно устойчивое состояние системы, которое как бы притягивает к себе все множество «траекторий» системы, определяемых разными начальными условиями. Если система попадает в конус аттрактора, то она неизбежно эволюционирует к этому относительно устойчивому состоянию (структуре). Например, независимо от начального положения мяча, он скатывается на дно ямы. Состояние покоя мяча на дне ямы – это аттрактор движения мяча.

Понятие аттрактора связано с разнообразием диссипативных систем. Идеальный маятник (без трения) не имеет аттрактора и колеблется бесконечно. С другой стороны, движение реального маятника – диссипативной системы, движение которой включает трение, – постепенно останавливается в положении равновесия. Это положение называется аттрактором. В отсутствии трения аттрактор не существует, но даже самое слабое трение радикально изменяет движение маятника и вводит аттрактор.

Во всех случаях, каково бы ни было первоначальное предназначение системы, ее эволюция – при данных граничных условиях – может быть описана траекторией, ведущей из точки, которая представляет начальное состояние, к аттрактору. Таким образом, конечная **точка** – аттрактор – представляет собой финальное состояние любой траектории в пространстве.

Но оказывается, не все диссипативные системы эволюционируют к одной-единственной конечной точке, как в случае с реальным маятником. Существуют системы, например, сильно неравновесная диссипативная система под названием «химические часы», которые эволюционируют не к какому-нибудь состоянию, а к устойчивому периодическому режиму. В этом случае аттрактор более не точка, а **линия**, описывающая периодические во времени изменения системы. Но и это еще не все. Как указывает И. Пригожин: «В других случаях, пытаясь построить изображение аттрактора, мы получаем не точку или линию, а **поверхность** или **объем**».

Полной неожиданностью стало открытие аттракторов, не относящихся к столь простым геометрическим объектам, так называемых **странных аттракторов**. В отличие от линии или поверхности, странные аттракторы характеризуются не целыми, а дробными размерностями. Итак, различают аттракторы **простые** и **странные**. Простые аттракторы – это стационарные точки (фокусы), устойчивые предельные циклы и инвариантные торы в фазовом пространстве. Странный аттрактор сочетает глобальное сжатие фазового объема и локальную неустойчивость фазовых траекторий.

Наиболее четко классификацию аттракторов дал американский исследователь, доктор Билл М. Вильямс. Так он пишет: «Всеми внешними явлениями управляют четыре силы, извлекающие порядок из беспорядка, получившие название аттракторов»:

- 1) точечный аттрактор;
- 2) циклический (круговой) аттрактор;
- 3) аттрактор тор;
- 4) странный аттрактор.

Вот как объясняет аттракторы Вильямс.

Точечный аттрактор (стационарная точка или фокус) – аттрактор первой размерности – это простейший способ привнести порядок в хаос. Он живет в первом измерении линии, которая составлена из бесконечного числа точек. На рисунке 3.1а показан такой стационарный фокус.

Характеристика **циклического аттрактора** – движение взад-вперед, подобно маятнику или циклическому магниту. Он притягивает, затем отталкивает, затем снова притягивает и т. д. Он живет во втором измерении плоскости, которая состоит из бесконечного числа линий.

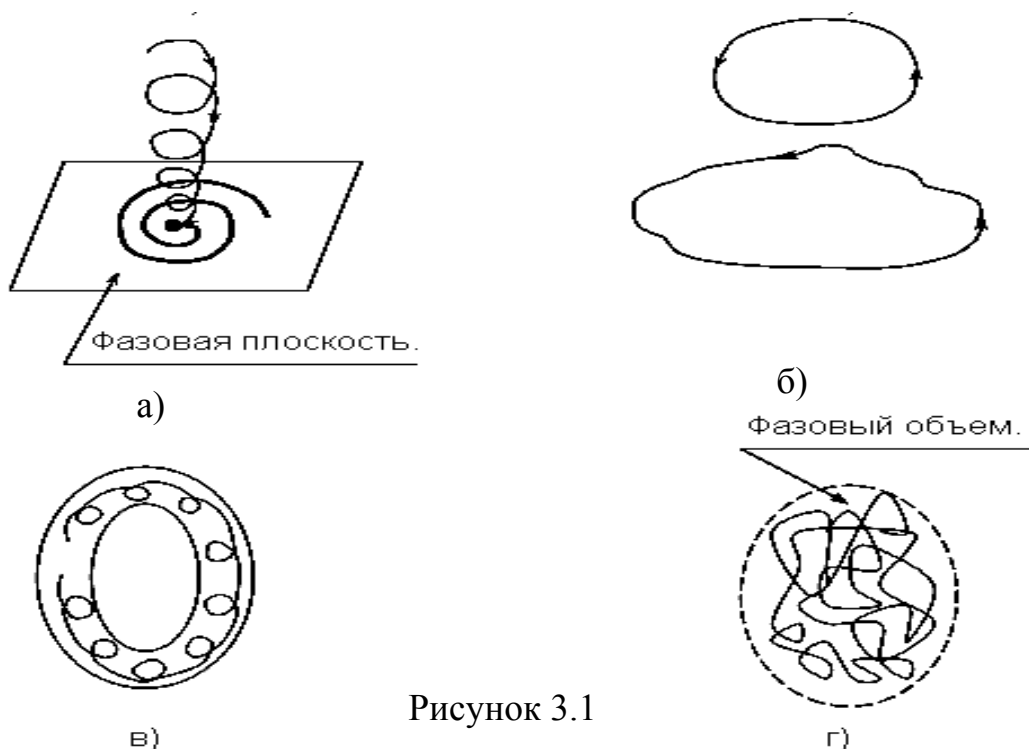


Рисунок 3.1

Им характеризуется рынок, заключенный в коридор, где цена движется вверх и вниз в определенном диапазоне в течение некоторого промежутка времени. Этот аттрактор более сложен, чем точечный аттрактор, и является основной структурой для более сложного поведения (рисунок 3.1б). Одна деятельность автоматически ведет к другой в повторяющемся порядке. Например, высокие рыночные цены на зерно осенью этого года вызовут увеличение посевных площадей следующей весной, что, в свою очередь, приведет к увеличению урожая зерна и снижению цены в будущем году. Затем фермеры уменьшат посевные площади и т. д.

Аттрактор тор является еще более сложным аттрактором. Он начинает сложную циркуляцию, которая повторяет себя по мере движения вперед. Он живет в третьем измерении, которое состоит из бесконечного числа плоскостей. По сравнению с циклическим и точечным аттракторами, аттрактор тор вводит большую степень беспорядочности, и его модели более сложны. Графически он выглядит как кольцо или рогалик. Он образует спиралевидные круги на ряде различных плоскостей и иногда возвращается сам к себе, завершая полный оборот (рисунок 3.1в).

Его основная характеристика – это повторяющееся действие. Этот аттрактор создает что-то вроде беспорядочного гомеостазиса, подобно тому, как популяция насекомых влияет на популяцию лягушек. В частности, присутствие большого числа насекомых приводит к увеличению числа лягушек, а большее число лягушек будет поедать больше насекомых, что сократит популяцию этих насекомых. Из-за снижения количества пищи, популяция лягушек начнет уменьшаться. Тор отражает тот факт, что в процессе эволюции система не выходит за пределы его объема, а внутри тора формируются автоволновые структуры. Этот вид аттрактора наблюдается у таких структур самоорганизации как вихри, смерчи, торнадо в атмосфере и других средах.

Из всего вышесказанного следует, что точечный аттрактор можно представить в виде одномерной линии, циклический аттрактор – множеством линий (необязательно прямых) в двухмерной плоскости, аттрактор тор - множеством линий в трехмерном пространстве.

И, наконец, **странный аттрактор** ("привлекающий хаос") – самый сложный вид. Этот аттрактор из четвертого измерения. То, что поверхностный взгляд воспринимает как абсолютный хаос, в котором не заметно никакого порядка, имеет определенный порядок, базирующийся на странном аттракторе, если наблюдение ведется из четвертого измерения.

По аналогии с вышеуказанными аттракторами странный аттрактор можно представить множеством пульсирующих линий в трехмерном пространстве, подобных вибрирующим струнам. Четырехмерность странного аттрактора получается за счет добавления пульсаций (вибраций). Важнейшей характеристикой странного аттрактора является чувствительность к начальным условиям. Малейшее отклонение от начальных условий может привести к огромным различиям в результате. Фазовые траектории в ограниченном фазовом объеме блуждают. Близкие траектории разбегаются, дальние сближаются (рисунок 3.1 г).

Странные аттракторы обладают геометрической (масштабной) инвариантностью, или, как иногда говорят, *скейлинговой структурой*. Другими словами, структура произвольного фрагмента странного аттрактора подобна структуре объекта в целом. Самоподобные объекты получили специальное название – фракталы, и странный аттрактор представляет собой *фрактал*.

Оказалось, что окружающая нас среда, климат, экология, наша нервная система могут быть поняты и описаны в свете представлений о странных аттракторах, учитывающих как стабильность, так и не стабильность. Мир, окружающий нас не стабилен, но это не означает, что он не поддается научному изучению. Нужно только понимать, что мы не можем (и никогда не сможем) полностью контролировать сложные процессы (в частности, социальные), что невозможна экстраполяция законов классической физики на общество.

Невозможно и предсказание будущего, так как имеющаяся у нас информация по истечении определенного времени теряется. Экстраполяции возможны, но они ограничены. Даже самые, казалось бы, незыблемые расчеты движения небесных тел в соответствии с динамическими законами Ньютона в настоящее время поколеблены. Как было доказано В.И. Арнольдом, существуют кометы, поведение которых носит *стохастический* (случайный) характер и определяется странным аттрактором. Это означает, что движение таких комет настолько неустойчиво, что предсказать их траекторию невозможно.

Таким образом, разрушается образ «великого Администратора», направляющего движение каждого электрона, атома, физического объекта, биологического организма. В отличие от классической термодинамики, в которой имеется лишь один конечный пункт эволюции – термодинамическое равновесие (точечный аттрактор), в нелинейной неравновесной термодинамике и синергетике *возможны разные пути развития* (странные аттракторы).

3.1.3 Кинетические фазовые переходы и бифуркации

Эффект образования диссипативных структур квалифицируется как *кинетический фазовый переход*, при котором скачкообразно изменяются основные характеристики и качество открытой неравновесной системы.

Напомним, что *фазой* называется термодинамически равновесное состояние вещества, отличающееся по физическим свойствам от других возможных равновесных состояний того же вещества. Если, например, в закрытом сосуде находится вода, то эта система является *двухфазной*: жидкая фаза — вода; газообразная фаза — смесь воздуха с водяными парами. Если в воду бросить кусочки льда, то эта система станет трехфазной, в которой лед является твердой фазой.

Часто понятие «фаза» употребляется в смысле агрегатного состояния, однако надо учитывать, что оно шире, чем понятие «агрегатное состояние». В пределах одного агрегатного состояния вещество может находиться в несколь-

ких фазах, отличающихся по своим свойствам, составу и строению (лед, например, встречается в пяти различных модификациях — фазах).

Переход вещества из одной фазы в другую — **фазовый переход** — всегда связан с качественными изменениями свойств вещества. Примером фазового перехода могут служить изменения агрегатного состояния вещества или переходы, связанные *с изменениями в составе, строении и свойствах вещества* (например, переход кристаллического вещества из одной модификации в другую).

Следовательно, под **фазовым переходом** в физике понимается скачкообразное изменение физических свойств при непрерывном изменении внешних параметров. Обычно различают фазовые переходы I и II рода. Эту терминологию ввел П. С. Эренфест в 1933 г.

При **фазовых переходах I рода** (испарение и конденсация, плавление и затвердевание и т. д.) скачком меняется плотность, выделяется или поглощается теплота, называемая теплотой фазового перехода. Фазовые переходы I рода характеризуются *постоянством температуры, изменениями энтропии и объема*. Объяснение этому можно дать следующим образом.

Например, при плавлении телу нужно сообщить некоторое количество теплоты, чтобы вызвать разрушение кристаллической решетки. Подводимая при плавлении теплота идет не на нагрев тела, а на разрыв межатомных связей, поэтому плавление протекает при постоянной температуре. В подобных переходах — из более упорядоченного кристаллического состояния в менее упорядоченное жидкое состояние — степень беспорядка увеличивается, т. е., согласно второму началу термодинамики, этот процесс связан *с возрастанием энтропии* системы. Если переход происходит в обратном направлении (кристаллизация), то система теплоту выделяет.

Для **фазовых переходов II рода** характерно появление по одну сторону от точки перехода некоторой физической величины, которая равна **нулю** по другую сторону от точки перехода. При этом плотность изменяется непрерывно, теплота не выделяется и не поглощается. Эти переходы характеризуются *постоянством объема и энтропии, но скачкообразным изменением теплоемкости*. Общая трактовка фазовых переходов II рода предложена советским ученым Л. Д. Ландау (1908—1968). Согласно этой трактовке, фазовые переходы II рода связаны *с изменением симметрии*: выше точки перехода система, как правило, обладает более высокой симметрией, чем ниже точки перехода. Изменение симметрии системы характеризуется так называемым **параметром порядка**.

Примерами фазовых переходов II рода являются: переход ферромагнитных веществ (железа, никеля) при определенных давлении и температуре в парамагнитное состояние; переход металлов и некоторых сплавов при температуре, близкой к 0 К, в сверхпроводящее состояние, характеризуемое скачкообразным уменьшением электрического сопротивления до нуля; превращение обыкновенного жидкого гелия (гелия I) при $T = 2,9$ К в другую жидкую модификацию (гелий II), обладающую свойствами сверхтекучести.

Рассмотрим более подробно фазовый переход *парамагнетик - ферромагнетик*, который наблюдается в некоторых кристаллах при понижении температуры в отсутствие внешнего магнитного поля. В *парамагнитном* состоянии магнитные моменты (спины) отдельных атомов ориентированы случайно, и поэтому суммарный магнитный момент кристалла равен *нулю*. В отличие от этого в *ферромагнитном* состоянии спины отдельных атомов частично или полностью упорядочены - выстроены вдоль некоторого общего направления. В результате магнитный момент ферромагнетика оказывается *отличным от нуля*.

Переход от ферромагнитного к парамагнитному состоянию происходит при температуре *Кюри*. Величина суммарного магнитного момента убывает с возрастанием температуры и обращается в нуль при температуре Кюри. Таким образом, по сравнению с парамагнетиком кристалл в ферромагнитном состоянии обладает дополнительной характеристикой - *вектором намагниченности*. Величина этого вектора есть фактически *мера упорядочения* атомных спинов, или, как говорят, *параметр порядка данного фазового перехода*. Для сегнетоэлектрика параметром порядка служит спонтанная электрическая поляризация, для сплавов – доля упорядочившихся атомов. В системах жидкость – жидкость или жидкость – пар симметрия не изменяется. В этом случае за параметр порядка условно принимают разность плотностей сосуществующих фаз.

Сходство процесса самоорганизации с фазовыми переходами II рода и позволило Г. Хакену назвать их *неравновесными фазовыми переходами*. Подчеркнем, однако, что природа равновесных и неравновесных фазовых переходов принципиально *различна*.

Неравновесный фазовый переход связан с диссипацией, т. е. с производством энтропии. Поэтому он возможен лишь в *открытых системах*, где поток негэнтропии из окружающей среды компенсирует производство энтропии внутри системы. Энергия системы ниже неустойчивости (ниже точки фазового перехода) распределена случайным образом между молекулами. За точкой фазового перехода она проявляется, по крайней мере, частично, как энергия макроскопического регулярного движения. Система может образовать упорядоченные высококооперативные структуры только вследствие того, что внешние ограничения (температурный градиент, поле излучения) удерживают систему вдали от равновесия. Во всех этих явлениях проявляется *новый принцип упорядочения*, не сводимый к больцмановскому принципу хаотизации. Действительно, при термодинамическом равновесии действует больцмановский принцип хаотизации, вероятность того, что макроскопическое число молекул (порядка 10^{23}) спонтанно организуется в регулярный поток или сфазированный коллектив, пренебрежимо мало.

Однако вдали от равновесия возможна самоорганизация - формирование структуры *более сложной*, чем первоначальная. Такой переход сопровождается *понижением симметрии*. Если взять, например, пустое пространство, то оно в высшей степени симметрично: любая точка подобна любой другой, и ни в одной точке нет внутреннего различия между разными направлениями. Появление структуры сразу понижает симметрию. Французский физик П. Кюри сказал

по этому поводу так: «Дисимметрия творит явление». Другие крылатые фразы по этому же поводу приписывают И. Пригожину: «Порядок есть нарушение симметрии» и «Хаос порождает порядок». Приведем еще несколько примеров понижения симметрии в связи с формированием более сложных структур:

- 1) рост твердых тел из расплавов;
- 2) кристаллизация веществ из пересыщенных растворов с образованием дендритов (кристаллов ветвистых, древовидных форм);
- 3) образование снежинок из капель воды;
- 4) образование и распространение дефектов в кристаллах

Заметим, что во всех рассмотренных примерах масштабы получившихся структур на много порядков превосходят размеры молекул. Именно этим данные процессы отличаются от *простых* фазовых переходов, например, перехода из жидкой в твердую фазу. Изотропная жидкость превращается при этом в анизотропный кристалл, но эта структура характеризуется определенной *микроскопической* длиной, равной периоду кристаллической решетки. Кроме того, упорядоченность, обусловленная фазовым переходом, не зависит от времени. В отличие от классических термодинамических фазовых переходов *кинетические неравновесные фазовые* переходы происходят в *макроскопических* системах, размеры которых сравнимы с характерными размерами рассматриваемых физических, химических или биологических систем. При этом в результате таких переходов могут возникать явления, зависящие от времени. Поэтому следует отличать простые равновесные фазовые переходы от кинетических неравновесных фазовых переходов.

Особое значение в синергетике имеет момент выбора между различными аттракторами, развилка дорог эволюции. Для обозначения этого решающего момента используется термин *бифуркация* (от латинского слова *bifurcus* – раздвоение, разделение). Путь эволюции становится жестко предзадан только после попадания в воронку аттрактора и прохождения точки бифуркации. Но до этого момента при приближении к точке бифуркации и обострении неустойчивости роль флуктуаций многократно усиливается. На сцену выходит фактор случайности.

Жизненный путь каждого человека содержит множество моментов решающего выбора, цепь бифуркаций. По сути дела, синергетическую картину жизни рисует В. В. Набоков: «Есть острая забава в том, чтобы, оглядываясь на прошлое, спрашивать себя, что было бы, если бы... заменять одну случайность другой, наблюдать, как из какой-нибудь серой минуты жизни, прошедшей незаметно и бесплодно, вырастает дивное розовое событие, которое в свое время так и не вылупилось, не просияло. Тайнственная эта ветвистость жизни, в каждом былом мгновении чувствуется распутие, — было так, а могло бы быть иначе, — и тянутся, дwoятся, троются несметные огненные извилины по темному полю прошлого».

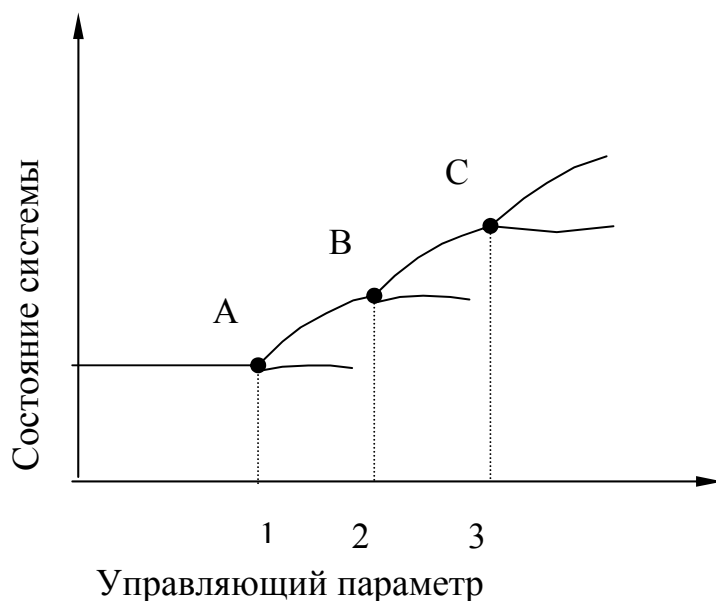


Рисунок 3.2

(раздвоениями), характеризующих переход системы к новому качеству. Следовательно, **точки бифуркации** – критические пороговые точки, в которых поведение системы становится неустойчивым и может эволюционировать к нескольким альтернативам. В этом случае мы можем иметь дело только с вероятностями.

На рисунке 3.3 показана механическая модель бифуркации. Шарик дви-

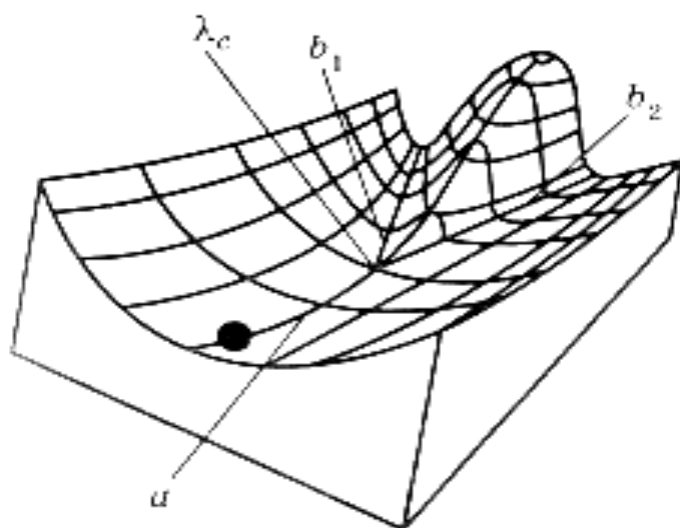


Рисунок 3.3

На рисунке 3.2 схематично представлена термодинамическая ветвь развития (эволюции) открытой системы - схема последовательных бифуркаций А, В, С (точек ветвления путей эволюции системы). Точки 1, 2, 3 – пороговые значения управляющего параметра, при достижении которых открытая система теряет динамическую устойчивость. В точках неустойчивости (А, В, С) даже замкнутая система становится открытой. Эти точки принято называть точками бифуркаций

Шарик движется по впадине (ветвь а), которая в некоторой точке λ_c разветвляется и образует две новые впадины (ветви b_1 и b_2), разделенные возвышением.

Слово «бифуркация» употребляется в широком смысле для обозначения всевозможных качественных перестроек или метаморфоз различных объектов при изменении параметров, от которых они зависят. Только в этих

точках система способна отстраиваться от внешнего воз-

действия и за счет внутренней энергии и обратных связей осуществлять выбор наиболее оптимальной структуры для дальнейшего функционирования системы, как целой.

В точках бифуркаций система становится весьма чувствительной к слабым (информационным) сигналам, от которых зависит вариант образования диссипативных структур, т.е. дальнейший путь развития. Между точками би-

фуркаций в системе выполняются детерминистические законы, но в окрестностях точек бифуркации важную роль играют флуктуации и вероятностные закономерности.

3.1.4 Флуктуации

Флуктуации (от английского слова fluctuation – колебания) - это незначительные, случайные отклонения физических величин от их средних значений. Эти незначительные, случайные возмущения в системе, играют, согласно моделям синергетики, тройственную роль.

Во-первых, они могут выступать как нейтральный фон, ровное взаимно уравновешенное мерцание всей массы внешних помех и внутренних шумов системы, не вносящее в систему заметных отклонений. Даже крупная флуктуация, если она не превысила некоторого порогового значения, гасится всей остальной массой “спокойных” атомов или молекул.

Во-вторых, флуктуации могут играть роль зародыша нового состояния: при благоприятных условиях отдельная флуктуация способна вызвать разрастание островка неоднородности и нарастающее, кумулятивное усиление возмущения, последствием чего может быть закрепление такого возмущения внутри системы и готовность к изменению состояния всей системы. Если превышен порог чувствительности системы, воздействие отдельной флуктуации делается ощутимым и способным при благоприятных обстоятельствах раскачать систему и “свергнуть” ее наличное состояние.

В-третьих, флуктуация может играть роль спускового крючка или “последней капли”, когда в системе, уже достигшей высокой степени неравновесности и нестабильности, потенциально готовой к скачку, он мгновенно инициируется возникшим возмущением. Это явление называют **феноменом самоорганизованной критичности**.

Обратимся к экономике. Катастрофические падения курсов акций на нью-йоркской фондовой бирже, происходящие нечасто, но систематически (наиболее известным был крах 1929 года, его ослабленные повторения произошли, в частности, в 1987 и 1998 годах), очень хорошо описываются **синергетической моделью разрастающихся флуктуаций**. Приток нежелательной информации ведет к резкому сбросу и, соответственно, падению цен акций всего нескольких крупных компаний. Однако такой сброс вызывает возрастающую панику среди брокеров, которые всегда болезненно чувствительно воспринимают любые колебания рынка. К этому присоединяются высказывания ответственных государственных финансовых чиновников и даже непроверенные слухи о делах фирм, — и как результат — к концу торгового дня лавинообразно катятся вниз цены акций многих тысяч иных, вполне благополучных компаний, а с ними и показатели всей биржи.

Немаловажно здесь и само ожидание катастрофы, фактор самосбывающегося пророчества. В октябре 1998 года нью-йоркские брокеры с каким-то странным и упорным суеверием стали ожидать повторения катастрофического падения курсов акций 1987 года, которое тогда случилось тоже в октябре. (Не забудем, летом 1998 года сильно зашатались азиатские фондовые рынки, и успела произойти банковская катастрофа в России.) И что же? Падение на нью-йоркской фондовой бирже произошло! Цены в среднем упали на 20 процентов. Правда, американская экономика оказалась столь устойчивой, что через полгода показатели снова взмыли вверх.

Чем более неустойчива система, чем ближе она к моменту обострения или к точке бифуркации, тем более чувствительной она делается ко всей массе влияний, вносимых как с нижележащих, так и вышележащих уровней бытия. Эффект разрастания, усиления флуктуаций означает, что в нелинейном мире малые причины могут порождать большие следствия. Микрофлуктуации могут прорываться на макроскопический уровень и определять макрокартину процесса. Нет ничего мистического в том, что в состояниях неустойчивости в функционировании подсистем человеческого организма могут вторгаться и факторы космического уровня — такие, как уровень радиации, геомагнитные возмущения, даже мельчайшие изменения в гравитации, вызванные соответствующим расположением планет как тяготеющих масс.

Неравновесность и нестабильность системы, наличие в ней множества точек бифуркаций далеко не всегда ведут к ее разрушению. Очень часто, особенно на высоком уровне организации, ветвление путей эволюции и возможность спонтанной смены режимов функционирования играет для системы конструктивную роль. Чем больше у системы степеней свободы, тем более она способна к «самоподтягиванию» и самоусложнению, повышению уровня упорядоченности. В этом и выражается значение формулы *«порядок через хаос»*.

Зачатки самоорганизации и самодостраивания на предбиологическом уровне связаны с появлением способности у цепей макромолекул поддерживать себя в состоянии критической нестабильности, пробуждающем в них способность «чувствовать» отклоняющие влияния враждебной среды и реагировать на них. И что еще интереснее, в случае отхода от критического состояния в сторону большей равновесности намеренно возобновлять состояние критической нестабильности. Сложные адаптивные системы постоянно эволюционируют к «краю хаоса», балансируют как на лезвии бритвы.

Эти идеи активно развиваются сейчас в рамках теории катастроф и теории самоорганизованной критичности. Последняя была разработана П. Баком и С. Кауфманом, сотрудниками Института исследования сложных адаптивных систем в Санта-Фе, штат Нью-Мехико, США. В качестве показательного примера для выражения идеи катастрофизма они берут модель поведения песчинок в куче песка. «Метафора кучи песка выходит далеко за пределы физического мышления о сложных явлениях; она содержит все: кооперативное поведение многих частиц, точечное равновесие, случайность, непредсказуемость, судьбу. Это — новый способ видения мира».

Упомянем еще об одном удивительном открытии. Оно также свидетельствует о том, что природа способна намеренно вызывать флуктуирующие отклонения, получающие в итоге конструктивное значение. Это открытие было сделано специалистом в области генетики растений Барбарой Мак-Клинтон, и за него она получила в 1983 году Нобелевскую премию. Оказывается, в хромосомах существуют так называемые мобильные гены, функция которых заключается в том, чтобы перескакивать из одного места цепочки ДНК в другое и специально вносить мутации в генетический код. По всей видимости, смысл такой намеренной «порчи» собственных хромосом состоит в том, чтобы за счет увеличения числа мутаций увеличить число первичных вариаций особей, из которых затем происходит естественный отбор, — то есть ускорить, подстегнуть его, не дожидаясь медленного естественного течения. «Эволюция — это случай, пойманный на крыльях». Эта фраза французского ученого Ж. Моно лучше всего передает смысл случайных мутаций, разгадать который стремился еще Ч. Дарвин.

Описанные явления заставляют снова и снова поднимать вопрос о наличии в природе объективной целесообразности, которая не просто пробивает себе дорогу сквозь череду случайностей; чтобы эволюционировать, природа как будто специально будоражит, подстегивает себя случайностями.

Синергетика, стало быть, разоблачает тот привычный взгляд, будто флуктуация, случайность всегда несущественна, маломасштабна, не может определить путь, эволюцию системы. В открытых нелинейных системах (а таковые типичны в мире, в котором мы живем) малое воздействие, флуктуация, случайность могут приводить к существенным результатам. Малая флуктуация может разрастаться в макроструктуру.

3.1.5 Контрольные вопросы к разделу 3.1

- 1 Какие заметные перемены произошли в традиционной фундаментальной науке к концу XX века?
- 2 К каким двум противоположным концепциям эволюции пришла наука XIX века? Как было снято данное противоречие?
- 3 Что изучает неравновесная нелинейная термодинамика и синергетика? Что общего и в чем отличие синергетики и нелинейной термодинамики?
- 4 Почему неравновесные состояния более высокоорганизованные, чем равновесные?
- 5 Что означает термин «синергетика»? В чем состоит физическая природа синергетики?
- 6 На каких идеях основана нелинейная термодинамика и синергетика?
- 7 Какие системы называют нелинейными? открытыми? Приведите примеры нелинейных и открытых систем.

- 8 Что такое парадигма? В чем заключается синергетическая парадигма современной науки?
- 9 Какими ключевыми словами можно охарактеризовать синергетику как новую парадигму?
- 10 Что понимают под аттрактором в синергетике?
- 11 Дайте определение и приведите примеры а) точечного аттрактора; б) циклического аттрактора; в) аттрактора тора; г) странного аттрактора.
- 12 Что такое фрактал? Почему странный аттрактор представляет собой фрактал?
- 13 Каково соотношение между динамическим и вероятностным (стохастическим) описанием природы?
- 14 Дайте определение фазы, агрегатного состояния, фазового перехода. Приведите примеры.
- 15 Чем характеризуются фазовые переходы I рода и фазовые переходы II рода? Приведите примеры.
- 16 В чем принципиальное отличие термодинамических и кинетических фазовых переходов?
- 17 Что называют параметр порядка данного фазового перехода?
- 18 Приведите примеры понижения симметрии в связи с формированием более сложных структур.
- 19 Как связано изменение энтропии с симметрией?
- 20 Что означает термин «бифуркация»? Что понимают под точками бифуркации?
- 21 Что такое термодинамическую ветвь развития (эволюции) открытой системы? Сделайте рисунок и прокомментируйте.
- 22 Приведите пример механической модели бифуркации.
- 23 Что такое флуктуация? В чем заключается тройственная роль флуктуаций?
- 24 Что называют феноменом самоорганизованной критичности?
- 25 Что означает выражение «порядок через хаос»?
- 26 Какая существует связь между понятиями: флуктуация, порядок и энтропия?
- 27 Приведите примеры намеренно вызванных флуктуаций в природе.

3.2 Основные принципы синергетики

3.2.1 Принцип подчинения

Как показал в своих работах Моисеев, граница между живым и неживым размыта, а многообразие форм самоорганизации материи, вероятно, содержит относительно устойчивые образования, которые трудно отнести только к живой или неживой материи. Отсюда сделан вывод о возможности использования для анализа синергетических систем любой природы **триады Дарвина: изменчивость, наследственность, отбор**, предопределяющие алгоритмы общего эволюционного процесса всех систем.

Хакен также отмечает возможность распространения теории Дарвина и на **неорганический** мир, что позволяет связать возникновение макроскопических структур с рождением коллективных мод под действием флуктуаций или отбора, наиболее приспособленной моды или комбинации таких мод. При этом решающую роль играет **параметр время**. Это означает необходимость исследования **эволюции системы во времени** и возможность использования кинетической теории неравновесных процессов, развитой Дарвиным, для описания процессов в открытых физических, химических, биологических и других синергетических системах.

Простейшим эволюционным уравнением является выражение вида

$$\dot{\Phi} = \alpha q \quad (3.1)$$

Оно используется в химии для описания автокаталитических реакций, когда скорость образования $\dot{\Phi}$ некоторого вещества пропорциональна его концентрации q . При использовании этого соотношения в биологии коэффициенту α придают смысл **параметра порядка**, представляя его как разность между скоростью продуцирования и скоростью распада клеток.

Синергетическим системам свойственна **стохастичность**, т.е. их временную зависимость нельзя предсказать с абсолютной точностью. Поэтому в соотношение (3.1) вводится второй член $f(t)$, учитывающий **флуктуации сил**:

$$\dot{\Phi} = \alpha q + f(t) \quad (3.2)$$

В случае если вещество 1 с концентрацией q_1 образуется автокаталитически в результате взаимодействия с веществом 2 с концентрацией q_2 , то описывающее скорость образования вещества 1 эволюционное уравнение имеет вид

$$\Phi_1 = \beta q_1 q_2 \quad (3.3)$$

С учетом стохастичности синергетической системы эволюционное уравнение можно представить в виде.

$$\dot{\Phi}_1 = \alpha q_1 + \beta q_1 q_2 + f(t), \quad (3.4)$$

в котором физический смысл параметров α и β может быть различным. Например, с помощью этого соотношения можно описать различные типы поведения популяций: экспоненциальный рост, стационарное состояние, экспоненциальный распад и т.п. В соотношении (3.4) параметр β описывает связь между двумя системами q_1 и q_2 , и если сила связи регулируется извне, то β играет роль *управляющего параметра*.

Автокаталитические реакции, протекающие при определенных принудительных условиях, проявляют некоторые свойства *живых систем*:

а) *обмен веществ* — постоянное использование исходного сырья для создания новых химических веществ;

б) *самопроизводство* - способность вещества x_i размножаться за счет сырья;

в) *отбор (селекция)* - конкурентное поведение компонента x_i в случае ограничений, налагаемых на сырье или на общее количество имеющихся в распоряжении мест (концентраций). В конечном итоге остается тот компонент, который наиболее приспособлен. В рассмотренном примере конкурентной реакции справедлив закон Дарвина выживания наиболее приспособленных видов.

Самоорганизация временно упорядоченных сложных пространственных структур в неравновесных условиях (динамическая самоорганизация) означает, что в системе уменьшается число степеней свободы. Это позволяет анализировать стохастическое поведение нелинейных систем с использованием ограниченного числа переменных в рамках простых моделей. Это обусловлено тем, что в условиях динамической самоорганизации множество переменных взаимосвязаны между собой.

На этой основе базируется концепция параметра порядка.

Параметрами порядка называются переменные, определяющие все другие степени свободы при достижении критических условий. При описании эволюции синергетических систем необходимо учитывать, что все они состоят из большого числа *подсистем*. Это требует введения многих переменных: $q_1, q_2, q_3, \dots, q_n$. Их называют *переменными состояния*.

При этом важно выделить *уровней* описания:

1 *микроскопического* (отдельные атомы, молекулы)

2 *мезоскопического* (ансамбли атомов и молекул)

3 *макроскопического* (непрерывные протяженные области атомов и молекул).

Соответственно при описании эволюции системы на мезоскопическом уровне переменные q_i относятся к ансамблям атомов или молекул, а на макроскопическом — к непрерывно протяженным областям атомов и молекул.

Так, для описания роста кристаллов с помощью эволюционных уравнений вводятся переменные двух типов: $q_1(x,t)$ и $q_2(x,t)$, где q_1 относятся к плотности молекул в жидкости, а q_2 — в твердой фазе. Описание временных изменений системы в пространстве приводит к нелинейному стохастическому уравнению в частных производных общего типа.

Как установлено, для решения широкого класса стохастических нелинейных дифференциальных уравнений в частных производных существует метод, позволяющий найти функцию $q_2(t) = f(q_1(t))$ при одном и том же t . В этом случае переменная q_2 подчинена переменной q_1 , что позволяет существенно упростить сложную задачу.

Для более наглядного изложения принципа подчинения рассмотрим действие лазера, порождающего когерентное излучение при достижении критических условий. Рассмотрим твердотельный лазер, состоящий из активных атомов, внедренных в твердую матрицу. Торцевые поверхности лазерного стержня действуют как зеркала. Под действием излучения накачки атомы переходят в возбужденное состояние и начинают излучать. При этом атом действует как микроскопическая антенна, испуская цуг световых волн.

В докритическом состоянии (при малых мощностях накачки) атомные антенны излучают отдельные цуги световых волн независимо друг от друга (хаотично). Лазер, следовательно, работает как обычная лампа.

При определенном значении мощности накачки, называемой **пороговой мощностью лазерной генерации**, происходит совершенно новое явление. Все атомные антенны начинают осциллировать в фазе и испускают один гигантский цуг когерентного лазерного излучения. В этом случае само световое поле становится **когерентным**, т.е. оно уже не состоит из отдельных некоррелированных цугов волн, а превращается в бесконечную синусоиду. Это означает, что хаос (в виде цугов световых волн) сменяется порядком, причем параметром порядка служит возникающая когерентная световая волна. Она “вынуждает” атомы осциллировать когерентно, подчиняя их себе (рисунок 3.4 а). Это связано с подчиняющимся полю движением электронов. Возникает круговая подчиненность: с одной стороны, поле действует как параметр порядка, подчиняя себе атомы, что приводит к появлению вынужденного (стимулированного) излучения, а с другой — атомы своим вынужденным излучением порождают световое поле (рисунок 3.4 б).

Процессу стимулированного излучения препятствуют два фактора: **постоянная диссипация и флуктуации**, возмущающие процесс излучения своим

случайным воздействием. Вследствие этих причин в докритическом режиме поле стимулированного излучения затухает.

По мере увеличения мощности накачки увеличивается инверсия, а затухание поля становится все меньше и меньше. Наконец, с какого – то момента система теряет устойчивость, амплитуда поля начинает резко расти. Обычно сначала затухание исчезает лишь у одной полевой моды.

Амплитуда этой моды может выступать как параметр порядка, который подчиняет себе атомную систему. В дальнейшем в конкурентной борьбе между различными неустойчивыми модами побеждает одна, ее амплитуда и является параметром порядка. Именно эта мода и обеспечивает когерентное лазерное излучение. На рисунке 3.4 представлены примеры действия принципа подчинения (а) и круговой подчиненности (б).

Таким образом, принцип подчинения, который реализуется в самоорганизующихся системах, определяет **отбор** наиболее приспособленной моды, связанной с достижением **критических условий**. При этом множество переменных подчиняется одной или нескольким переменным, выступающим как параметры порядка.

С точки зрения Хакена параметр порядка является его **информатором**, так как при реализации принципа подчинения в системе устанавливается порядок. Отмечается иерархия информационных уровней. Первоначально обмен информацией носит случайный характер, затем возникает конкуренция и кооперация, завершающиеся новым коллективным состоянием, которое качественно отличается от ранее существовавшего неупорядоченного состояния. Это новое состояние описывается одним параметром порядка или их набором.

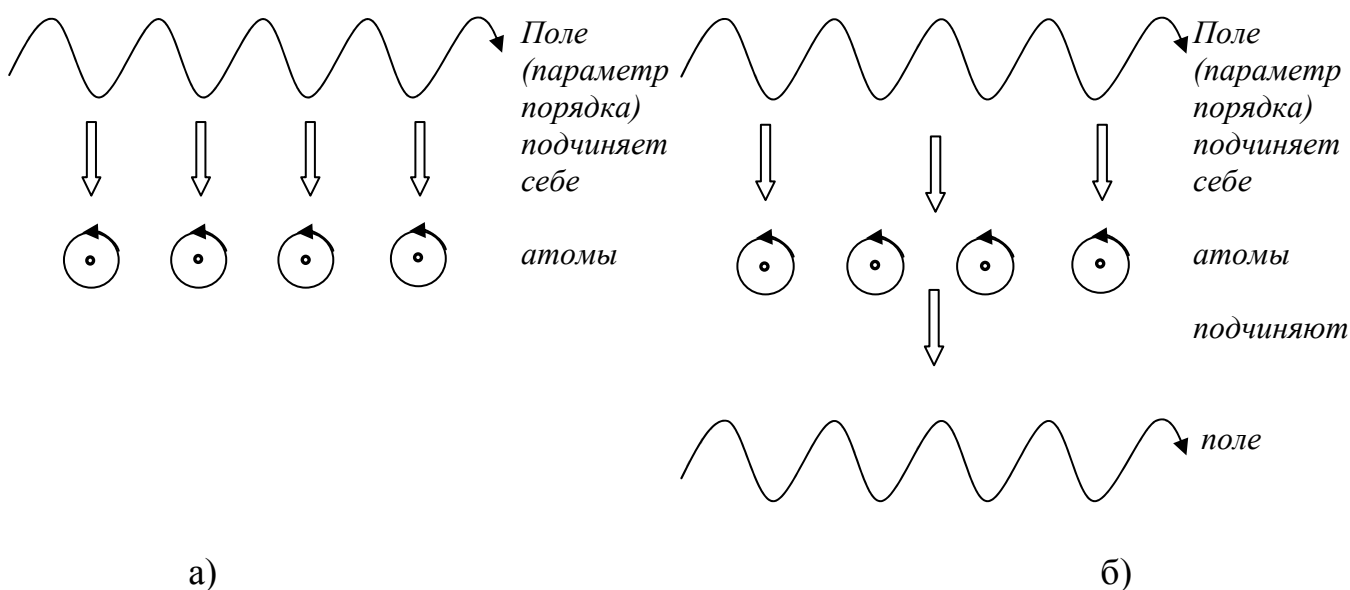


Рисунок 3.4

3.2.2 Универсальный критерий эволюции Гленсдорфа - Пригожина. S - теорема Климонтовича

Как ранее отмечалось, энтропия, служащая мерой беспорядка, может уменьшаться в открытых системах с течением времени благодаря ее уходу в окружающую среду и играть созидательную роль.

Открытая система подводящую от внешнего источника энергию диссипирует (рассеивает) в термостат, при этом **внутрисистемное производство энтропии**

$$\frac{dS_i}{dt} > 0,$$

однако если система экспортирует энтропию во внешнюю среду, т.е. **потоковое слагаемое энтропии** отрицательное

$$\frac{dS_e}{dt} < 0$$

(негоэнтропия) и

$$\left| \frac{dS_e}{dt} \right| > \left| \frac{dS_i}{dt} \right|, \quad (3.5)$$

то полная энтропия открытой системы уменьшается. Такая система (или среда) становится **активной**, т.е. способной к самоорганизации, саморазвитию, образованию новых упорядоченных структур. В активной среде возникает устойчивая флуктуация, которая становится источником образования новой структуры. Соотношение (3.5) получило название **универсального критерия эволюции Гленсдорфа - Пригожина**.

Степенью упорядоченности открытых систем может служить отношение энтропий при фиксированном значении средней кинетической энергии. Однако при кинетических фазовых переходах условие постоянства средней энергии, как правило, не выполняется. Поэтому необходимо сравнивать значения энтропии, нормированные на одно и то же значение средней энергии системы. Это нашло отражение в **S - теореме Климонтовича**.

Ю. Климонтович доказал S – теорему (теорему самоорганизации), на основе которой принцип минимума производства энтропии распространяется и на **нелинейную область**. Теорема позволяет оценить относительную степень упорядоченности и неравновесного состояния системы и предсказать направление, в котором под влиянием внешнего воздействия изменяется термодинамический процесс, протекающий в открытой системе.

Согласно S-теореме, **принцип эволюции открытых систем гласит**: при критических фазовых переходах через пороговые значения управляющих па-

раметров происходит скачкообразное уменьшение нормированной энтропии с уменьшением ее производства.

Под *нормированной энтропией* понимается отношение энтропии к свободной энергии системы. Из S- теоремы следует важный вывод: с ростом управляющего параметра перенормированная энтропия убывает, т.е. имеет место процесс самоорганизации.

Таким образом, принцип *минимума производства энтропии* в процессах самоорганизации представляется общим для *линейных и нелинейных* термодинамических систем.

3.2.3 Принцип «неравновесность — источник упорядоченности».

Поведение открытых систем вдали от состояния термодинамического равновесия определяется процессом развития неустойчивостей с возбуждением широкого спектра колебаний в конечном интервале изменения волнового числа. Первичным является установление *степени неравновесности системы* при заданных внешних условиях.

В качестве характеристики степени неравновесности целесообразно использовать отношение *«фактора неравновесности»*, отражающего интенсивность внешнего воздействия на систему, и соответствующего ему *структурного фактора*, характеризующего структуры и «энергетическую емкость» системы.

Таким образом, если в качестве факторов неравновесности взять *скорости*, для которых соответствующими структурными факторами служат времена и длины релаксации, энергия связи, интенсивность потоков, поглощаемых системой, и т. п., то степень неравновесности определяется значениями следующих параметров.

$$r = \tau_i \left| \frac{\partial \ln \rho}{\partial t} \right|; \quad g = l_i \left| \frac{\partial \ln \rho}{\partial x_i} \right| \quad (3.6)$$

$$\delta = \frac{\rho - \rho_s}{\rho_s}; \quad N = \frac{\rho}{\rho_s}$$

где τ_i , l_i — времена и длины, характеризующие структуру системы, а ρ — определяющие величины, которым соответствуют структурные параметры ρ_s . Носителями структуры являются *структурно-кинетические элементы*, на основе которых определяются все внутренние параметры (τ_i , l_i , ρ_s).

Соотношения (3.6) описывают фундаментальную закономерность неравновесных процессов — структурную обусловленность неравновесности. Эта закономерность приводит к важным следствиям. Прежде всего, она дает реальную шкалу сравнения процессов, протекающих в различных системах.

Наиболее существенной чертой неравновесных процессов является выполнение **закона границы качества**, заключающегося в том, что возрастание фактора неравновесности до определенного порогового значения приводит к качественному изменению структуры, свойств и поведения системы. Непосредственным следствием закона границы качества является ведущий принцип синергетики — **«неравновесность—источник упорядоченности»**. Согласно этому принципу в любой диссипативной системе, находящейся первоначально в однородном стационарном состоянии, при прохождении стационарных потоков, интенсивность которых превышает критическое значение, должны возникать упорядоченные неоднородные состояния — диссипативные структуры.

Процесс перехода **«устойчивость—неустойчивость—устойчивость»** следующий. Первоначально устойчивая диссипативная структура, достигает в процессе эволюции системы порога неустойчивости, начинает осциллировать, а возникающие в ней флуктуации приводят к самоорганизации новой, более устойчивой на данном иерархическом уровне диссипативной структуры.

Пространственно – временные изменения в системе имеют чередующийся характер, т. е. в результате самоорганизации большого числа структурно-кинетических элементов возникает микроструктура. Характеристики структурно-кинетических элементов существенно зависят от фактора неравновесности системы: с ростом степени неравновесности структура открытой системы, как правило, измельчается.

Величайшей заслугой синергетики и неравновесной термодинамики является осознание того факта, что неравновесность может быть причиной порядка. Таким образом, впервые удалось перекинуть мост и установить связь между столь противоположными свойствами. Оказалось, что необратимые процессы в открытых системах могут приводить к возникновению нового типа динамических состояний материи - диссипативных самоорганизующихся систем. При этом источником нововведений в системе, т. е. источником структурной эволюции, являются **флуктуации**, «запускающие» механизм неустойчивости, который, в свою очередь, приводит к формированию **новой** пространственно-временной структуры.

3.2.4 Контрольные вопросы к разделу 3.2

- 1 Приведите эволюционное уравнение синергетической системы с учетом стохастичности. Прокомментируйте его. Что играет роль управляющего параметра в этом уравнении?

- 2 На чем базируется концепция параметра порядка? Что называют параметрами порядка?
- 3 Перечислите и прокомментируйте некоторые свойства живых систем.
- 4 Что представляет собой микроскопический уровень? мезоскопический уровень? макроскопический уровень?
- 5 Изложите принцип подчинения на примере действия лазера. Что является параметром порядка в данном примере?
- 6 Что такое негэнтропия? нормированная энтропия? активная среда?
- 7 Сформулируйте и запишите универсальный критерий эволюции Гленсдорфа - Пригожина.
- 8 Сформулируйте S – теорему Климонтовича. Что позволяет оценить эта теорема? Какой важный вывод следует из этой теоремы?
- 9 Какую величину используют в качестве характеристики степени неравновесности системы? Приведите примеры и формулы.
- 10 В чем суть закона границы качества и ведущего принципа синергетики — «неравновесность—источник упорядоченности»?
- 11 Опишите процесс перехода «устойчивость – неустойчивость – устойчивость».
- 12 Что является источником структурной эволюции в системе?

3.3 Самоорганизация диссипативных структур в неравновесных системах

3.3.1 Основные свойства самоорганизующихся диссипативных структур

Австрийский физик Э. Шредингер (1887-1961) в своей книге «Что такое жизнь с точки зрения физики» отмечает, что живой организм поддерживается непрерывным обменом с окружающей средой – едой, питьем, дыханием и т. д. Но сам по себе обмен ничего не дает. Атомы кислорода, азота и другие не изменяются в процессе такого обмена. Содержание энергии также не изменяется (замена одного джоуля другим ничего не меняет). Как было отмечено ранее, практически вся полученная энергия переизлучается живым организмом. Все, что происходит в природе, ведет к увеличению энтропии. Это относится и к живым системам. При достижении максимальной энтропии наступает смерть.

Отсюда Шредингер делает вывод: неравновесное состояние живых систем поддерживается вследствие понижения энтропии за счет окружающей среды. Следовательно, назначение обмена веществ – понижение энтропии. Повышение энтропии ведет к беспорядку, хаосу; понижение ее, наоборот, ведет к повышению упорядоченности организма.

Существуют два механизма понижения энтропии:

1. *Создание высшего порядка из порядка низшего уровня.*

Так, для растений мощным фактором понижения энтропии является солнечный свет, с помощью которого в хлорофилле происходит фотосинтез – повышение упорядоченности деградированных веществ. Это единственный на Земле естественный самопроизвольный процесс, в котором энтропия уменьшается (конечно, за счет затраты «даровой» солнечной энергии). Механизм поддержания упорядоченности в живых системах пока неясен. Поисками этих закономерностей заняты в настоящее время физики, химики, биологи, биофизики, биохимики и даже биомеханики. Возможно, скоро для оценки качества пищи потребуются не только ее свойства, вызывающие вкусовые ощущения, не только ее калорийность (содержание энергии), но также ее способность понижать энтропию.

2. *Создание порядка из хаоса, самоорганизация процессов.*

Самоорганизующимися процессами называют процессы, при которых возникают более сложные и более совершенные структуры. Это определение позволяет выделить самоорганизацию как один из возможных путей эволюции и отнести этот процесс к условиям, далеким от термодинамического равновесия. Под **диссипативной системой** понимают систему, полная механическая энергия которой при движении убывает, переходя в другие формы, например в тепло. Соответственно диссипация энергии есть переход части энергии упорядоченного процесса в энергию неупорядоченного процесса, а в конечном итоге — теплоту. Существенно, что процессы самоорганизации происходят только в диссипативных системах. Это кажется, на первый взгляд, удивительным, так

как диссипация проявляется обычно в затухании движения, в рассеянии энергии, в потере информации.

Однако диссипация играет в процессах самоорганизации и конструктивную роль. Без ее участия невозможно образование устойчивых пространственно-временных структур, последовательности которых и составляют процесс самоорганизации. Чтобы подчеркнуть это обстоятельство, И. Пригожин ввел емкое и точное название «диссипативные структуры». За разработку концепции образования диссипативных структур в открытых системах И. Пригожину в 1977г. присуждена Нобелевская премия.

Уровень диссипируемой энергии в открытых системах определяет тип и форму диссипативных структур. Было акцентировано внимание на том, что «... как удаленность от равновесия, так и нелинейность могут служить причиной возникновения упорядоченности в системе». Между упорядоченностью, устойчивостью и диссипацией возникает в высшей степени нетривиальная связь. Переход системы в новое стационарное состояние позволяет *уменьшить энтропию*.

Эволюция может приводить и к *деградации*. Так, в закрытых системах, когда движущая сила процесса — стремление системы к минимуму свободной энергии, достигаемое равновесное состояние является наиболее хаотическим состоянием среды. Если же эволюция системы контролируется минимумом производства энтропии (неравновесные условия), происходит самоорганизация динамических структур, названных диссипативными. К диссипативным структурам относятся пространственные, временные или пространственно - временные структуры, которые могут возникать вдали от равновесия в нелинейной области, если параметры системы превышают критические значения. Диссипативные структуры могут перейти в состояние термодинамического равновесия только путем скачка (в результате неравновесного фазового перехода).

Перечислим *основные свойства* самоорганизующихся диссипативных структур следующие:

1) они образуются в открытых системах, далеких от термодинамического равновесия в результате флуктуаций до макроскопического уровня;

2) их самоорганизация происходит в результате экспорта энтропии во внешнюю среду и диссипации системой подводимой энергии;

3) возникновение пространственного или временного порядка аналогично фазовому переходу;

4) переход в упорядоченное состояние диссипативной системы происходит в результате неустойчивости предыдущего неупорядоченного состояния при критическом пороговом значении некоторого параметра, отвечающего точке бифуркации;

5) макроскопические процессы самоорганизации происходят согласовано (кооперативно, когерентно, т. е. синергетически);

б) процессы происходят в таком режиме, что для их описания необходимы нелинейные математические модели. Нелинейная связь переменных приводит к усилению малых возмущений.

7) в точке бифуркации невозможно предсказать, в каком направлении будет развиваться система, станет ли состояние хаотическим или она перейдет на новый, более высокий уровень упорядоченности.

Таким образом, диссипативные структуры – это высокоупорядоченные самоорганизующиеся образования в системах, далеких от равновесия, обладающие определенной формой и характерными пространственно-временными размерами, они устойчивы относительно малых возмущений. Важнейшие характеристики диссипативных структур — время жизни, область локализации и фрактальная размерность.

3.3.2 Примеры самоорганизации диссипативных структур в физике

Одним из типичных примеров самоорганизации диссипативных структур является переход *ламинарного* течения жидкости в *турбулентное*. Обсудим основные закономерности перехода ламинарного течения в турбулентное на примере обыкновенной воды. Рассмотрим воду при различных условиях: а) при термодинамическом равновесии, б) при малых и в) при больших отклонениях от равновесия (рисунок 3.5).

При термодинамическом равновесии (рисунок 3.5а) система находится в покое (скорость движения равна нулю). Если система замкнута, то энтропия ее максимальна. Нарушим равновесие, создав, например, градиент давления. Вода начнет перемещаться в сторону меньших давлений, как в трубе при напоре. До некоторой критической скорости течения будет *ламинарным*, т. е. вода будет перемещаться как бы слоями, параллельными направлению течения (рисунок

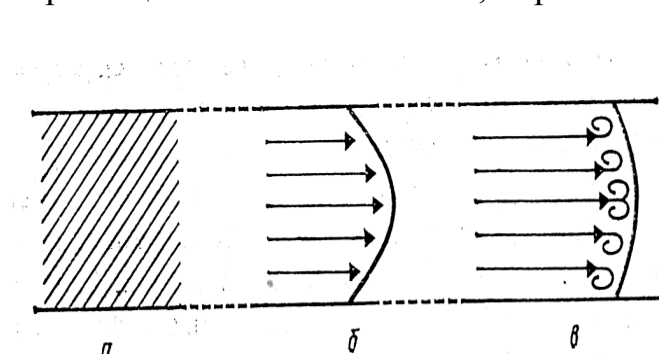


Рисунок 3.5

3.5б). В этом случае ток и термодинамические силы связаны *линейными* соотношениями, а производство энтропии в стационарном состоянии *минимально*.

Если скорость движения воды (или любой другой жидкости или газа) превысит некоторое критическое значение $v_{кр}$, то картина дви-

жения жидкости удивительным образом изменится: поток станет *турбулентным* (от латинского слова turbulentus – бурный, беспорядочный). В этом состоянии, соответствующем большим отклонениям от равновесия, необходимо уже учитывать *нелинейность*, вызванную резко возросшими диссипативными процессами (рисунок 3.5в). Нарушение линейной зависимости токов и термодинамических сил приводит к тому, что теорема Пригожина о минимуме производства энтропии перестает выпол-

няться. Таким образом, течение с развитой турбулентностью представляет собой пример стационарной системы без минимального производства энтропии.

Одна из самых красивых картин возникновения турбулентности предложена академиком *Л. Ландау* в 1944 г. Хотя в настоящее время ясны недостатки теории Ландау, она тем не менее продолжает играть существенную роль в развитии теории турбулентности, а также в общей теории неустойчивости динамических систем. В теории турбулентности обычно имеют дело с безразмерной скоростью, называемой *числом Рейнольдса* Re . По определению $Re = \frac{vL}{\nu}$,

где ν — коэффициент вязкости, деленный на плотность, а L — характерный линейный размер, фигурирующий в задаче.

Зарождение турбулентности по мере увеличения скорости или числа Рейнольдса Re происходит, согласно Ландау, следующим образом. При малых числах Рейнольдса существует единственная стационарная картина течения, соответствующая ламинарному движению. Небольшие отклонения в скоростях движения от стационарных значений, которые всегда существуют вследствие флуктуаций, экспоненциально затухают со временем.

С увеличением числа Рейнольдса при превышении порогового значения критической скорости или критического числа Re некоторые из малых возмущений перестают затухать. Система теряет устойчивость и переходит в новый режим. Говорят о первой бифуркации (*бифуркации Хопфа*). При дальнейшем увеличении числа Рейнольдса новый периодический режим опять становится неустойчивым, возникают незатухающие колебания, по крайней мере, еще с одной частотой и т. д.

Ландау предположил, что если двигаться от стационарного течения при малых Re в область увеличения Re , то «интервалы между числами Рейнольдса соответствующими последовательному появлению новых частот, быстро сокращаются. Что касается вновь появляющихся движений, то они имеют все более мелкие масштабы». Таким образом, согласно схеме Ландау, ***нерегулярное поведение, типичное для турбулентного движения, есть результат бесконечного каскада бифуркаций.***

Схема Ландау демонстрирует лишь один из типов возникновения нерегулярного поведения. Не останавливаясь на других моделях перехода к турбулентности, подчеркнем, что до сих пор «проблема возникновения турбулентности» сохраняется. Более того, интерес к турбулентности постоянно возрастает, прежде всего, из-за научных и инженерных потребностей. Без большого преувеличения можно сказать, что все трудности в изучении поведения потока жидкости или газа, начиная от переноса тепла в реакторе и кончая аэродинамикой, связаны с ***проблемой турбулентного течения.***

Важность анализа задач неустойчивости и турбулентности не ограничивается лабораторными системами и инженерными приложениями. Большая часть Вселенной заполнена средой, находящейся в турбулентном движении. С неустойчивостями приходится сталкиваться в физике планет, океанологии, физике атмосферы и астрофизике. Универсальное свойство естественных течений

- их изменчивость, является как раз следствием неустойчивости движения жидкости или газа.

Метеоролог Э. Лоренц в 1963 г. описал новый механизм потери устойчивости, наблюдавшийся им в численных экспериментах по моделированию возникновения турбулентности в процессе конвекции. В трехмерном фазовом пространстве (в случае Лоренца координатами этого пространства являлись скорость и амплитуды двух температурных мод) при определенных условиях существует область, обладающая необычными свойствами. Она была названа **«странный аттрактор»** (см. раздел 3.1). Эта область притягивает все траектории из окрестных областей. Попадая в нее, все близкие траектории расходятся и имеют очень сложную и запутанную структуру. По определению аттрактор, т. е. притягатель, - это притягивающее множество в фазовом пространстве. Как отмечалось ранее, аттракторы, отличные от состояний равновесия и строго периодических колебаний, получили название странных. В странном аттракторе Лоренца выбранное наугад решение будет блуждать по аттрактору и по прошествии достаточно большого времени пройдет достаточно близко к любой точке аттрактора. Можно сказать, что странный аттрактор представляет собой бесконечную притягивающую линию, уложенную в конечном объеме фазового пространства.

Переход системы на такой режим означает, что в ней наблюдаются сложные непериодические колебания, детали которых очень чувствительны к малому изменению начальных условий. Иными словами две близкие в начальный момент времени траектории очень быстро разбегаются, что соответствует плохой предсказуемости течения по начальным условиям, которые всегда точно не известны. Этим обусловлена большая трудность или даже невозможность **долгосрочного динамического прогноза погоды** из-за отсутствия точно заданных начальных условий. Существование аттракторов с экспоненциально расходящимися фазовыми кривыми на них и устойчивость такого рода явлений были установлены в самом начале 60-х годов еще до Лоренца в работах советских математиков Д. В. Аносова и Я. Г. Синая.

Странный аттрактор Лоренца в трехмерном пространстве грубо можно представить как **двумерную поверхность**. Однако, как отмечал еще Лоренц, при попытке «проколоть» его пришлось бы «проколоть» бесконечное число слоев. Структура аттрактора проявляется при увеличении масштаба изображения. В этом смысле хаотический турбулентный режим имеет более сложную структуру, чем упорядоченный ламинарный.

Изучение перехода ламинарного течения в турбулентное позволяет более точно определить смысл слова **«хаос»**. Впервые слово «хаос» в этом смысле появилось в статье американских ученых Т. Ли и Дж. Йорка 1975 г, «Период три дает хаос». Как следует из смысла названия, **третья бифуркация**, связанная с удвоением периода неустойчивой моды, приводит систему к **неустойчивому** режиму. Подчеркнем, что хаотический, нерегулярный режим имеет свою **внутреннюю упорядоченность**, которая проявляется при исследовании тонких деталей хаотической динамики.

Ученые иногда вводят в научный язык слова, заимствованные из обиходного языка. Именно так обстоит дело со словом «хаос». В повседневной жизни оно интуитивно ясно, хотя и не имеет, определенной меры. В специальном смысле это слово означает *нерегулярное движение*, описываемое детерминистическими уравнениями. Начиная с середины 1970-х годов, когда ученые осознали, что довольно простые математические уравнения позволяют моделировать неупорядоченные системы, исследователи начали активно изучать хаотические явления. Математики, физики, биологи, химики стали искать связи между различными типами беспорядочного в природе. Физиологи обнаруживают присутствие некоего порядка в хаотических сокращениях сердечных мышц, которые являются основной причиной внезапной и необъяснимой смерти. Экологи исследуют скачки численности популяций шелкопряда. Экономисты исследуют старые биржевые сводки, пробуя на них новые методы анализа рынка ценных бумаг.

Десять лет спустя понятие «Хаос» дало название стремительно развивающейся дисциплине, которая перевернула всю современную науку. *Наука о хаосе* – это система представлений о различных формах порядка. Хаос представляет собой более высокую форму порядка, где случайность и бессистемные импульсы становятся организующим принципом скорее, нежели более традиционные причинно-следственные отношения в теориях Ньютона и Евклида. Каковы бы ни были особенности конкретной системы, ее поведение подчиняется одним и тем же недавно открытым закономерностям.

Течение жидкости описывается детерминистическими уравнениями, переход к турбулентности есть возникновение хаоса. Обнаружено, что в точке перехода путем самоорганизации диссипативных структур происходит упорядочение, при котором часть энергии системы переходит в макроскопически организованное вихревое движение. Таким образом, гидродинамическая неустойчивость при переходе ламинарного течения в турбулентное связана с образованием *динамических диссипативных структур в виде вихрей*.

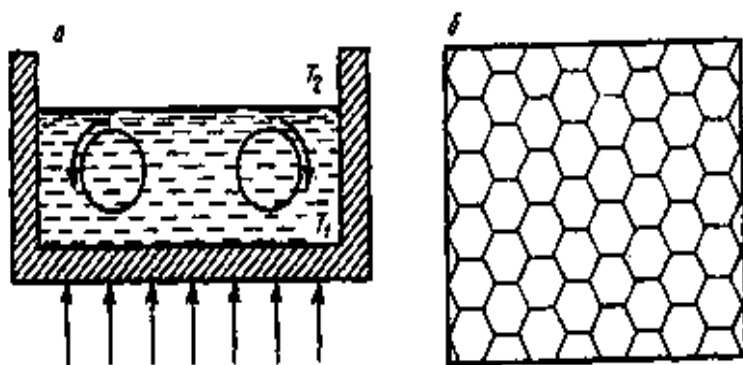


Рисунок 3.6

В качестве другого примера рассмотрим образование ячеек Бенара в жидкости, обнаруженную еще в 1900 году. Ячейки Бенара в неравновесной термодинамике играют исключительную роль, поскольку в этом явлении очень отчетливо проявляются все основные черты термодинамики необрати-

мых процессов. Если горизонтальный слой жидкости (масла) сильно нагреть, то возникает разность (градиент) температур между нижней и верхней поверхностями (рисунок 3.6).

Такой температурный градиент называется инверсным, так как жидкость у нижней поверхности вследствие теплового расширения имеет меньшую плотность, чем вблизи верхней поверхности. Из-за наличия силы тяжести и архимедовой выталкивающей силы такая система оказывается *неустойчивой*, поскольку «легкий» нижний слой и «тяжелый» верхний стремятся поменяться местами. Однако вследствие вязкости жидкости при небольших градиентах температуры движение не возникает и тепло передается только путем *теплопроводности*.

Лишь при достижении *критического значения температурного градиента* появляется новый механизм переноса тепла - *конвекция*: холодная жидкость опускается вниз, а нагретая поднимается вверх. При этом жидкость спонтанно разделяется на гексагональные ячейки, напоминающие соты. Возникает новая диссипативная структура жидкости. На рисунок 3.6 представлено образование при нагреве жидкости снизу (а) ячеек Бенара (б).

Экспериментально наблюдать эффект Бенара можно, например, с помощью следующего простого устройства: на сковородку диаметром около 20 см, подогреваемую снизу горячей водой, наливается слой минерального масла толщиной примерно 0,5 см. Чтобы увидеть потоки в жидкости, к маслу подмешиваются мелкие алюминиевые опилки. При достижении критического градиента в жидкости возникают потоки и образуются красивые шестиугольные ячейки. В центре ячейки конвекционный поток жидкости движется вверх, а по краям опускается вниз. Во всех ячейках процесс один и тот же. Принципиально важно отметить следующий факт. Характерные размеры ячейки Бенара имеют порядок 10^{-1} см, в то время как характерный масштаб межмолекулярных сил 10^{-8} см. Другими словами, каждая ячейка Бенара содержит 10^{21} молекул. Это означает, что огромное число молекул может демонстрировать такое *согласованное (когерентное) поведение*, несмотря на случайное, хаотическое поведение каждой молекулы.

Важность этого эксперимента заключается и в том, что, несмотря на его идеальную воспроизводимость (при той же критической температуре в данном опыте всегда возникают конвекционные потоки), вещество структурируется в ячейки Бенара с попеременно право- и левовращательным движением. Этот факт предсказуем (детерминирован). Однако предсказать направление вращения в каждой ячейке невозможно – это дело случая. В этом проявляется «сотрудничество» между *случайностью* и *определенностью*.

Ячейки Бенара как бы в миниатюре воспроизводят условия, необходимые для существования жизни на Земле, т. е. являются упрощенной *моделью самоорганизующейся биосферы*. Жизнь на Земле стала возможна лишь благодаря негэнтропии солнечного излучения. Сфера жизни на Земле - это упорядоченная структура, которая питается негэнтропией. Именно это обстоятельство обеспечивает жизнедеятельность на Земле. Э. Шредингер характеризовал подобную ситуацию как «добывание упорядоченности из окружающей среды».

Итак, для существования жизни надо понижать энтропию окружающей среды. Постоянство негэнтропийного рациона Земли в обозримые интервалы

времени, по-видимому, и лежит в основе открытого академиком В. И. Вернадским закона сохранения биомассы на Земле. Совместимость второго закона термодинамики со способностью к самоорганизации – крупнейшее достижение неравновесной термодинамики, которая, по выражению И. Пригожина, «легализовала жизнь».

Действительно, энергия солнечного излучения поступает на Землю из высокотемпературного, источника (температура поверхности Солнца = 6000 К), а уходит, в космическое пространство при низкой температуре (температура Земли 300 К). Если предположить, что в среднем энергия на Земле не накапливается, то поток энтропии от Солнца на Землю будет меньше потока энтропии от Земли в космическое пространство. Полная аналогия с тепловым балансом в ячейках Бенара.

Таким образом, Земля получает высококачественную энергию от Солнца (качество энергии определяется малым потоком энтропии), перерабатывает ее, что, конечно, сопровождается ростом энтропии, и выбрасывает в космическое пространство вместе с наработанной энтропией. Это можно показать и аналитически. Солнечная постоянная, т.е. плотность потока энергии на среднем расстоянии Земли от Солнца, составляет величину $1,4 \frac{\text{кДж}}{\text{м}^2 \cdot \text{с}}$.

Если не учитывать отражения (альбедо Земли), то вся эта энергия, в конце концов, превратится в тепловую энергию при температуре $\sim 300^\circ \text{К}$. Нетрудно показать, что соответствующий темп рождения энтропии на 1 м^2 составит $\sim 3 \cdot 10^{23} \text{ м}^{-2} \cdot \text{с}^{-1}$. Действительно, энтропия $S = \frac{dQ}{T}$.

При измерении температуры в энергетических единицах $\epsilon = kT$, где k – постоянная Больцмана, имеем

$$\frac{dS}{dt} = \frac{dQ}{dt \cdot \epsilon} = \frac{1,4 \cdot 10^3}{1,38 \cdot 10^{-23} \cdot 300} = 3,4 \cdot 10^{23} \text{ (м}^{-2} \cdot \text{с}^{-1}\text{)}.$$

Если учесть, что температура Солнца составляет около $6 \cdot 10^3 \text{ К}$, т.е. в двадцать раз превышает температуру поверхности Земли, и тот факт, что солнечная радиация заключена в очень малом телесном угле, то можно оценить, что доля *солнечной энтропии* в общем производстве составит не более одного процента. Следует учесть, что не вся энергия переходит в тепло. Часть солнечной энергии перехватывается атмосферой и служит источником формирования воздушных потоков, ветров, облаков, осадков и т.д. Другая часть энергии идет на фотосинтез белков растительным миром, которые в свою очередь служат питанием и поддерживают жизнь животного мира.

Таким образом, наряду с деградацией упорядоченной солнечной энергии и превращением ее в тепло, идет одновременный процесс самоорганизации и усложнения структур окружающей нас Природы. Все процессы развития толь-

ко потому и происходят, что они сопровождаются мощным процессом роста энтропии за счет уменьшения степени порядка энергии, поступающей от Солнца.

В целом атмосфера и биосфера Земли представляют собой *сложную открытую систему*. Стационарный баланс потоков энергии устанавливается за счет теплового излучения Земли в космическое пространство: на Землю приходит энергия с малой энтропией, а уходит с энтропией намного большей.

Но необратимый процесс возрастания энтропии не идет монотонно во всех составных частях сложной системы. Общий рост энтропии сопровождается процессом создания упорядоченных структур с уменьшением локальных величин энтропии. Именно за счет глобального роста энтропии и возникает возможность локальной организации и развития порядка. Именно за счет общей деградации энергии стал возможен процесс, опять-таки необратимый, встречного развития с уменьшением локальной энтропии и созданием сложно организованной материи.

Для полного понимания необратимости следует учитывать сразу оба процесса: самоорганизацию с небольшим уменьшением энтропии и деградацию порядка с термализацией энергии и рождением энтропии в гораздо более мощном темпе. Полное понимание необратимости невозможно без понимания, как разрушения, так и упорядочения.

3.3.3 Периодические процессы в неравновесных системах

Колебательные явления чрезвычайно широко распространены как в живой, так и в неживой природе. Существует даже такое выражение: «Говорят, что природа не терпит пустоты, но она очень любит ритм и цикличность». Сложноорганизованные системы, достигая своего развитого состояния, имеют тенденцию к распаду, устойчивость оборачивается вновь неустойчивостью – цикл замыкается.

Открытые системы с сильной нелинейностью своей среды пульсируют. Внимательно оглядевшись вокруг, мы можем увидеть, что ритмичность, пульсации органически присущи Природе живой и неживой: космические пульсары, жизнь – смерть, "волны жизни" популяций, периодичность революций в обществе и науке, возбуждение – торможение в коре мозга и т.д. Весь наш мир подвержен периодическим колебаниям на всех уровнях иерархии. В рассмотренных нами примерах мы отмечали возникновение периодических режимов при потере системой устойчивости, т. е. вдали от положения равновесия. Еще более яркие примеры можно привести из области химии и биологии.

До сих пор мы приводили примеры образования *пространственных структур*. Структуры могут образовываться и во времени (*временные*). Наконец, существуют *пространственно - временные структуры*.

Примером **временных** структур может служить эволюция численности зайцев - беляков и рысей, которая характеризуется колебаниями во времени. На рисунке 3.7 показано изменение числа рысей и зайцев-беляков, установленное по числу заготовленных шкурок, полученных компанией «Хадсон Бей» на протяжении 90 лет. Количественные изменения популяции определяются многими факторами, однако, для качественного объяснения временной корреляции на рисунке 3.7 можно ограничиться одним наиболее существенным фактором. Рыси питаются зайцами, а зайцы поедают растительный корм. Возрастание числа зайцев приводит к росту запасов доступной пищи у рысей, поэтому они начинают интенсивно размножаться и их число увеличивается. На каком-то этапе рысей становится так много, что уничтожение зайцев происходит очень быстро. Число зайцев начинает убывать. Запасы пищи у рысей уменьшаются, и соответственно уменьшается их численность. В результате число зайцев увеличивается. Рыси снова начинают размножаться, и все повторяется сначала.

Рассмотренный биологический пример известен в литературе под названием **процесса «хищник - жертва»**, или **процесса Лотки – Вольтерра**. Модель Лотки - Вольтерра описывает не только колебания популяций в экологии, она является также моделью незатухающих концентрационных колебаний в химических системах.

В науке часто встречается, что разные явления математически описываются одинаково. Говорят об изоморфизме уравнений и о структурном изоморфизме явлений. Это происходит потому, что закономерностей, а, следовательно, и моделей значительно меньше, чем явлений. Конечно, модель Лотки – Вольтерра является идеализацией, такой же, как, например, математический маятник без затухания. Однако от этого ее значение не уменьшается. С термодинамической точки зрения модель Лотки – Вольтерра интересна тем, что описываемый ею процесс занимает промежуточное положение между устойчивым стационарным состоянием с минимальным производством энтропии и периодическим процессом с предельным циклом.

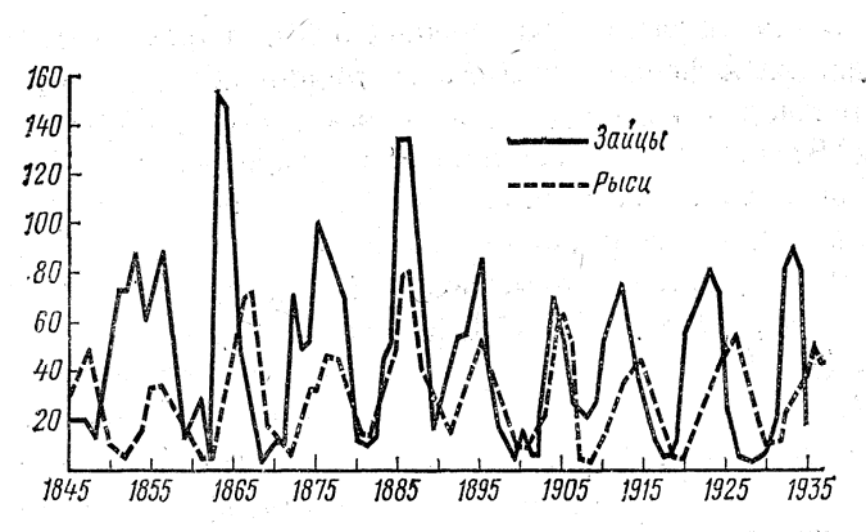


Рисунок 3.7

Предельным циклом называется изолированная замкнутая траектория C , обладающая тем свойством, что все другие траектории в ее окрестности являются спиралями, закручивающимися в направлении C .

Пространство, в котором существует траектория C , это в данном случае пространство концен-

траций или численностей популяций (*фазовое пространство*). Если концентрации или численность популяций зависят от времени, то, исключая время, можно найти связь между концентрациями. Геометрически эта связь изображается в виде траектории в фазовом пространстве, перемещение по которой соответствует эволюции системы во времени. Говорят о *фазовом портрете системы*.

В *устойчивом стационарном состоянии* произвольная флуктуация затухает, и система возвращается в первоначальное стационарное состояние. В случае *предельного цикла* система из любого состояния приближается со временем, к такому периодическому движению (предельному циклу), характеристики которого определяются свойствами самой системы.

Для процесса Лотки – Вольтерра характерно состояние *нейтральной устойчивости*. Здесь нет механизма, обеспечивающего распад флуктуации, поэтому и нет избранной траектории, к которой стремилась бы система. Система находится на границе устойчивости. Любое малое возмущение достаточно для изменения траектории. На фазовой плоскости концентраций стационарное состояние, соответствующее средним концентрациям, окружено бесконечным множеством замкнутых кривых, циклов, каждый из которых реализуется при подходящих начальных условиях и характеризуется своим периодом вращения. В результате наложения малых возмущений система непрерывно «путешествует» по орбитам с различными частотами.

Таким образом, колебания Лотки – Вольтерра описывают *обычный шум*; имеется континуум амплитуд и периодов. С течением времени этот шум затихнет, так как возможны флуктуации, при которых «жертвы» случайным образом вымрут. В этом случае у «хищников» нет шансов выжить. С точки зрения неравновесной термодинамики процесс Лотки – Вольтерра интересен тем, что происходит в системе, где *нарушена линейная связь потоков и сил*. Термодинамическая сила - для реакций это химическое средство - в схеме Лотки – Вольтерра равна бесконечности. Система как бы «бесконечно далеко удалена» от состояния равновесия. Вместе с тем система еще не перешла в неустойчивое состояние.

В химических гетерогенных системах был обнаружен специфический тип самоорганизации, приводящий к *периодическому изменению концентрации реагирующих веществ*, причем эти изменения происходили как во времени, так и в пространстве. Наиболее известный пример химической неустойчивости — реакция Белоусова—Жаботинского, получившая название *химических часов*, так как изменение окраски смеси происходит через правильные промежутки времени. Сама реакция Белоусова - Жаботинского была открыта Б. П. Белоусовым в 1951 г. Существенный прогресс в понимании механизма реакции начался с появлением работ А. М. Жаботинского в 1964 г. С тех пор изучение этого класса реакций только набирает темп.

На рисунке 3.8 представлено периодическое изменение окраски жидкости (а), обусловленное периодическим изменением содержания Ce^{4+} в процессе реакции (б).

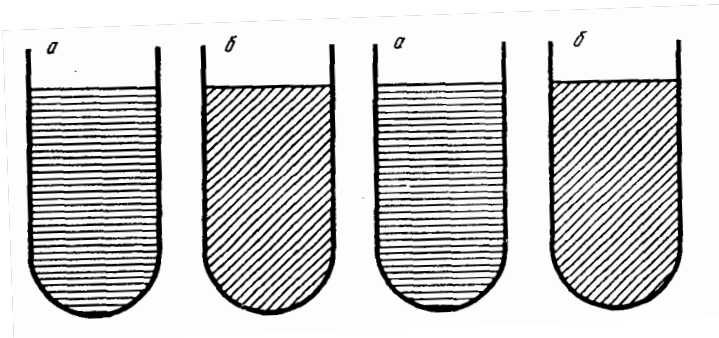


Рисунок 3. 8

В термостатированной колбе исследуются окислительно-восстановительные реакции $\text{Ce}^{3+} \rightarrow \text{Ce}^{4+}$, $\text{Ce}^{4+} \rightarrow \text{Ce}^{3+}$ в растворе серной кислоты H_2O_4 , малоновой кислоты $\text{CH}_2(\text{COOH})_2$ сульфата церия $(\text{Ce}_2\text{O}_4)_3$ и бромида калия KBrO_3 .

При добавлении в раствор индикатора окислительно-восстановительных реакций (ферроина) можно следить за ходом реакции по изменению цвета или более точно по спектральному поглощению. При достаточно высокой концентрации веществ, участвующих в реакции, наблюдаются весьма необычные явления. Цвет раствора периодически (при определенных концентрациях, например, каждые четыре минуты) меняется от **красного** (избыток Ce^{3+}) до **синего** (избыток Ce^{4+}). Сегодня известны много разновидностей этой реакции с другими изменениями цветов. Изменение окраски определяется изменением заряда иона металла. Такие периодические колебания можно наблюдать примерно в течение 30 минут. Так как реакция идет в замкнутой системе, система, в конце концов, приходит в однородное равновесное состояние. Можно сказать, что химический «организм» умирает, задушенный избытком энтропии, которую нет возможности выбрасывать в окружающую среду. Кривая изменения поглощения света показывает, что имеют место типичные **релаксационные колебания**, т. е. колебания, форма которых сильно отличается от синусоидальной.

Явление пространственно – временной упорядоченности представляет собой **автоволны и автоколебания**, которые поддерживаются оттоком энергии из системы. Реакция Белоусова – Жаботинского демонстрирует колебания большого разнообразия и сложности, включая даже хаос. В хаотических системах сколь угодно близкие начальные значения экспоненциально расходятся; система проявляет аперiodическое поведение. Реакция Белоусова - Жаботинского - это пример системы, функционирующей за границей устойчивости термодинамической ветви. Экспериментально было показано, что при одних и тех же условиях концентрационные колебания в реакции Белоусова - Жаботинского полностью воспроизводятся по амплитуде, форме и частоте. Это свидетельствует о том, что они соответствуют **предельному циклу** около неустойчивого стационарного состояния, неустойчивого, так как колебания рано или поздно прекращаются. Таким образом, из какого бы состояния ни началось движение, конечным состоянием будет всегда одна и та же периодическая траектория в пространстве концентраций. Поэтому в противоположность идущим в колебательном режиме химическим реакциям типа Лотки – Вольтерра, частота колебаний этих реакций является однозначной функцией макроскопических переменных, таких, как концентрация компонентов системы и ее температура. Течение химической реакции становится когерентным во времени. Таким образом, химическая реакция превращается в **химические часы**.

3.3.4 Примеры самоорганизации диссипативных структур в биологии

Реакция типа Белоусова—Жаботинского дает представление о механизмах пространственной организации и в живой возбудимой биологической ткани. Отметим принципиальную разницу между механическими свободными колебаниями маятника (консервативная система) и химическими часами (диссипативная система). В первом случае, при внешнем воздействии увеличивается амплитуда и, незначительно, период колебаний маятника. Во втором случае, не изменяются ни период, ни амплитуда колебаний цвета в химических часах.

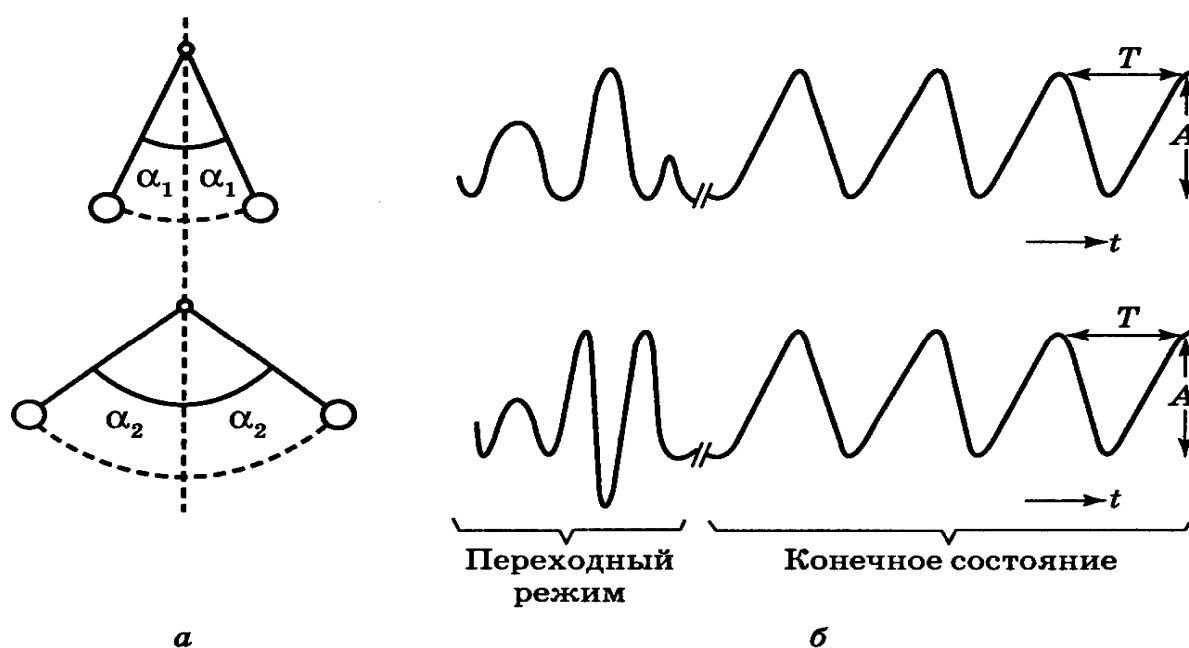


Рисунок 3.9

Эта *устойчивость системы*, ответственная за воспроизводимость событий, чрезвычайно важна. Всем известен такой «маятник», как сердце. Его биения у человека происходят более или менее регулярно: 60 – 80 ударов в минуту. Нарушение ритма всегда чревато тяжелыми последствиями для здоровья человека. Такое нарушение, как фибрилляция (неспособность совершать колебания, захватывающие все сердце в целом), часто приводят к смерти. Если бы наше сердце работало, как механический маятник, чутко реагируя на малые внешние воздействия, то ни одно существо, имеющее сердце, не смогло бы даже родиться.

Таким образом, биение сердца относится к тому же классу явлений, что и колебания в реакции Белоусова—Жаботинского. К тому же классу относятся любые ритмические явления в природе (от цикла клеточного деления до изменения яркости переменных звезд – цефеид). Глобальный вывод из анализа биологических ритмов и болезней человека, сделанный на основе неравновесной динамики, связан с утверждением, что причины болезней не в инфекционных патогенах, а в нарушении временной организации биологических подсистем.

В неравновесной системе принципиальное значение приобретает **временной ход событий**. Следует различать обычное непрерывное время как усредненное, которое мы измеряем по часам, и локальное, системное, дискретное время, которое определяет жизненный цикл данной системы. В живых системах это "**биологическое время**". Каждая система в мире развивается в своем временном темпе. В книге Гласса и Мэки «От часов к хаосу. Ритмы жизни» приведены примеры **биологических часов**. Чувство времени у многих биологических объектов (начиная от простейших, заканчивая человеком) хорошо известно. Точность этих часов поражает воображение, она достигает нескольких секунд в сутки!

Механизм выживания, основанный на самоорганизации, присутствует и у популяции коллективных амёб. Они живут как отдельные клетки. При недостатке пищи быстро объединяются в многоклеточный организм. Для этого наиболее голодная группа клеток становится источником спиральных волн. Амёбы испускают специальное вещество – морфоген, который распространяется по спирали и синхронизирует движение остальных клеток, которые начинают двигаться по спирали. В центре спирали вырастает плодовое тело на ножке. До истощения пищи оно успевает дать споры. Если условия ухудшаются резко и нет времени для образования единого организма, возникает несколько мелких плодовых тел. Популяция не погибает.

Основная отличительная особенность систем, в рассмотренных выше примерах, заключается в возможности усиления при определенных условиях малых флуктуаций; именно это и делает системы неустойчивыми. Причиной, по которой в такой системе развиваются неустойчивости, часто служат автокаталитические процессы, при протекании которых системы переходят в состояния с организацией, явно отличающейся от исходной. Таким образом, здесь выполняется парадигма «порядок через флуктуации». Другим примером самоорганизации диссипативных структур в человеческом организме является образование в мозгу упорядоченных структур при восприятии мысли. С точки зрения Ю.Л. Климонтовича, это состояние отвечает переходу от менее упорядоченного состояния мозга к более упорядоченному.

3.3.5 Самоорганизации диссипативных структур в материаловедении

Обратимся теперь к материаловедению. Такие понятия как флуктуации, диссипативные структуры и самоорганизация играют существенную роль в подлинной революции, происходящей в настоящее время в материаловедении. Технологов и материаловедов явление самоорганизации диссипативных структур интересует, прежде всего, с точки зрения открывающейся возможности получения **новых материалов** с использованием **нетрадиционных технологий**.

Типичными примерами *сильно неравновесных материалов* служат такие материалы, как квазикристаллы, высокотемпературные сверхпроводники, полупроводниковые гетероструктуры и сверхструктуры и т. д. В качестве примера высокоорганизованной стабильной структуры приведем, недавно открытые, шароподобные кластеры поликристаллического углерода – **фуллерены**. В начале 1991 г., после открытия явления сверхпроводимости при $T > 33\text{K}$ поликристаллического C_{60} , легированного атомами щелочных металлов, стабильные кластеры углерода (C_{60} , C_{120} , C_{76} , C_{84}) оказались в центре исследования. Структура фуллерена состоит из пяти – и шестиугольных колец углерода. Обнаружено, что структура кластера C_{60} характерна для самоорганизующихся в пламени органических соединений (сажи). Структура фуллеренов представлена на рисунке 3.10. При этом число атомов углерода в фуллерене равно: а — 28; б — 32; в — 50; г — 60; д — 70.

Поскольку самоорганизация структур в открытых системах происходит тогда, когда внешние силы и потоки энергии (вещества) превышают пороговые значения, т.е. в сильнонеравновесных условиях, то технологии, основанные на явлениях самоорганизации структур, можно отнести к *экстремальным*. Такие технологии получили широкое развитие в металлургии и металлообработке, однако теоретические основы управления структурой и свойствами материалов до недавнего времени базировались главным образом на принципах равновесной термодинамики. Новые технологии позволяют создавать материалы, находящиеся вдали от состояния равновесия, при этом совершенно неприемлемым становится применение фазовых диаграмм. В условиях бифуркационной неустойчивости элементов структуры аномально возрастают коэффициенты диффузии и самодиффузии веществ. Комплексное легирование в сочетании с термомеханическими условиями воздействия на металл позволяют получать необходимые свойства сплавов в твердом состоянии.

Примерами таких новых технологий, повышающих степень неравновесности системы, являются лазерное облучение и облучение различными частицами, ионная имплантация, инъекционная и ультразвуковая обработка расплавов, сверхбыстрое охлаждение жидкого металла (аморфные сплавы), сварка металлов взрывом, электростимулированная прокатка, самораспространяющийся высокотемпературный синтез получения материалов на основе карбидов и интерметаллидов для космической техники и др.

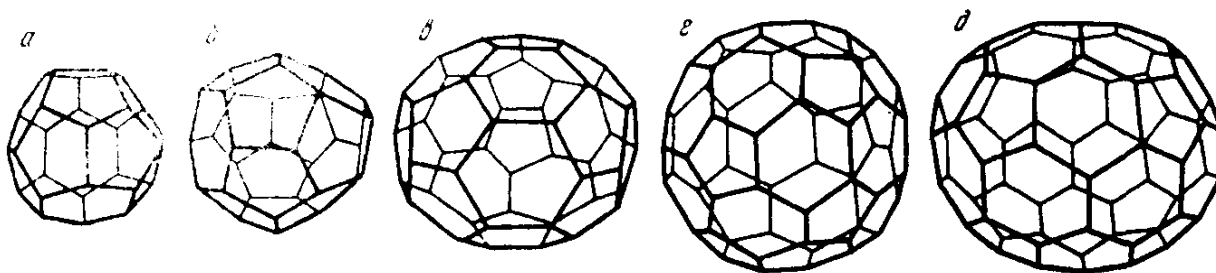


Рисунок 3.10

В настоящее время широкое применение получили материалы сложного строения – **композиты**, удовлетворяющие одновременно весьма различным требованиям. При этом приходится контролировать создаваемый материал от атомного до микрометрового масштаба. В создании подобных композитных материалов как очень ценный союзник технолога действует «самоорганизация» материи.

Многие материалы используются в весьма жестких условиях. Под воздействием деформаций, коррозии, облучения и т. д. поведение дефектов обретает сложный характер, хорошо описываемый уравнениями типа «реакция + диффузия», и поэтому дефекты могут организовываться в геометрически правильные структуры, что не может не сказываться на свойствах материала.

Хорошо известно, что точечные дефекты играют основополагающую роль во всех макроскопических свойствах материалов, связанных с механизмами диффузии атомов и электронными свойствами. Линейные дефекты, или дислокации, являются основными элементами, определяющими пластичность, прочность и разрушение. Индивидуальные дефекты в твердых телах сейчас исследуются на весьма высоком уровне, и, несмотря на это исследования **коллективного поведения дефектов в неравновесных условиях** делают лишь свои первые шаги. Тем не менее, в последние годы достигнут существенный прогресс в изучении динамики дислокаций и пластических неустойчивостей, в связи с чем приобрела важное значение **теория нелинейных явлений**.

В эстафетную цепочку развития материалов «**конструкционные** → **функциональные** → **композиционные**» сейчас добавляется новое поколение материалов, названных японскими исследователями «**интеллектуальными**», с функциями, подобными функциям живых организмов. Такие материалы еще не созданы, но эта проблема может быть решена при использовании междисциплинарного подхода и объединении ученых различного профиля. В отличие от традиционных новое поколение материалов должно быть наделено «интеллектом». Такой материал в процессе службы способен к самодиагностике различных дефектов, их устранению и выдаче информации о сроке службы материала для предотвращения аварии.

Представления об интеллектуальных материалах предполагают, что такой материал способен осуществлять сенсорную, процессорную и исполнительную функции в процессе его работы в конструкциях или других объектах. Это означает, что разработки материалов нового поколения, которые явятся материалами XXI века, требуют использования теории информации. Очевидно, что без междисциплинарного подхода к проблеме с привлечением специалистов в области математики, информатики, фрактальной физики, синергетики, материаловедения и др. проблему решить трудно.

Другим характерным примером самоорганизации ритмически повторяющихся структур служат **слоистые покрытия** со строго определенными размерами слоев. Структура покрытия, представленная на рисунке 3.11, обусловлена ритмическим повторением реакции при пиролитическом хромировании изделия путем разложения паров металлоорганического соединения и осаждения их на нагретую стальную подложку.

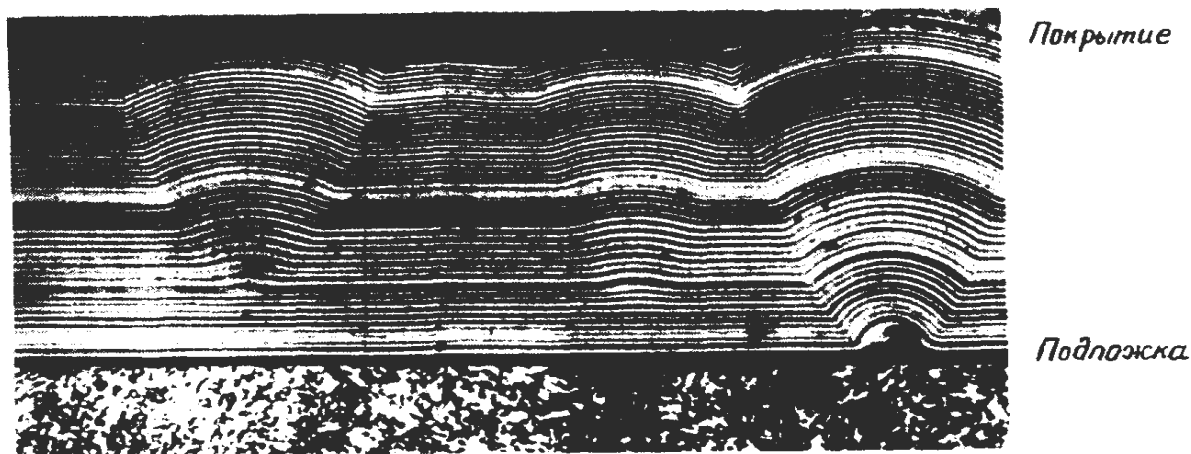


Рисунок 3.11

Строгая повторяемость слоев и постоянство их толщин указывает на самоорганизованность структурообразования, которая возможна только в условиях, когда движущей силой процесса является стремление системы к минимуму производства энтропии. Структурообразование носит автоколебательный характер, а параметром порядка является теплопроводность среды. Это определяет чередование структур хромокарбидного соединения от близкого к аморфным (белые слои) к кристаллическим (черные слои). На рисунке 3.11 представлена самоорганизованная структура покрытия, полученного при пиролизе хроморганической жидкости при плавном повышении температуры от 400°C до 600°C в течение 120 мин.

Технологические процессы осаждения неорганических покрытий и пленок из паровой фазы при разложении металлоорганических соединений представляют большой интерес. Такие процессы позволяют относительно просто создавать неравновесные условия, обеспечивающие самоорганизацию структур и, как следствие этого, получение покрытий с многообразными механическими (коррозионная стойкость, высокое сопротивление эрозии, износостойкость и др.) и особыми физическими свойствами (полупроводниковыми, сверхпроводящими, диэлектрическими и другими свойствами).

Теоретические основы процесса образования пленок и покрытий при **термораспаде** металлоорганических соединений развиты Домрачевым с сотрудниками. Ими показано, что осаждение покрытий из паровой фазы является сложным многостадийным процессом, включающим стадии, которые контролируются явлениями массо- и теплопереноса, адсорбции и десорбции, собственно стадию химической реакции термораспада металлоорганических соединений, а также стадии формирования твердой фазы и кристаллизации.

Отмечено, что образование слоистых и столбчатых структур, так же как и рост крупных и нитевидных кристаллов, есть проявление нелинейных кинетических закономерностей в условиях, далеких от термодинамического равновесия. В таких случаях возникает неравновесная термодинамическая устойчивость металлоорганического соединения по отношению к процессу распада, однако эта устойчивость соответствует достижению системой стационарного со-

стояния, которое в общем случае может не быть устойчивым во времени и пространстве. Это состояние названо **динамически устойчивым неравновесным состоянием**. Оно соответствует определенной степени протекания процесса термораспада. Формирование в процессе термораспада термодинамически неустойчивых, высокотемпературных и метастабильных фаз является результатом образования продуктов в состояниях, далеких от термодинамического равновесия. При этом возможна как стабилизация таких состояний, так и переход их в основное термодинамически равновесное при данных условиях термораспада состояние. Это и определяет различные типы структур покрытий.

Образование структур при пиролизе зависит от температуры осаждения и скорости откачки продуктов распада из зоны осаждения. При высоких температурах и скоростях откачки формируется **столбчатая структура**, неблагоприятная с точки зрения механических свойств покрытия. В этих условиях не реализуется принцип минимума производства энтропии и происходит не самоорганизация, а **организация структуры**.

Слоистые структуры, полученные в условиях относительно ограниченной откачки продуктов распада, соответствуют установлению при постоянной температуре подложки стационарного колебательного процесса, при котором происходит периодическое выделение слоев хрома с невысоким содержанием углерода и пироуглеродных слоев, содержащих хром. Именно такая структура покрытия является оптимальной при работе материала в условиях циклического нагружения. Рассмотренная технология получения покрытий позволяет изменять состав адсорбционного слоя на растущей поверхности за счет использования добавок к хроморганической жидкости в его структуру.

3.3.5 Контрольные вопросы к разделу 3.3

- 1 Назовите и опишите два механизма понижения энтропии. Какие процессы называют самоорганизующимися процессами? Что называют диссипацией энергии? диссипативной системой? диссипативной структурой?
- 2 Перечислите основные свойства самоорганизующихся диссипативных структур. Назовите важнейшие характеристики диссипативных структур.
- 3 Изложите основные закономерности перехода ламинарного течения в турбулентное на примере обыкновенной воды. Как объяснил возникновение турбулентности академик Ландау? Что такое число Рейнольдса? Как оно определяется? Что такое бифуркация Хопфа?
- 4 Как Лоренц описал новый механизм потери устойчивости? Почему невозможен долгосрочный динамический прогноз погоды? Как можно представить странный аттрактор Лоренца в трехмерном пространстве?
- 5 Что означает «хаос» в специальном смысле? Что представляет собой наука о хаосе? Почему переход к турбулентности есть возникновение хаоса?

- 6 Опишите и изобразите схематично механизм возникновения ячеек Бенара. Как можно экспериментально наблюдать эффект Бенара? Как связан эксперимент с образованием ячеек Бенара с предсказуемостью и в то же время с непредсказуемостью процессов?
- 7 Почему ячейки Бенара мы можем считать моделью самоорганизующейся биосферы? На что расходуется энергия солнечного излучения, поступающая на Землю? Благодаря чему стала возможна жизнь на Земле? Почему для существования жизни надо понижать энтропию окружающей среды?
- 8 Что лежит в основе, открытого академиком В. И. Вернадским, закона сохранения биомассы на Земле? За счет чего становится возможным процесс создания сложно организованной материи? Как связан второй закон термодинамики со способностью к самоорганизации открытых систем?
- 9 Что представляет собой процесс «хищник - жертва» (процесса Лотки – Вольтерра)? Дайте определения предельного цикла, фазового пространства, фазового портрета системы. Приведите примеры. Что означает состояние нейтральной устойчивости?
- 10 Почему реакция Белоусова—Жаботинского, получила название «химические часы»? Какие окислительно-восстановительные реакции исследовались в «химических часах»? Какие необычные явления наблюдались при достижении высокой концентрации веществ, участвующих в реакции? Как объясняется периодическое изменение окраски в ходе реакции? Что такое релаксационные колебания?
- 11 Приведите примеры самоорганизации диссипативных структур в биологии, которые относятся к тому же классу явлений, что и колебания в реакции Белоусова—Жаботинского. В чем принципиальное различие между механическими свободными колебаниями маятника и химическими часами?
- 12 Что такое «биологическое время»? «биологические часы»? Какова роль малых флуктуаций в процессах самоорганизации? Что является причиной развития неустойчивости в самоорганизующихся системах? Что означает выражение «порядок через флуктуации»?
- 13 Приведите примеры материалов, полученных в сильно неравновесных условиях. Какие технологии называются экстремальными? Приведите примеры таких технологий. Какие материалы называют композитными? интеллектуальными? Какие функции должны осуществлять интеллектуальные материалы в процессе работы в конструкциях или других объектах?
- 14 Что является движущей силой процесса структурообразования слоев? Что является параметром порядка в данном процессе? Что называется динамически устойчивым неравновесным состоянием? Что определяет различные типы структур покрытий?
- 15 Когда формируется столбчатая структура? В каком случае происходит не самоорганизация, а организация структуры? Какая структура покрытия является оптимальной при работе материала в условиях циклического нагружения?

4 Синергетика пластической деформации и разрушения

Деформируемое твердое тело является самоорганизующейся системой, в процессе эволюции которой происходит (так же как и в других синергетических системах) **самоорганизация** диссипативных структур со спонтанной их перестройкой вблизи точек бифуркаций. Эти перестройки можно рассматривать как последовательность кинетических переходов, при которой случайность, неравновесность и необратимость являются источниками порядка в системе. Пластическая деформация и разрушение являются **диссипативными** процессами, которые протекают вдали от термодинамического равновесия и сопровождаются проявлением неустойчивости системы в виде деформируемого металла в критических точках. При описании различных экспериментально наблюдаемых нелинейных деформационных эффектов в последнее время начали применяться методы теории динамических нелинейных систем, позволяющие на основе анализа сравнительно простых моделей качественным образом описывать "сложное" поведение деформируемого твердого тела.

В данной главе дается обзор и анализ физических моделей, описывающих нелинейное поведение твердого тела под нагрузкой: стадийность деформационного упрочнения, эффекты пластической нестабильности, эволюцию дислокационных структур и других. При этом основное внимание уделяется синергетическим подходам, а анализ эволюции деформируемого металла проводится с учетом иерархии масштабных уровней диссипации энергии и критериев, контролирующих переход с одного уровня на другой. Пластическая деформация является **коллективным эффектом**, охватывающим самосогласованное поведение большого числа структурных дефектов разного типа и происхождения. Рассмотрим пластическую деформацию и разрушение с данных современных синергетических позиций физики твердого тела.

4.1 Коллективное поведение структурных дефектов при пластической деформации

Под **пластической деформацией** понимают широкий круг явлений, обусловленных перемещением дефектов или необратимой перестройкой кристалла, в результате которых наблюдается остаточная деформация. При малых степенях деформирования описание процессов пластического течения достигается в рамках наглядных представлений об эволюции ансамбля носителей пластической деформации во внешнем поле. Однако с ростом деформации их плотность оказывается настолько высокой, что предположение об автономном поведении отдельных дефектов становится неприемлемым. Настоящий раздел посвящен рассмотрению **коллективных эффектов**, определяющих процесс развитой пластической деформации.

4.1.1 Сильно возбужденные состояния в кристаллах

Фундаментальные представления физики твердого тела основаны на теории трансляционной симметрии кристаллов. Наблюдаемые отклонения от трансляционной симметрии классифицируются как **дефекты** кристалла, возмущающие его основное состояние. Поэтому закономерности поведения кристаллов в различных полях внешних воздействий традиционно описывают на основе поведения различного рода дефектов как возмущений основного состояния кристалла.

Однако такой подход оказывается корректным только при **слабом** возмущении твердого тела. Картина радикально изменяется, если в кристалле во внешнем поле возникают **сильно возбужденные состояния**. В этих условиях поведение кристалла становится сугубо **нелинейным**, возникают эффекты массопереноса, скорости которого на много порядков превышают скорости перескоковой диффузии, возможен гидродинамический характер пластического течения, появляются метастабильные структуры и фазы. Совершенно ясно, что для описания сильно возбужденных состояний кристалла теория возмущений идеального кристалла принципиально неприменима и необходимы качественно новые представления.

Впервые такие представления были развиты в работах В.Е. Панина и его школы. Авторы обосновали положение, что в условиях сильного возбуждения за исходное нужно брать состояние, характеризуемое максимумом неравновесного термодинамического потенциала, для которого функция распределения атомов в пространстве качественно отличается от таковой для идеального кристалла. Наряду со структурными состояниями исходного кристалла в условиях сильного возбуждения в пространстве междоузлий появляются новые разрешенные структурные состояния, вакантные либо занятые сильно возбужденными атомами. В кристалле возникают новые степени свободы. Сильно возбужденный кристалл становится, по существу, суперпозицией нескольких структур, и число разрешенных структурных состояний в системе значительно превышает число атомов. Такие состояния в кристалле названы **атом-вакансионными**. Они объясняют нелинейный характер поведения сильно возбужденного кристалла, аномально большие скорости массопереноса в нем (атомы в данных условиях могут двигаться через междоузлия), гидродинамический характер течения. В ходе движения сильно возбужденного кристалла к равновесию в нем могут возникать промежуточные структуры, связанные с возможностью локализации сильно возбужденных атомов в новых структурных состояниях. Промежуточные структуры в конечном состоянии оказываются метастабильными, однако обеспечивают при своем возникновении дополнительные каналы диссипации энергии. Процесс является сугубо диссипативным.

Принципиально важным в новом подходе является то, что любое нарушение структуры кристалла — это не просто дефект, а новое разрешенное состояние, генетически заложенное в электронно-энергетическом спектре кристалла. Предсказать все возможные структурные состояния твердого тела можно только в рамках теории сильно возбужденного кристалла, у которого

число степеней свободы больше, чем у кристалла в основном состоянии. Отсюда все типы дефектов в реальных кристаллах следует рассматривать как локальные метастабильные структуры, неизбежно возникающие при образовании кристалла при воздействии на него внешних полей, когда он проходит через стадии сильно возбужденных состояний.

Существование в реальном кристалле, помимо его основного структурного состояния, целой совокупности других локальных структур обусловлено фактором производства энтропии при движении сильно неравновесного твердого тела к равновесию. При небольшой плотности этих сторонних локальных структур их классифицируют как *дефекты* реального кристалла, при большой — как *аморфное* состояние. Получить из смеси нескольких структур сильно возбужденного кристалла одну, идеальную в основном состоянии, — задача сверхсложная. По-видимому, единственный случай ее решения — бездефектные нитевидные кристаллы. В общем случае в реальном кристалле всегда неизбежна примесь метастабильных локальных структур, т. е. дефектов, которые наследуются из смеси структурных состояний сильно возбужденного кристалла.

В последние годы, развиваемые представления существенно углубились: развит математический аппарат их описания; получены убедительные экспериментальные данные, подтверждающие выводы теории. Наряду с этим появилась возможность их применения ко многим фундаментальным проблемам физики твердого тела. Стало очевидным, что теория сильно возбужденных состояний в кристаллах — это новая область физики твердого тела, которая принципиально не может быть сведена к описанию поведения дефектов в идеальном кристалле. В то же время сфера приложения новых представлений непрерывно расширяется, особенно в случае *экстремальных* условий эксплуатации твердых тел.

Основным критерием сильно возбужденных состояний является изменение числа степеней свободы кристалла, в результате чего указанные состояния оказываются вырожденными относительно возможных атомных конфигураций. Движение различных элементов системы становится менее детерминированным, возникает возможность волнового поведения ионной подсистемы.

В этих условиях электронные и колебательные возбуждения должны описываться согласованно с конфигурационными возбуждениями, что обуславливает появление в электронных и колебательных спектрах соответственно флуктуационных и локальных мод. Для ряда важных задач физики твердого тела развита теория связи электронных флуктуационных состояний со структурными изменениями: температурными и механическими возбуждениями, мартенситными превращениями, реконструкцией поверхности переходных металлов, свойствами аморфных металлов, аномальным массопереносом. Во всех случаях электронные флуктуационные состояния являются своеобразным генетическим кодом, который определяет появление вполне определенного структурного состояния.

Расчет электронно-энергетических спектров кристаллов в сильно возбужденном состоянии позволяет развить основы генной инженерии кристаллов и

создавать в них качественно новые структуры (локально или во всем объеме), направленно формируя заданные кристаллические системы и их свойства.

4.1.2 Пластическая деформация как релаксационный процесс

Особый интерес представляет приложение теории сильно возбужденных состояний в кристаллах к проблеме *пластичности* и *прочности* твердых тел.

Принципиальный недостаток существующих теорий физики и механики деформируемого твердого тела — рассмотрение пластического течения в рамках исходного стабильного кристалла и неучет структурных уровней деформации. Пластическая деформация должна рассматриваться на основе законов поведения неоднородных, сильно неравновесных систем, претерпевающих локально-структурные превращения и следующих к равновесию путем движения элементов новых структур по кристаллу в полях градиентов напряжений. Перестраиваясь эстафетно между двумя смежными структурами, деформируемый кристалл способен осуществлять в локальных объемах пластическое течение, протекающее как диссипативный процесс. Рассмотрим физические основы механики развиваемого подхода.

Все типы деформационных дефектов в кристаллах являются не просто нарушением периодичности структуры исходного кристалла, а представляют собой *элементы других структур*. Так, расщепленные дислокации в ГЦК-кристаллах есть элементы ГПУ-структуры, ограниченные частичными дислокациями, а протяженные дефекты упаковки и двойники в ГЦК-кристаллах с низкой энергией дефекта упаковки — планарные ГПУ-структуры на плотноупакованных плоскостях. В ОЦК-кристаллах дислокации также расщеплены и, следовательно, также являются фрагментами других структур. В кристаллах вблизи температур структурных превращений деформация осуществляется образованием мартенситных ламелей как структур другой фазы. Если кристалл испытывает структурный фазовый переход, его деформация происходит в режиме сверхпластичности.

Наоборот, если кристалл не является плотноупакованным и имеет одну стабильную структуру, он *хрупок*. В этом отношении очень показательна хрупкость интерметаллидов со структурой В2, которая в большинстве соединений является стабильной. Других, близких по энергии, структур нет и соединения хрупки. Решетка такого соединения не может перестраиваться при нагружении, и единственным диссипативным процессом в деформируемом кристалле служит зарождение трещины.

Однако имеется уникальный интерметаллид NiTi, в котором наряду со структурой В2 существует энергетически близкая структура В19. Возможность их легкой структурной перестройки обуславливает термоупругие мартенситные превращения в NiTi и очень высокую пластичность интерметаллида. Легирование NiTi железом резко стабилизирует структуру В2 и быстро охрупчивает соединение.

Высокая пластичность металлов с плотноупакованными структурами связана с большим числом структурных состояний, легко перестраивающихся друг в друга в локальных зонах, что проявляется в легком зарождении и большой подвижности дислокаций как элементов иной структуры в исходной решетке.

Другими словами, зарождение пластического сдвига есть локальный кинетический структурный переход, и может происходить только в **локальной** зоне кристалла за счет производства энтропии. Указанное структурное превращение принципиально отличается от термодинамического структурного фазового перехода и должно описываться на основе неравновесной термодинамики.

Последующее пластическое течение является сугубо **релаксационным** процессом, стремящимся равномерно распределить локальное сильное возбуждение по всему кристаллу или вывести его во внешний термостат. Поскольку структурная перестройка происходит наиболее легко в плотноупакованных плоскостях, элементы новой структуры движутся **анизотропно**, вызывая локализацию пластического сдвига и возникновение вихрей трансляционных потоков. Это определяет **волновой характер** распространения пластической деформации в нагруженном твердом теле.

Феноменологически механизм распространения волны пластической деформации качественно аналогичен механизму распространения электромагнитной волны. Его физическая суть сводится к следующему. Пластическая деформация твердых тел может протекать только в условиях неоднородного напряженного состояния. Пластический сдвиг зарождается в зонах максимальных концентраторов напряжений как локальное кинетическое структурное превращение и распространяется в пределах определенного структурного элемента деформации путем движения дефектов как фрагментов другой структуры. Любой трансляционный сдвиг является сугубо релаксационным процессом и сопровождается релаксацией локального концентратора напряжений.

Релаксационные сдвиги по первичной системе скольжения вследствие неизотропности трансляционных потоков всегда порождают **поле поворотных моментов**, действующих на структурный элемент деформации. Релаксация поля поворотных моментов возможна различными механизмами кристаллографического поворота, мультиплетным скольжением как материальным поворотом в структурном элементе деформации, образованием трещин. Потоки деформационных дефектов по границам структурного элемента деформации формируют в зонах стесненной деформации новые источники силовых полей, релаксация которых пластическим сдвигом в смежный структурный элемент деформации приводит к возникновению нового поля поворотных моментов.

Эстафетное распространение взаимосвязанных трансляционных и поворотных мод деформации обуславливает **волновой характер пластического течения** твердых тел. В общем случае в деформируемом теле возникает спектр волн пластической деформации различной длины, которые определяют иерархию структурных уровней деформации в заданной среде.

Проявлением указанных поворотных мод является формирование разориентированной ячеистой дислокационной структуры, фрагментация объемов структурных элементов при больших степенях холодной деформации, в ходе ползучести и высокотемпературной деформации. Эти поворотные моды формируют мезоскопические уровни самоорганизации потоков деформационных дефектов внутри элементов исходной структуры материала. Совокупность структурных уровней исходной среды и формирующихся в ходе деформации мезоскопических уровней самоорганизации потоков деформационных дефектов образует *иерархию структурных уровней пластической деформации* твердых тел.

В некоторых работах структурные уровни деформации называют масштабными. Это определение не имеет физического смысла. Единственным физическим критерием структурных уровней деформации твердых тел является размер ротора (вихря) в волне пластической деформации без участия границ раздела в деформируемой среде. Если в материале нет внутренней структуры (аморфное состояние), определяющую роль в распространении волны пластического течения играют боковые поверхности образца. В общем случае иерархия структурных уровней деформации определяет спектр волн пластического течения, длины которых непосредственно связаны с размерами роторов поворотных мод деформации.

4.1.3 Структурные уровни деформации

Закономерности пластической деформации фактически с самого начала изучались на разных структурных и масштабных уровнях, хотя это не оговаривалось. Затем появилось представление о *макро*- и *микро*уровнях. Позже в этой классификационной шкале Владимиров ввел представление о *мезо*уровнях.

Закономерности пластической деформации и упрочнения в течение длительного времени анализировались на уровне отдельных дислокаций, их групп, полос скольжения, блоков мозаики, субзерен поликристалла. Каждому такому структурному уровню часто сопоставлялся соответствующий масштаб (протяженность).

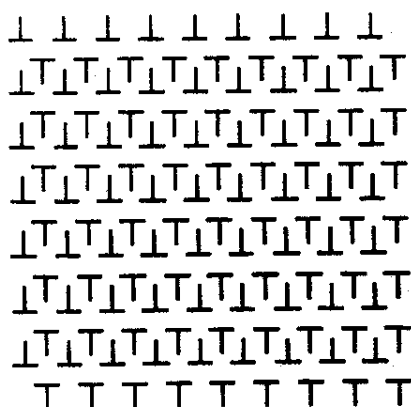


Рисунок 4.1

Напомним, что в материаловедении представления о дислокациях были введены, как известно, в 1934 г. Орована и Тейлором. Орован, Хаазен, Мотт и другие, развивая концепцию Беккера о взаимосвязи напряжений и скорости дислокаций, предложили следующее феноменологическое соотношение:

$$\dot{\epsilon} = \rho_m v b, \quad (4.1)$$

где $\dot{\epsilon}$ - скорость пластической деформации;
 ρ_m - плотность подвижных дислокаций; v - средняя

скорость дислокаций; b — величина вектора Бюргерса. Впоследствии уравнение (4.1) было положено в основу кинетического подхода к исследованию процессов пластической деформации.

Тейлор, придавая первостепенное значение взаимосвязи между напряжениями и плотностью дислокаций, ввел в рассмотрение понятие о равновесной дислокационной конфигурации, состоящей из чередующихся рядов положительных и отрицательных краевых дислокаций (рисунок 4.1). Равновесие так называемой **решетки Тейлора** контролируется взаимно экранирующими силами междислокационного взаимодействия (экранирование дальнедействующих напряжений). В 1914 г. Дарвин методами рентгеноструктурного анализа обнаружил существование упорядоченных структур дефектов как в металлических кристаллах, так и в минералах. Указанные структуры были названы **блочно-мозаичными**. Согласно Эвальду (1933 г.), они состоят из большого числа когерентных блоков, присоединенных друг к другу с небольшими разворотами и смещениями. Впоследствии экспериментальные наблюдения Дарвина и модельные представления Тейлора легли в основу концепции Кульман-Вильсдорф и Холта о **низкоэнергетических равновесных** дислокационных структурах.

Наиболее полное теоретическое описание процессов развитой пластической деформации (ПД) кристаллов дается на основе представлений об иерархически соподчиненном ансамбле дефектов и концепции структурных уровней деформации, предложенных Паниным в 1980 г. Такой подход придал методическую стройность анализу закономерностей деформации, эволюции дефектной структуры, формированию напряжения течения.

В предположении, что каждый структурный уровень i взаимосвязан с последующим уровнем $i+1$ как соответствующая ступень иерархической лестницы, удалось по поведению дефектов на микроуровне определить изменение формы образца в целом.

Иерархическое поведение дефектов при развитой ПД в первую очередь связано с наличием трех основных (глобальных) структурных уровней:

1. микроскопического ($a \ll l_1 \ll d_1$, d_1 - размер однородно-ориентированной области типа ячейки или фрагмента)
2. мезоскопического ($d_1 \ll l_2 \ll d_2$, d_2 - размер слабоориентированной области, например зерна)
3. макроскопического ($d_2 \ll l_3 \ll L$, L — характерный размер образца).

В таблице 4.1 приводится классификация структурных уровней деформации в соответствии с их характерными масштабами. В ней представлен список соответствующих структурных уровней в порядке возрастания их масштаба, указаны примерные величины протяженности или, иначе говоря, соответствующий масштаб и выполнено их классификационное разделение.

С ростом ПД (ϵ) превышение характерным масштабом $l(\epsilon)$ критического значения l_i , приводит к неустойчивости однородного распределения дефектов (в частности, гомогенного расположения дислокаций) на расстояниях больших l_i и к автолокализованному образованию носителя ПД на следующем, $(i + 1)$ -м структурном уровне. Так, при $l(\epsilon) > l_c$ активизируется **вакансионно-**

дислокационно-дисклинационный ансамбль (таблица 4.1), рассматриваемый как "высшее проявление коллективных эффектов в дефектной среде".

Таблица 4.1 Структурные уровни пластической деформации, их классификация и масштаб

Микроуровень	
1 Вакансия, атом	2 – 3 Å
2 Перегиб, порог	5 – 50 Å
3 Дислокация, уступ на границе зерна. Краудион.	100 Å
4 Группа дислокаций, сплетение, полоса скольжения, зона сдвига, дислокационная стенка, отдельные образования дисклинационного типа. Граница зерна. Доменные границы. Вакансионные, атомные и смешанные кластеры, сегрегации, частицы второй фазы	100 – 1000 Å
Мезоуровень	
5 Ячейка, дисклинационная петля и диполь, полоса в полосовой субструктуре, микрополоса сброса, микродвойники, группы дисклинаций. Пластинки и рейки мартенсита. Блок мозаики, фрагмент, субзерно	0,1 – 1,0 мкм
6 Дислокационный ансамбль. Участок зерна или монокристалла. Пакет реек мартенсита. Зона сдвига, система скольжения	1 – 20 мкм
7 Зерно. Дендрит. Зона сдвига, система скольжения	10 – 200 мкм
Макроуровень	
8 Группа зерен. Волокно композита	0,2 – 0,5 мкм
9 Участок образца	1 мм
10 Образец в целом	1 мм – 1 см

Понятие **дислокационного ансамбля** включает в себя микронные участки материала, характеризующиеся некоторой критической скалярной плотностью дислокаций, при которой:

а) силы взаимодействия между отдельными дислокациями $f^i = \frac{Gb^2\sqrt{\rho}}{2}$

соизмеримы с действием на них сил со стороны внешних напряжений $f^e = b\sigma^e$;

б) протяженность рассматриваемого участка превышает радиус экранирования упругого поля дислокаций.

В таких условиях дислокации образуют пространственные квазиравновесные конфигурации (низкоэнергетические дислокационные субструктуры). В этом случае причиной расслоения изначально однородного распределения дислокаций является их стремление к относительному минимуму полной энергии упругого поля дислокационной подсистемы. К основным элементам **субструктур** относятся: отдельные дислокации, дислокационные сгущения, границы различного типа и степени совершенства, дислокационные заряды, дислокационно-дисклинационные образования, совершенные границы и большеугловые границы. Как будет видно из дальнейшего, многие факторы пластической деформации и деформационного упрочнения определяются типом субструктуры, т. е. строением и свойствами дислокационного ансамбля, во многом независимо от того, каким путем эта субструктура возникла.

С ростом ПД объем, занимаемый субструктурой, отвечающей $(i + 1)$ -му уровню, будет плавно возрастать, в то время как объем субструктур, соответствующий уровням 1, 2, ..., i , — соответственно уменьшаться. Каждой стадии деформационного упрочнения соответствует определенный тип субструктур. Эти субструктуры возникают в начале стадии в недрах старой субструктуры, а к концу стадии, охватывают практически весь объем кристалла.

4.1.4 Классификация дислокационных субструктур

В настоящее время установлено, что все наблюдаемые типы дислокационных субструктур (ДДС) можно разделить на два больших класса: **неразориентированные** и **разориентированные** субструктуры.

В первых дискретные разориентировки могут быть, но они не превышают $0,5^\circ$. Среди таких неразориентированных дислокационных субструктур можно выделить: 1) — хаотическое распределение почти невзаимодействующих дислокаций (сюда же относятся однородные субструктуры типа невзаимодействующих диполей или сверхдислокаций); 2) — скопления дислокаций; 3) — однородная сетчатая субструктура; 4) — дислокационные клубки; 5) — неразориентированные ячейки; 7) — ячеисто-сетчатая неразориентированная субструктура.

К разориентированным субструктурам (дискретные разориентировки на субграницах превышают $0,5^\circ$) относятся: 6) — ячеистая с разориентировкой; 8) — ячеисто-сетчатая дислокационная структура с плавными разориентировками; 9) — полосовая субструктура; 10) — субструктура с многомерными дискретными и плавными разориентировками; 11) — фрагментированная субструктура.

Есть еще один класс субструктур, связанный с двойникованием и мартенситными превращениями. Начальная из этого класса субструктур — 12) — субструктура с расщепленными дислокациями — может быть отнесена к неразориентированным. Незавершенное двойникование либо мартенситное превращение приводят к 13) — субструктуре с многослойными дефектами упаковки. Они относятся к классу разориентированных. Также к разориентированным относятся 14) — двойниковая (одно-, дву- или многомерная) и 15) — субструктура с деформационным мартенситом.

На рисунке 4.2 представлено схематическое изображение классификационных субструктур (номера соответствуют нумерации субструктур в тексте).

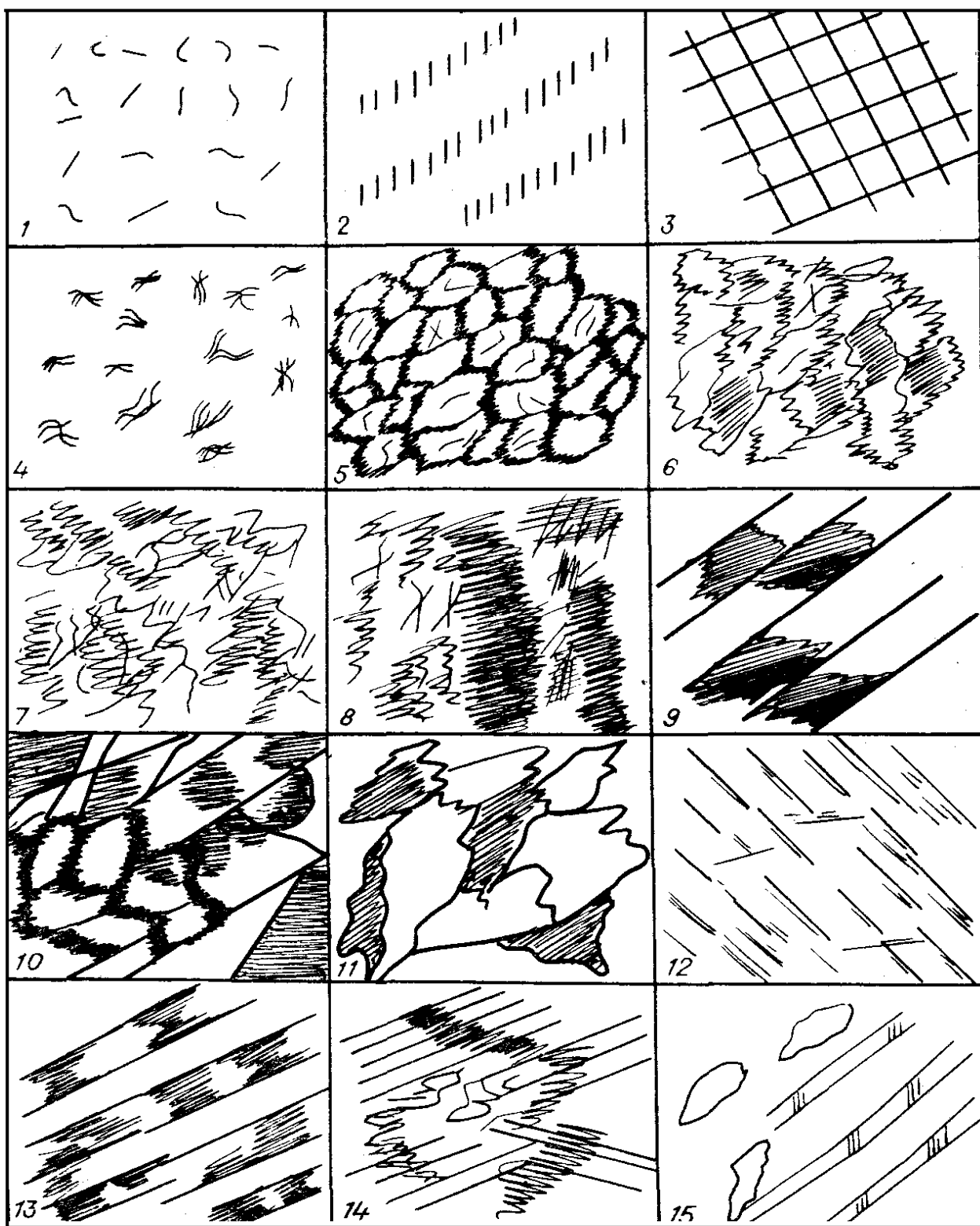


Рисунок 4.2

4.1.5 Эволюция микроструктур в процессе пластической деформации

Деформационные субструктуры, рассмотренные в приведенной выше классификации, по мере развития деформации возникают *нестучайным* образом, а в определенной последовательности, следуя друг за другом. Для случая дислокационных и дислокационно-дисклинационных субструктур основная схема превращений представлена на рисунке 4.3. Имеют место две основные цепочки превращений, одна из которых характерна для малолегированных или высоколегированных сплавов с большой энергией дефекта упаковки и упорядоченных сплавов, другая – для концентрированных сплавов с ближним порядком и низкой энергией дефекта упаковки.

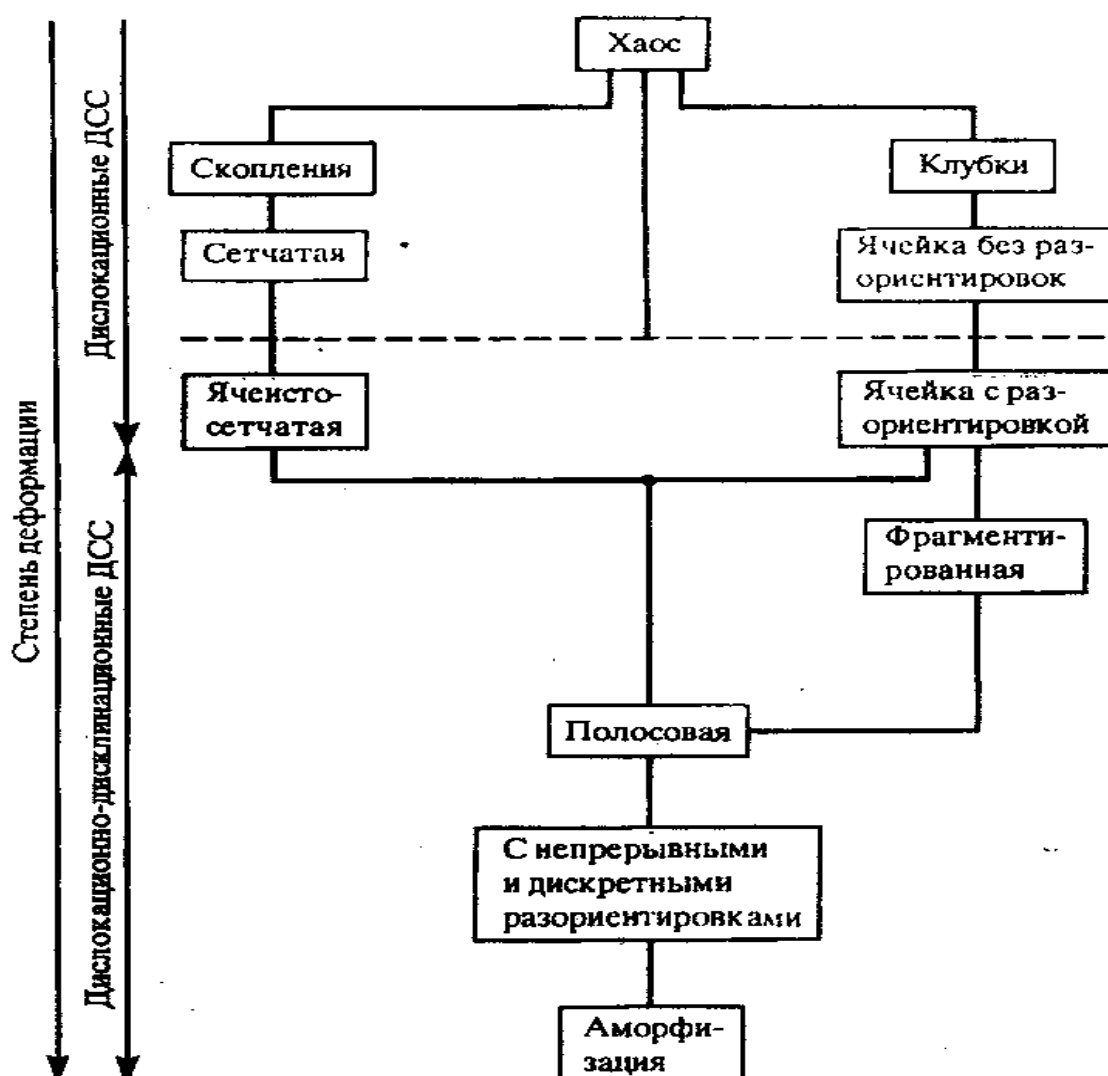


Рисунок 4.3

В настоящее время подробно исследовано превращение между неразориентированной и разориентированной дислокационными субструктурами, интерпретируемое при этом как *кинетический* фазовый переход I рода. Для обоснования правомерности такого рассмотрения приводятся следующие аргументы:

- дислокационная подсистема, являясь почти самостоятельной подсистемой деформированного материала, автономна;
- превращение происходит через двухфазную смесь двух субструктур, так как между участками полосовой и ячеистой субструктур существует граница раздела конечной толщины ($\sim 0,3$ мкм).

При достижении критической плотности дислокаций (ρ_c) экспериментально наблюдается резкое возрастание величины нового параметра дефектной подсистемы. Одновременно происходит переход к новой стадии пластической деформации. Для дислокационной подсистемы плотность дислокаций (ρ) рассматривается как внутренний контролирующий *параметр системы*. Параметрами превращения являются следующие экспериментально измеряемые величины:

- избыточная плотность дислокаций $\rho_{\pm}$,
- скорость ее накопления $d\rho_{\pm}/d\varepsilon$;
- для ячеистой субструктуры измеряют размер ячеек, ширину их стенок, плотность незамкнутых f и разориентированных R_{gr} субграниц, угол разориентировки ϕ через субграницу.

К количественным характеристикам разориентированных субструктур относятся кривизна-кручение решетки (κ), плотность изгибных экстинкционных контуров, плотность субграниц, плотность микротрещин.

Эксперименты показали, что с ростом (ρ) в ходе эволюции ячеистой и полосовой субструктур наблюдается следующая цепочка дислокационных превращений: хаос — клубки — ячейки без разориентировки — ячейки с разориентировкой — полосовая субструктура.

Процесс развития и формирования *ячеистой субструктуры* включает в себя последовательность микропревращений: увеличение плотности границ ячеек, рост ширины их стенок, уменьшение числа оборванных границ ячеек, рост плотности разориентированных границ ячеек и увеличение угла разориентировок на них. Локальная скалярная плотность дислокаций возрастает с деформацией в стенках ячеек и остается неизменной внутри ячеек. В целом ячеистая структура формируется в процессе замыкания границ ячеек, роста их плотности и ширины, появления разориентировок на них, а *полосовая структура* — в процессе появления и роста субграниц и кривизны-кручения решетки. *Микротрещины* возникают и следуют по границам разориентировок и зерен. Таким образом, каждая вновь образующаяся субструктура ("дефектная фаза") отличается от предшествующей количественными параметрами — параметрами порядка взаимного превращения пары субструктур.

При переходе от неразориентированных субструктур к разориентированной полосовой субструктуре параметры порядка — избыточная плотность дислокаций и локальная плотность субграниц — в зависимости от скалярной плот-

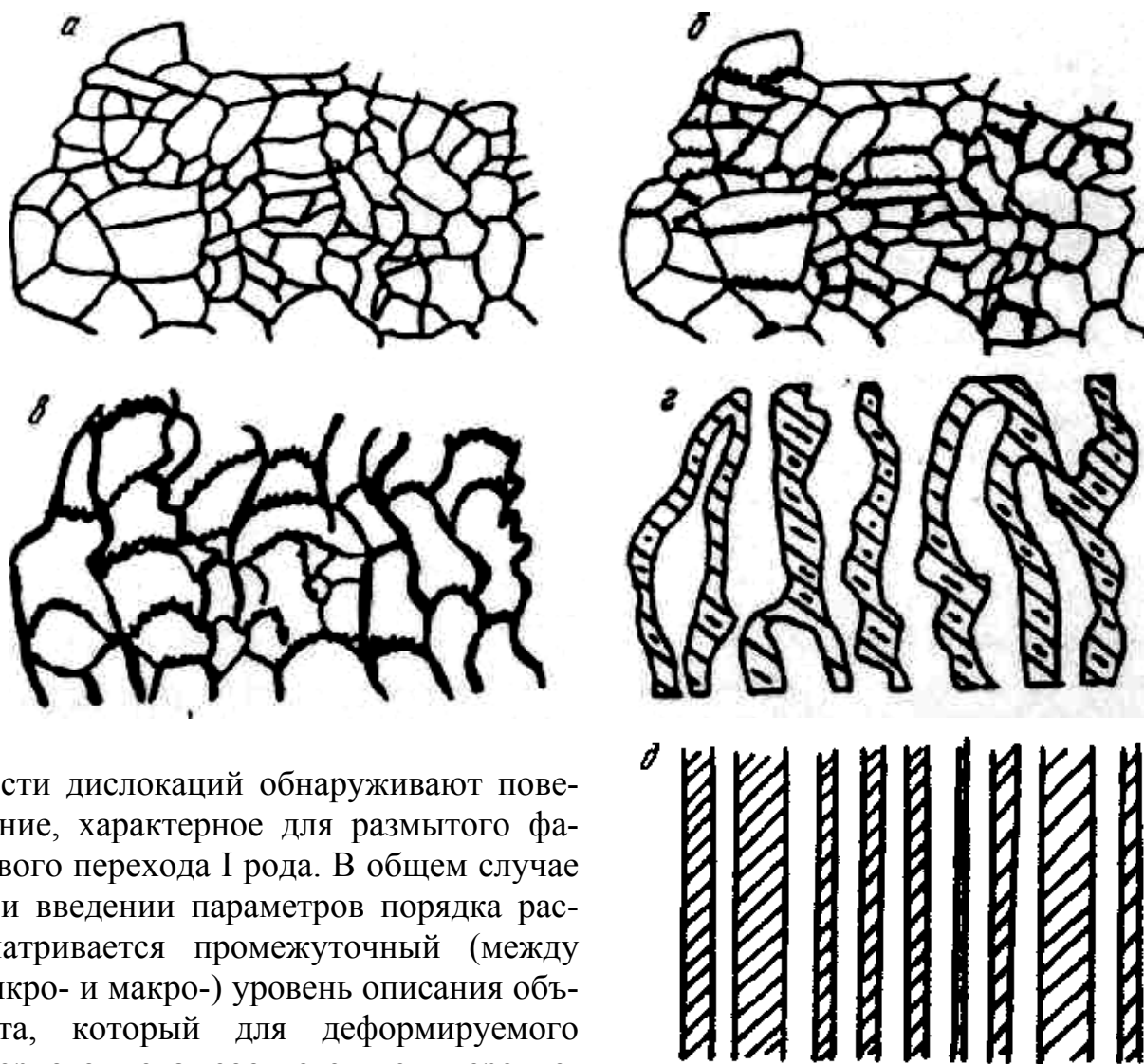


Рисунок 4.4

ности дислокаций обнаруживают поведение, характерное для размытого фазового перехода I рода. В общем случае при введении параметров порядка рассматривается промежуточный (между микро- и макро-) уровень описания объекта, который для деформируемого твердого тела соответствует усреднению по промежуточным пространственным и временным масштабам.

Особого внимания заслуживают вопросы, связанные с устойчивостью дислокационных субструктур, в частности регулярной равноосной структуры (ячеистой, фрагментированной и др.) в поле внешних воздействий, а также вопросы, касающиеся механизмов перехода от одной регулярной субструктуры к другой.

На рисунке 4.4 представлены *этапы структурной неустойчивости* при переходе от равноосной регулярной (а) к полосовой регулярной (д) структурам при прокатке вольфрама. Рассматривается эволюция равноосной ячеистой структуры с характерными тонкими и четкими границами ячеек размером 0,5-6 мкм (рисунок 4.4 а), сформированной в поликристаллическом вольфраме чистотой 99,96% при прокатке с заданной степенью обжатия $\varepsilon = 3,9$. Последовательное увеличение степени обжатия ($\varepsilon = 4,2; 5,3; 5,7; 6,2$) вызывает соответственно разрушение однонаправленных субграниц и появление участков локализации ПД (рисунок 4.4 б); выгибание в направлении прокатки следов рассыпавшихся границ "ряби" (рисунок 4.4 в); закручивание некоторых неразрушенных ячеек вокруг определенного центра; образование вытянутых в направлении

прокатки одиночных границ (рисунок 4.4 г) и, наконец, формирование вследствие перераспределения дефектов регулярной полосчатой структуры с четкими и тонкими границами шириной 0,5—0,6 мкм, вытянутыми в направлении прокатки на расстояние до 20—30 мкм (рисунок 4.4 д).

Рассмотренные микропревращения в металле протекают в сугубо неравновесных условиях. Поэтому естественно предположить, что выделенная дислокационная подсистема представляет собой *систему диссипативного типа*. Схематический анализ устойчивости локального равновесия в данной диссипативной системе показал, что вследствие локализации ПД переход от локально устойчивой ячеистой субструктуры к локально устойчивой полосовой субструктуре происходит через стадию "хаоса" или стадию структурной неустойчивости. Последняя осуществляется в некотором интервале степеней обжатия и приводит к локальной структурной неоднородности.

Таким образом, формирование дислокационных субструктур с ростом ПД, по-видимому, является *неравновесным стохастическим процессом*. Фазовые превращения в подсистеме вакансионно-дислокационно-дисклинационного ансамбля контролируются внутренним параметром системы — скалярной плотностью дислокаций. В связи с чем, вводится *шкала скалярной плотности дислокаций*, которая соответствует основной схеме превращения дислокационных и дислокационно-дисклинационных субструктур (рисунок 4.3). Скалярная плотность дислокаций определяет междислокационные расстояния и, следовательно, *упругую энергию дислокационного ансамбля* ΔU . Для упругого изотропного материала с плотностью дислокаций ρ плотность полной энергии ансамбля дислокаций записывается в виде:

$$W = \frac{\Delta U}{\Delta V} = \frac{\rho G b^2 f(v)}{4\pi} \ln \frac{R}{b} \quad (4.2)$$

где ΔV - изменение объема кристалла. Для краевых дислокаций $f_{кр}(v) = 1/(1 - v)$, а для винтовых $f_v = 1$. В формуле $f(v) = (1 - v/2) / (1 - v)$, что соответствует среднему значению между $f_{кр}$ и f_v .

Величина R связана со скалярной плотностью дислокаций соотношением $R = \frac{m}{\sqrt{\rho}}$ и, представляя собой, радиус экранирования упругого поля дислокаций, контролирует процесс формирования последовательности превращений низкоэнергетических субструктур. С увеличением плотности дислокаций уменьшаются междислокационные расстояния, что приводит к росту сил междислокационного взаимодействия f_i . При некоторой критической плотности дислокаций f_i достигает f_e , и в дислокационном ансамбле возникает "сильное" взаимодействие, приводящее к коллективным эффектам.

Для ГЦК - кристаллов величина R убывает в следующем порядке следования субструктур: - для хаотической субструктуры R порядка размера зерна; для ячеистой или ячеисто-сетчатой — порядка ширины стенок ячеек или раз-

мера ячеек; для полосовой — порядка междислокационного расстояния в субгранице. В соответствии с этим моменту возникновения того или иного типа субструктур (по крайней мере, неразориентированного типа) соответствует некоторое **критическое значение скалярной плотности дислокаций** ρ_c .

Как показывают многочисленные эксперименты, деформируемой системе энергетически более выгодно образовывать **ячеистые** субструктуры, чем идти по пути хаотического распределения дислокаций. Это соответствует **концепции низкоэнергетических субструктур**, согласно которой с ростом плотности дислокаций "их перестройка такова, что в каждой последующей дислокационной субструктуре экранирование дальнедействующих полей напряжений происходит все более эффективным образом. Вследствие этого каждой "дефектной фазе" соответствует относительный минимум запасенной энергии".

По мере перехода от одной **пороговой структуры** к другой растет степень удаленности системы от состояния термодинамического равновесия, усиливается нелинейность и открытость системы. В качестве **меры удаленности** может служить отношение $A = \frac{W}{W_s}$, где W — энергия, затраченная на деформацию; W_s — энергия, связанная со скалярной плотностью дислокаций в дислокационном ансамбле. Как уже отмечалось выше, $W_s = \frac{\Delta U}{\Delta V}$, где ΔU — упругая энергия дислокационного ансамбля, ΔV — изменение объема кристалла.

Важным свойством открытых нелинейных систем является их способность к самоуправлению переходов от упорядочения к состоянию хаоса (гибель структуры) и выходу из хаоса (самоорганизация новых более устойчивых структур). Этим переходам соответствует иерархия точек бифуркаций, отвечающая иерархии все более сложных структур. Определяющую роль в этой иерархии играет время и синергетический принцип подчинения (см. также раздел 3.2.1), заключающийся в том, что в точках неустойчивости системы множество переменных подчиняется одной (или нескольким) переменной, называемой параметром порядка. Переход от одной точки бифуркации к другой может быть описан бифуркационной диаграммой, показывающей связь переменной X с управляющим параметром (см. также раздел 3.1.3).

При описании эволюции дислокационных субструктур в качестве **управляющего параметра** следует принимать параметр $A = \frac{W}{W_s}$, характеризующий меру удаленности системы от термодинамического равновесия. В качестве **переменной** X следует взять отношение скалярной плотности подвижных дислокаций ρ_s к критической ρ_c для дислокационного ансамбля: $X = \frac{\rho_s}{\rho_c}$.

Для каждой пороговой субструктуры характерна своя критическая плотность дислокаций ρ_s^* , которая достигается при пороговых значениях управ-

ляющего параметра $A = A^*$. Можно выделить **три пороговых значения плотности дислокаций**, отвечающих различным переходам:

- от клубковой дислокационной структуры к ячеистой, $\rho = 10^{10} \text{ см}^{-2}$;
- от ячеистой структуры к полосовой, $\rho = 10^{12} \text{ см}^{-2}$;
- от полосовой структуры к фрагментированной, $\rho = 10^{14} \text{ см}^{-2}$.

В последнем случае речь идет о плотности дислокаций в субграницах. Фрагментированная структура характеризуется наличием сдвиgoneустойчивых фаз на границах фрагментов. В этом случае структуру можно представить в виде чередующихся слоев с квазиаморфной и кристаллографической структурами. Фрагментированная структура является предвестником перехода к новому типу лидирующего дефекта - микронесплошностям.

Таким образом, спонтанная перестройка дислокационных субструктур подразумевает **спонтанную смену лидера-дефекта**, ответственного за диссипацию энергии. При переходе к ячеистой структуре лидером - дефектом являются **дислокации**. С другой стороны, переход от ячеистой структуры к полосовой контролируется переходом к лидеру — **дисклинациям**, а переход к фрагментированным структурам — **к микронесплошностям**, или некристаллографическим **микротрещинам**. Последние формируются в результате активизации сдвиgoneустойчивых фаз на субграницах. Поэтому смена типа дислокационных субструктур, сопровождающаяся сменой лидера-дефекта, представляет собой неравновесный фазовый переход в точках структурной неустойчивости.

Новыми модами ПД при **больших степенях** становятся крупномасштабные сдвиги и повороты внутренних областей кристалла, формирующие **мезоструктуру** диссипативного типа. Мезодефекты включают в себя сотни и тысячи дислокаций и относятся к промежуточному мезоскопическому масштабному уровню. Для большинства деформируемых металлов при переходе от низкоэнергетических субструктур ячеистого типа к широкомасштабным диссипативным мезоструктурам характерно образование дислокационно-дисклинационных субструктур полосового типа.

Полосовые структуры образуются при высокой скалярной плотности дислокаций в условиях развитой пластической деформации.

К основным элементам **полосовой** субструктуры относятся: 1) системы параллельных субграниц; 2) оборванные субграницы; 3) петлеобразные конфигурации дисклинационного типа; 4) непрерывно распределенные дислокации одного знака. Внутри микрополосы между субграницами распределены избыточные дислокации, которые создают изгиб, кручение или более сложную деформацию.

Образование полосовой субструктуры происходит вследствие: 1) перерастания системы полос скольжения от границ зерен поликристаллов; 2) зарождения и развития петлеобразных субграниц дисклинационного типа в монокристаллах; 3) вытягивания ячеек в одном направлении и появления разориентировок в ячеистой субструктуре.

4.1.6 Ротационные процессы и дисклинации

В настоящее время одной из основных причин **ротационной неустойчивости** кристаллов считают коллективное движение дислокаций. В этом случае ротации в пластически деформируемых кристаллах возникают под действием крутящих моментов или как следствие дислокационной неустойчивости.

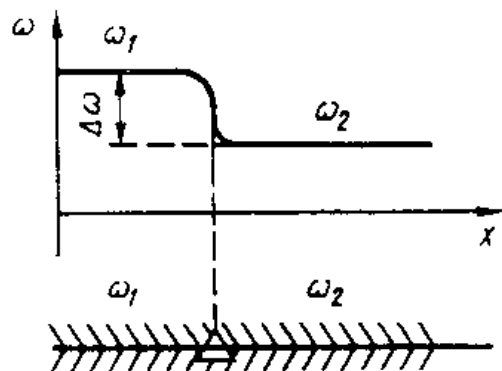


Рисунок 4.5

Неоднородность полей поворотов кристаллической решетки (как и в случае сдвигов) имеет дискретный характер. Их развитие контролируют элементарные линейные дефекты — **дисклинации**. На рисунке 4.5 представлено введение дисклинаций как линейного скачка поля поворота. Вектор Франка $\phi = \omega_1 - \omega_2$.

Характерный масштаб дисклинаций (например, длина отрезка дисклинации между точками закреплений или среднее расстояние между дефектами) изменяется от микромасштаба обычных решеточных дислокаций $((1 - 5) \cdot 10^{-9} \text{ м})$ до макромасштаба образца $(10^{-3} - 10^{-2} \text{ м})$. Т.е. дисклинации "как квазичастицы и источники далекодействующих напряжений" играют важную роль практически на всех масштабных уровнях ПД.

Известно, что в процессе ПД дислокационная структура изменяется как в объеме зерен, так и на межзеренных границах. В последнем случае на изломах и стыках границ вследствие налипания и зарождения решеточных дислокаций возникают невязки разориентировок. Согласно современным представлениям, стыковые дисклинации, образующиеся на изломах и стыках большеугловых границ, являются источниками мощных внутренних напряжений.

На рисунке 4.6 а - в схематически представлен процесс формирования в объеме деформируемого кристалла трехмерной сетки линейных источников внутренних напряжений, активизирующих коллективные формы движения близкорасположенных дислокаций. При достижении деформацией порогового значения происходит зарождение на стыковых дисклинациях оборванных дислокационных границ. Затем за счет перемещения части невязки разориентировок со стыка в объем зерна (рисунок 4.6 г) происходит релаксация близкодействующих напряжений на стыковых дисклинациях. С ростом деформации оборванные дислокационные границы, пересекаясь друг с другом, разбивают кристалл на сильноразориентированные (на десятки градусов) микрофрагменты (рисунок 4.6 д).

Таким образом, на рисунке 4.6 показаны основные этапы процесса развития пластической деформации: *а* - скольжение дислокаций под действием внешних напряжений; *б* - образование стыковых дисклинаций (темные треугольники) и несамосогласованных плоских распределений дислокаций; *в* - действие аккомодационного скольжения (густая штриховка); *г* - образование

оборванных границ - начальный этап фрагментации; δ - фрагментированное зерно.

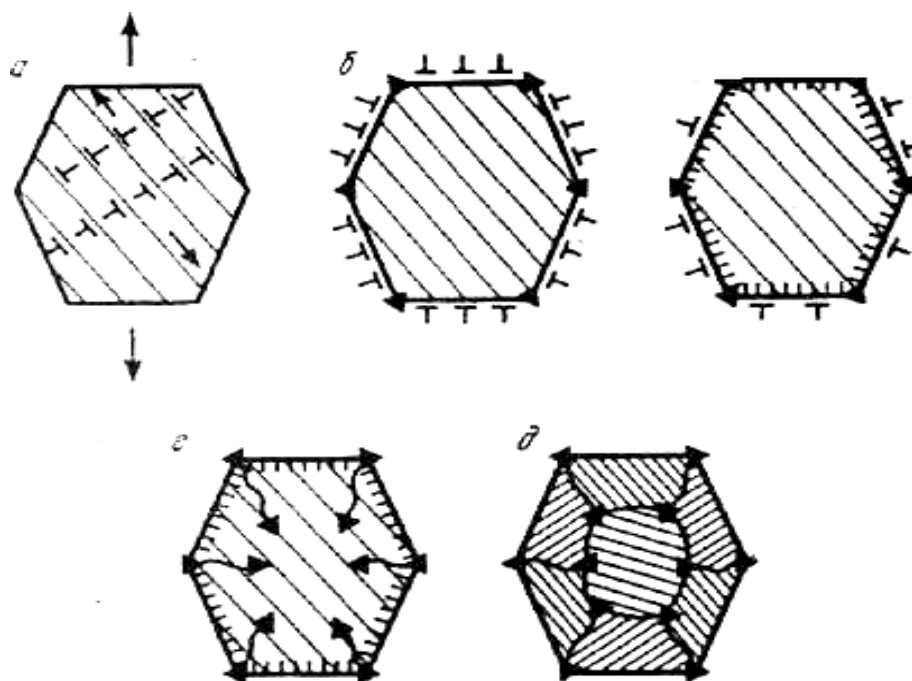


Рисунок 4.6

Фрагментированная структура деформируемого кристалла, заполняя его объем, вместе с тем претерпевает следующие изменения: границы фрагментов сужаются, становясь прямолинейными; плотность дислокаций как внутри фрагментов, так и в среднем, но всему кристаллу снижается до значений, характерных для отожженного кристалла; фрагменты - вытягиваются или сжимаются в направлении главных осей деформации, при этом их поперечные размеры (0,2—0,3 мкм) меняются незначительно по сравнению с относительным изменением размеров деформируемого образца.

Следовательно, по мере формирования достаточно совершенной фрагментированной структуры активизируются дополнительные моды пластичности — мощные ротационно-сдвиговые неустойчивости и сбросы. Дисклинации создают вокруг себя дальнodelствующиe упругие поля $\sigma \sim G\omega$ (ω - угол разворота слоя материала относительно окружающего объема). Взаимодействие между ними может вызывать коллективные эффекты, например формирование ротационного фронта, отделяющего объем с ротационной структурой от остального объема.

Существует дисклинационная модель образования ротационных полос типа полос сброса. В ней развитие полос по сечению деформируемого образца рассматривается как быстрый лавинообразный процесс, связанный с перемещением фронта, отделяющего незавершенный поворот от остального объема материала. Владимировым было отмечено, что между процессами образования и изменения ротационных структур и фазовыми переходами с образованием зародышей новой фазы и их развитием за счет движения межфазных границ су-

существует достаточно глубокая аналогия. В частности, ротационная "фаза" имеет собственную, а ротационный фронт — поверхностную энергию.

Ротационная пластичность может неоднозначно сказываться на характере разрушения деформируемых кристаллов. Так, для монокристаллов с ОЦК-решеткой, например ванадийтанталовых сплавов, ротационная пластичность может оказывать пластифицирующий эффект. Однако в случае значительной локализации ПД ротации способны вызывать охрупчивание монокристаллов. Действительно, упомянутые выше межфрагментарные границы являются границами межзеренного типа, стыки которых представляют собой источники значительных напряжений. В стыках фрагментов зарождаются хрупкие, клиновидные микронесплошности размером - $1000 \text{ \AA}$, раскрывающиеся вдоль межфрагментарных границ.

Таким образом, при анализе процессов упрочнения и разрушения необходимо выделять **пороговые субструктуры**. Так, например, создание ячеистой структуры, вызывающее повышение предела текучести без значительного снижения вязкости разрушения, снижение порога хладноломкости, повышение ударной вязкости, предпочтительно при разработке методом упрочнения материалов. С другой стороны, существование после тех или иных обработок фрагментированных структур указывает на наличие дефектов, снижающих работоспособность материалов.

Из представленного анализа можно сделать вывод, что закономерности образования в процессе ПД низкоэнергетических субструктур следует рассматривать как с позиций их организации при достижении критической плотности дислокаций, так и с точки зрения самоорганизации диссипативных структур в точках бифуркационной неустойчивости системы.

В первом случае движущей силой процесса является стремление системы в виде пластически деформируемого твердого тела к локальному минимуму свободной энергии. При этом для большого числа сплавов, независимо от внутреннего строения их кристаллической решетки и внешних условий нагружения, последовательность образующихся субструктур дефектов практически детерминирована (см. рисунок 4.3). Во втором случае процесс образования той или иной доминирующей диссипативной структуры контролируется стремлением системы к минимуму производства энтропии. При этом особо важную роль в областях бифуркационной неустойчивости системы приобретают внутренние термодинамические флуктуации и внешние шумы, обуславливающие стохастические эффекты. Рассмотренные в данном разделе субструктуры дефектов представляют собой структуры диссипативного типа. Их возникновение в процессе ПД следует объяснять на основе синергетических принципов.

4.1.7 Контрольные вопросы к разделу 4.1

- 1 Что понимают под пластической деформацией? Почему с ростом деформации предположение об автономном поведении отдельных дефектов становится неприемлемым?
- 2 Какие состояния в кристалле названы атом-вакансионными? Что они объясняют?
- 3 Почему промежуточные структуры в конечном состоянии оказываются метастабильными? Какую роль они играют в ходе движения сильно возбужденного кристалла к равновесию? Почему данный процесс является сугубо диссипативным?
- 4 Назовите принципиальный недостаток существующих теорий физики и механики деформируемого твердого тела. На основе каких законов должна рассматриваться пластическая деформация?
- 5 В каком случае деформация кристалла происходит в режиме сверхпластичности? С чем связана высокая пластичность металлов с плотноупакованными структурами? В каком случае кристалл хрупок? Приведите примеры.
- 6 Какое уравнение было положено в основу кинетического подхода к исследованию процессов пластической деформации?
- 7 Дайте понятие о равновесной дислокационной конфигурации. Чем контролируется равновесие так называемой решетки Тейлора? Какие структуры были названы блочно-мозаичными?
- 8 С чем связано иерархическое поведение дефектов при развитой пластической деформации? Перечислите структурные уровни пластической деформации, их классификацию и масштаб.
- 9 Что включает в себя понятие дислокационного ансамбля? Перечислите, что относится к основным элементам субструктур?
- 10 На какие классы можно разделить все наблюдаемые типы дислокационных субструктур (ДДС)?
- 11 Перечислите субструктуры для каждого класса и приведите схематическое изображение классификационных субструктур.
- 12 Приведите схему эволюции микроструктур в процессе деформации.
- 13 Почему превращение между неразориентированной и разориентированной дислокационными субструктурами рассматривают как кинетический фазовый переход I рода? Приведите аргументы для обоснования правомерности такого рассмотрения.
- 14 Что является внутренним контролирующим параметром системы для дислокационной подсистемы?
- 15 Какие экспериментально измеряемые величины являются параметрами превращения?

- 16 Перечислите количественные характеристики разориентированных субструктур. Какая цепочка дислокационных превращений наблюдается с ростом плотности дислокаций (ρ) в ходе эволюции ячеистой и полосовой субструктур?
- 17 Приведите в качестве примера схему этапов структурной неустойчивости при переходе от равноосной регулярной к полосовой регулярной структурам при прокатке вольфрама.
- 18 Как определяется плотность полной энергии ансамбля дислокаций для упругого изотропного материала с плотностью дислокаций ρ ?
- 19 Почему деформируемой системе энергетически более выгодно образовывать ячеистые субструктуры?
- 20 Что может служить степенью удаленности системы от состояния термодинамического равновесия?
- 21 Какой параметр следует принимать в качестве управляющего параметра при описании эволюции дислокационных субструктур?
- 22 Что принимают в качестве переменной X при описании эволюции дислокационных субструктур? Назовите три пороговых значения плотности дислокаций, отвечающих различным переходам.
- 23 Какие лидеры-дефекты, ответственные за диссипацию энергии, вы знаете? Что является лидером - дефектом при переходе к ячеистой структуре? полосовой? фрагментированной?
- 24 Почему смена типа дислокационных субструктур, сопровождающаяся сменой лидера-дефекта, представляет собой неравновесный фазовый переход в точках структурной неустойчивости?
- 25 При каких условиях образуются полосовые структуры? Назовите основные элементы полосовой субструктуры. Вследствие чего происходит образование полосовой субструктуры?
- 26 Что считают одной из основных причин ротационной неустойчивости кристаллов в настоящее время?
- 27 В результате чего возникают ротации в пластически деформируемых кристаллах? Что называют дисклинациями? Как изменяется характерный масштаб дисклинаций?
- 28 Изобразите на рисунке основные этапы процесса развития пластической деформации и образования фрагментированной структуры. В чем сущность дисклинационной модели образования ротационных полос?
- 29 Как может сказываться ротационная пластичность на характер разрушения деформируемых кристаллов? С каких позиций следует рассматривать закономерности образования в процессе пластической деформации низкоэнергетических субструктур?

4.2 Эффекты неустойчивости пластической деформации на макро-уровне

Как указывалось в предыдущем разделе, в результате коллективного взаимодействия микродефектов на различных структурных уровнях пластической деформации в локальных объемах металла возможно образование динамических диссипативных структур микродефектов различных типов. Спонтанная самоорганизация микроструктуры относится к самым ярким и очевидным проявлениям динамических свойств неживой материи. Именно диссипативные структуры, определяя состояние системы в неравновесных условиях, в конечном счете, контролируют весь комплекс механических свойств материала с заданной исходной структурой.

Нелинейное поведение системы является одним из показателей ее неустойчивости. При рассмотрении системы в виде деформируемого твердого тела, находящейся в равновесном состоянии, должна существовать "жесткая связь" между напряжением и деформацией. Такая связь характерна для упругой области кривой деформации.

Однако уже к концу XIX века на многих материалах, в том числе и металлах, были открыты эффекты существенной нелинейности при малых деформациях. К ним относятся явления упругого последействия при разгрузке, температурное последействие, остаточная микродеформация, ползучесть, зуб текучести, прерывистость пластической деформации и другие.

4.2.1 Эффект упругого последействия при разгрузке и температурный эффект деформации

К 90-м годам XIX века было много дискуссий относительно вида нелинейной зависимости между напряжением и деформацией для различных тел, в том числе и металлов. Однако, как отметил Белл, существовало уже немало экспериментальных доказательств того, что нелинейность при малых деформациях является воспроизводимым фактором.

Эффект упругого последействия заключается в том, что при внезапной разгрузке образца он мгновенно сокращается на величину упругой деформации $\varepsilon' = \sigma/E$, достигнутую при нагрузке, а затем медленно сокращается. В данном случае кривая разгрузки (рисунок 4.7, справа) является опрокинутым зеркальным отображением кривой нагрузки (рисунок 4.7, слева). Такое поведение характерно для различных металлов и сплавов, в том числе и для аморфных сплавов. Этот эффект можно трактовать как проявление "памяти" материала о воздействиях на него.

Развитие микродеформаций в упругой области приводит к нарушению линейной связи между напряжением и деформацией, определяемой законом Гука. Это указывает на нелинейное поведение подсистемы в линейной в макромасштабе системе. В деформируемом твердом теле в процессе эволюции сис-

темы формируются открытые подсистемы и самоорганизуются диссипативные структуры, определяющие нелинейное поведение системы.

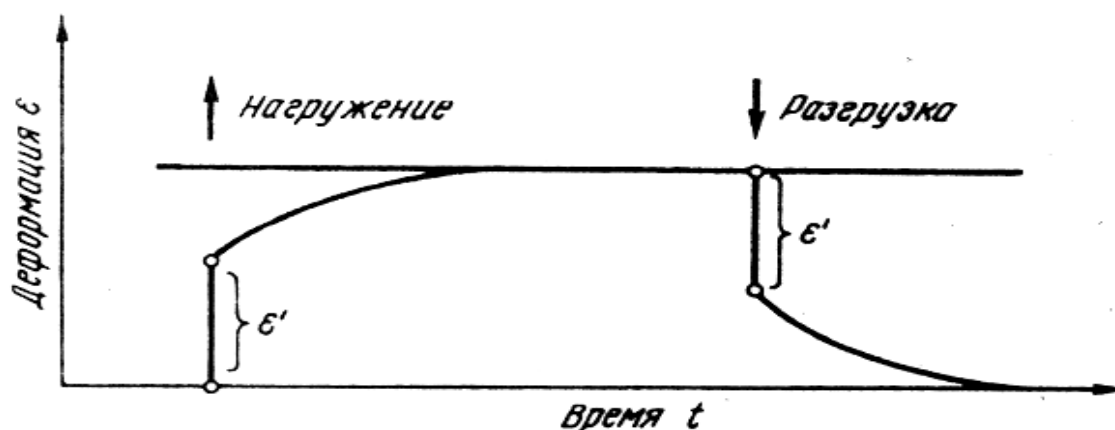


Рисунок 4.7

Как уже отмечалось, открытую систему в пределе, когда потоки энергии или вещества стремятся к нулю, можно представить как *замкнутую*. Деформируемое тело в целом является замкнутой системой, для которой справедливы соответствующие начала термодинамики. Однако даже на стадии упругой деформации, вследствие существенного различия характерных времен релаксации энергии τ_e и импульса $\tau_p \ll \tau_e$ атомов и структурных элементов деформируемого тела, избыточная энергия внешнего воздействия кумулируется в локализованных сильно неравновесных областях. Последние образуют открытую, способную к самоорганизации подсистему.

Проявление нелинейного поведения подсистем затрудняет определение физического предела упругости, поэтому закон Гука считают всего лишь приближением. Однако и в этом случае можно ввести представление о *физическом* пределе упругости как о пороговом напряжении, отвечающем неустойчивости деформации подсистемы, сопровождаемой сменой диссипативных структур.

Одним из признаков смены типа диссипативных структур является *аномалия* температурного эффекта деформации — снижение температуры вместо ее повышения. Так, эксперименты по растяжению резиновых труб при комнатной температуре показали, что их температура падала ниже комнатной в течение 60 с при растяжении со скоростью 60 мм/мин. Отмечено, что этот эффект проявляется на стали и на других сплавах. Исследования на стали показали, что нагрев и охлаждение образца при его деформировании в большей мере связаны со скоростью диссипации энергии, чем с текучестью.

Си разработал математические основы для анализа термомеханических процессов в твердых телах на основе введения ряда теорем для функции плотности изоэнергии с учетом необратимости и неравновесности процессов пластической деформации. Их проявление при деформации твердых тел обуславливает зависимость механических свойств от времени. Отмечено, что даже если создать условия псевдоизоляции системы и минимизировать ступеньки в уве-

личении механической нагрузки, то все равно элементы твердого тела будут взаимодействовать друг с другом и будет происходить обмен энергией, что вызывает локальный экспорт энтропии.

В основе классификации явлений пластической неустойчивости лежит следующее соотношение между напряжениями и пластической деформацией:

$$d\sigma = h \cdot d\varepsilon + S \cdot d(\ln \dot{\varepsilon}) \quad (4.3)$$

где $\dot{\varepsilon}$ - скорость пластической деформации; $h = (\partial\sigma/\partial\varepsilon)_{\dot{\varepsilon}}$ и

$S = (\partial\sigma/\partial(\ln\dot{\varepsilon}))_{\dot{\varepsilon}}$ - постоянные материала, в общем случае зависящие от напряжений и скорости деформации. Уравнение (4.3) описывает локальное напряженно-деформированное состояние, которое идентифицируется с глобальными свойствами в том случае, если деформация образца однородна по всей его длине.

Явления пластической неустойчивости подразделяются на неустойчивость h -типа, для которой чувствительность к изменению скорости деформации (скоростная чувствительность) $S > 0$, а скорость деформационного упрочнения $h < \sigma$, и неустойчивость S -типа, для которой $S < 0$, $h > \sigma$. В общем случае в уравнении (4.3) учитывается зависимость от температуры

$$d\sigma = h \cdot d\varepsilon + S \cdot d(\ln \dot{\varepsilon}) + w \cdot dT \quad (4.4)$$

где $w = (\partial\sigma/\partial T)_{\varepsilon, \dot{\varepsilon}}$. Поэтому при наличии тепловых эффектов рассматривают так называемую T - неустойчивость.

Условия h - неустойчивости соответствуют условиям шейкообразования. Кроме того, h - неустойчивость возникает на ранних стадиях пластической деформации, когда увеличение плотности подвижных дислокаций может привести к отрицательным значениям h . При этом наблюдается образование укрупненных "грубых" полос скольжения.

Неустойчивости S -типа реализуются в процессе динамического деформационного старения в виде эффектов прерывистой текучести (эффекта Портевина—Ле-Шателье, распространения полос Людерса—Чернова и др.). Нелинейное поведение деформируемого твердого тела нашло свое физическое объяснение лишь в последние годы с развитием подходов синергетики.

4.2.2 Волны пластической деформации. Эффект Чернова - Людерса

Наиболее общим проявлением нелинейности пластической деформации служит **волновой характер ее развития**. Физика волнового характера пластического течения, развитая Паниным и др. обусловлена особенностями вовлечения в деформацию множественного скольжения, являющегося аккомодацион-

ным процессом. Поэтому этот эффект на макроуровне проявляется наиболее четко на стадии деформационного упрочнения.

Возникновение волн деформации в условиях множественного скольжения связано с тем, что в любой точке деформируемого твердого тела и заданный момент времени протекает только один вид скольжения — либо первичное, - либо вторичное (аккомодационное). Их чередование и обуславливает образование волны сдвиговой деформации.

Экспериментально показано, что аккомодационное множественное скольжение зарождается только на границах разделов, включая боковую поверхность образца, так что для корректного описания пластической деформации твердого тела необходим учет зависящих от *времени* релаксационных потоков деформационных дефектов.

Процесс пластической деформации твердого тела рассматривается в виде коррелированной последовательности элементарных актов разрядки концентраторов напряжений, сопровождающихся рождением дефектов. Каждый акт разрядки (элементарный акт пластичности) ускоряет срабатывание соседних концентраторов. В целом процесс пластической деформации представляется в виде распространения фронта волны активизации концентраторов напряжений. Поскольку в основе модели лежит элементарный акт релаксации напряжений, введен термин "релаксационные волны", которые в данном случае рассматриваются как диссипативная пространственно-временная структура.

В процессе формирования релаксационной волны разгрузка каких-либо зерен поликристаллов вызывает, с одной стороны, рост напряжений на близко расположенных концентраторах, а с другой стороны, снижает общий уровень напряжений во всем объеме деформируемого образца. Установлена линейная корреляция между длиной волны пластичности и размером зерна и высказано предположение, что в материалах с размером зерна меньшим 4,5 мкм релаксационные волны возникать не могут. Поскольку релаксационные волны пластичности наблюдались также на поверхности образцов из аморфного сплава $\text{Fe}_{40}\text{Ni}_{40}\text{B}_{20}$, отмечено, что волновой характер распространения пластической деформации достаточно универсален.

Общие условия возникновения волн релаксации в деформируемом твердом теле следующие:

- 1) система должна быть открытой и далекой от равновесия;
- 2) в системе должны наблюдаться два типа взаимодействия — автокаталитическое и демпфирующее. При пластическом деформировании автокаталитичность достигается путем последовательного включения концентратора напряжения при распространении волны и последующего слияния микросдвигов, приводящего к образованию макропластической полосы, способной к росту. Демпфирующий фактор определяется тем, что при релаксации напряжений зона материала вблизи концентратора разгружается и снижается запас упругой энергии;

- 3) радиус действия автокаталитического фактора должен быть меньше, чем демпфирующего. Это значит, что волна распространяется за счет подвода

энергии извне. Одним из проявлений волнового характера пластической деформации, наблюдаемых визуально, является зуб и площадка текучести на кривой растяжения, а также прерывистость кривых деформации (эффект Портеви-на-Ле-Шателье).

Еще в 1860 г. Людерс, а затем независимо от него Чернов обнаружили, что при растяжении образцов железа и стали на их поверхности образуются специфические фигуры. Чернов связал их возникновение с волнами упругих напряжений. Он обнаружил, что предварительно отполированные образцы становятся матовыми, и пришел к заключению, что мягкая литая сталь обладает драгоценным свойством — способностью фиксировать на своей полированной поверхности рисунок волн упругих напряжений, если усилия превосходят предел упругости.

На рисунке 4.8 воспроизводятся оригинальные рисунки из сообщения Чернова. Показаны линии деформации, выявленные Д. К. Черновым при резке листа и пробивании отверстия. На рисунке 4.8 а показан лист, из которого вырезали образцы. На рисунке 4.8 б изображены линии деформации после растяжения гладкого полированного образца. Рисунок 4.8 в - е показывает то же, после растяжения гладкого полированного образца с отверстием. На рисунке 4.8 е точками обозначены места, где волны напряжений интерферируют.

Было обращено внимание на то, что одни линии деформации вогнутые, а другие — выпуклые. Чернов показал, что вогнутые линии связаны с локальными впадинами на поверхности, образующимися в результате действия растягивающих волн напряжений, а выпуклые (локальное выпучивание) — с действием сжимающих напряжений.

Теоретически неустойчивость пластического течения с учетом его пространственной неоднородности исследуется главным образом в рамках кинетического подхода, т.е. с точки зрения нелинейной кинетики дислокаций. При этом плотность подвижных дислокаций $\rho = \rho_m(x, t)$ описывается уравнением:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} - D \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2} = k_1 \rho - k_2 \rho^2 \quad (4.5)$$

в котором диффузионный член $-D \partial^2 \rho / \partial x^2$ контролирует неоднородность распределения плотности вдоль пространственной координаты x ; k_1 и k_2 — кинетические коэффициенты. Первый член в правой части (4.5) описывает процесс размножения дислокаций за счет двойного поперечного скольжения, второй — аннигиляцию дислокаций противоположного знака.

Уравнение (4.5) имеет частное решение вида

$$\rho = \exp(-2v/\sqrt{6}) [C + \exp(-v/\sqrt{6})]^2 \quad (4.6)$$

где $\rho = \rho k_2 / k_1$;

$v = x - \omega t$;

$x = \sqrt{k_1 / D}$;

$t = k_1 t$;

c — константа.

Это решение описывает *бегущую волну* пластического течения со скоростью ω с экспоненциальным характером спада при $\xi \rightarrow \infty$, что по теоретическим оценкам соответствует расширению полосы Чернова—Людерса. В современной трактовке перемещение полос Чернова - Людерса по поверхности деформируемого образца рассматривается как *автоволновой процесс*.

Была экспериментально изучена *эволюция полей деформаций* при распространении полосы Чернова—Людерса по поверхности образца из малоуглеродистой стали при его растяжении. Для измерения в каждой точке деформируемого образца модулей векторов смещений $|r|$ и их компонент $u_x = u_y$, ориентированных соответственно параллельно и перпендикулярно направлению приложения нагрузки, использовали метод лазерной спекл-интерферометрии. Анализ

полей смещения позволил предложить оригинальную модель образования полос Чернова - Людерса. В соответствии с этой моделью полоса формируется в результате распространения аккомодирующих поворотов по образцу в тот момент, когда микросдвиги охватили его полностью.

Ротационные процессы существенно изменяют состояние поверхности деформируемого образца, а, следовательно, и условия рассеяния света на ней. Подтверждением связи распространения полос Чернова—Людерса с волновой природой пластической деформации является совпадение скоростей распространения этих волн и фронта полосы. Последнюю измеряют путем регистрации распространения полосы на видеопленку.

Развита модель распространения фронта Чернова-Людерса на площадке текучести, основанная на рассмотрении локализованного и эстафетного характера распространения течения в пространстве и автоколебательного режима течения во времени. Важным ре-

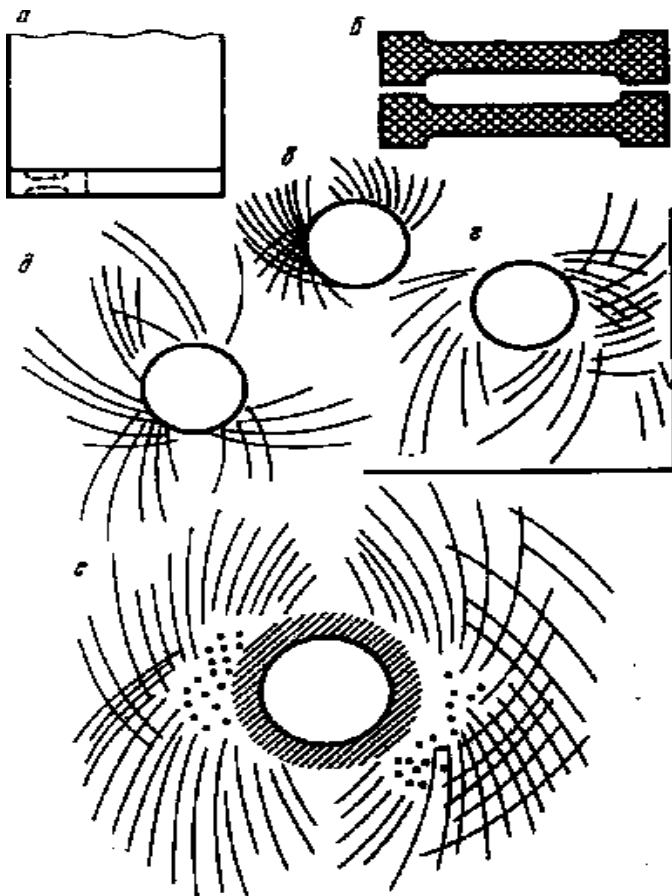


Рисунок 4 8

результатом этого анализа явилось установление возникновения сложного напряженного состояния на фронте текучести в результате развития синглетного скольжения. Это обеспечивает в локализованной полосе скольжения условия для кооперативного взаимодействия двух процессов деформации — трансляции синглетного скольжения и ротации. Процессы на мезоуровне определяют характер потери макропластической неустойчивости при образовании шейки.

Терентьевым было обращено внимание на то, что образованию площадки текучести предшествует образование пластически деформированного приповерхностного слоя размером порядка одного—трех размеров зерна. Распространение автоволн пластической деформации возможно при совместном развитии процессов неустойчивости, вызывающих резкую активизацию пластического течения и упрочнения, способствующего демпфированию течения и возврату. При этом деформируемый материал следует рассматривать как активную среду. В простейшем случае скорость пластической деформации контролируется, с одной стороны, изменением плотности подвижных дислокаций ρ вследствие размножения аннигиляции, а с другой — обратными напряжениями σ_i , (функция σ_i конкретизируется той или иной моделью упрочнения). Тогда система управляющих уравнений имеет следующий вид:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = Q(\rho, \sigma - \sigma_i) + D \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2} \quad (4.7)$$

$$\frac{\partial \sigma_i}{\partial t} = - \frac{\sigma_i - \bar{\sigma}_i(\rho)}{\tau} \quad (4.8)$$

где функция Q описывает процессы производства—аннигиляции подвижных дислокаций;

$\bar{\sigma}_i(\rho)$ — установившееся за время τ значение напряжений σ_i , при заданной плотности дислокаций.

Учитывая, что, согласно (4.1), скорость пластического течения $\dot{\epsilon} = b\rho v$ (скорость подвижных дислокаций $v \sim (\sigma - \sigma_i)^m$), система (4.7), (4.8) при фиксированных внешних напряжениях σ описывает распространение вдоль деформируемого образца автоволны в виде подвижной полосы локализованного течения.

4.2.3 Эффект Портевина-Ле-Шателье (прерывистое течение)

Другим показательным примером автоволновой природы пластической деформации, поддающейся наблюдению на макроуровне, является эффект Портевина-Ле-Шателье (прерывистое течение). Он связан с нелинейностью поведения системы, проявляющейся в том, что твердое тело при деформации удлиняется не непрерывно, а внезапными скачками. Это делает кривую деформации пилообразной при жестком нагружении и ступенчатой при мягком нагружении.

Поскольку деформируемое твердое тело является открытой системой, нелинейность его поведения в макромасштабе наиболее отчетливо проявляется при переходе в пластическую область. Именно в этой области фиксируется прерывистость течения, на проявление которой в макромасштабе, помимо химического состава сплава, оказывают влияние скорость деформации, температура и другие факторы.

Проведенный термоактивационный анализ процесса пластической деформации алюминий-цинковых сплавов с 6 и 10 мас.% Zn, проявляющих эффект Портевина-Ле-Шателье при комнатной и более низких температурах, подтвердил важное влияние **концентрации вакансий** на развитие эффекта.

Ишикава и др. исследовали **прерывистую деформацию** аустенитных нержавеющей сталей 310S и 304L при статическом растяжении в условиях адиабатической деформации при температуре 4K и скорости деформирования $3 \cdot 10^{-4} \text{ с}^{-1}$. В экспериментах фиксировали скачки температуры ΔT , соответствующие скачкам нагружения. Была установлена следующая степенная зависимость между частотой температурных пиков N и величиной ΔT

$$N(\Delta T) \cong (\Delta T)^D \quad (4.9)$$

Дискретность процесса пластической деформации схематически описывали последовательностью деформированных и недеформированных "областей" металла, принимая при этом, что недеформированные области образуют множество Кантора с фрактальной размерностью $D = 0,63$.

Эти результаты говорят о **фрактальности диссипативных структур** (см. раздел 6.1), образующихся при пластической деформации. Можно считать, что прерывистость пластического течения является отображением общего свойства системы в виде деформируемого металла — нелинейности свойств вдали от термодинамического равновесия.

Для многих сплавов прерывистая текучесть проявляется после достижения критической деформации ϵ_c . В некоторых случаях при превышении ϵ_c происходит прекращение эффекта. Обычно такой тип неустойчивости пластического течения контролируется динамическими процессами взаимодействия между мигрирующими атомами внедрения и подвижными дислокациями, т.е. динамическим деформационным старением, вызывающим уменьшение скоростной чувствительности в локальных объемах деформируемого материала. Для адекватного описания эффекта прерывистой текучести необходимо принимать во внимание, помимо конкретных физических механизмов (например, диффузионного механизма Коттрелла), **коллективные** свойства популяций дислокаций.

Выделяют три популяции дислокаций, различающиеся скоростью: **подвижные** дислокации с плотностью ρ_m , **медленные** дислокации ρ_s , увлекающие за собой при движении "облако" растворенных атомов, и **неподвижные** дислокации ρ_i . Эволюция плотности дислокаций во времени с учетом процессов пре-

вращения одной популяции дислокаций в другую: $m \rightarrow s \rightarrow i \rightarrow m$ описывают системой взаимосвязанных дифференциальных уравнений:

$$\frac{\partial \rho_m}{\partial t} = \theta \bar{v} \rho_m - \mu \rho_m^2 - \mu' \rho_m \rho_i + \lambda \rho_i - \beta \rho_m \quad (4.10)$$

$$\frac{\partial \rho_i}{\partial t} = k_\mu \rho_m^2 - \mu' \rho_m \rho_i - \lambda \rho_i + \beta' \rho_s, \quad (4.11)$$

$$\frac{\partial \rho_s}{\partial t} = \beta \rho_m - \beta' \rho_s \quad (4.12)$$

При заданных напряжениях и температуре параметры системы остаются постоянными. При этом учитываются следующие дислокационные механизмы: размножение подвижных дислокаций θ ; их взаимная аннигиляция и иммобилизация μ (в уравнении (4.11) при $0 < k < 1$ член с коэффициентом k_μ описывает источник неподвижных дислокаций); аннигиляция неподвижных дислокаций μ' ; раскрепощение неподвижных дислокаций λ .

В уравнении (4.10) последнее слагаемое контролирует эффект взаимодействия подвижных дислокаций с "облаками" растворенных атомов; коэффициент β зависит от концентрации последних и их диффузионной способности.

С другой стороны, в уравнении (4.13) $\beta \rho_m$ представляет собой источник медленных дислокаций. И, наконец, β' описывает иммобилизацию медленно движущихся дислокаций при превышении некоторой критической скорости их перемещения. При определенных соотношениях констант скоростей реакции система (4.10)—(4.12) имеет *периодические решения в виде предельного цикла*.

В предположении, что средняя скорость подвижных дислокаций m постоянна, получено аналитическое описание ступенчатообразных кривых ползучести. При совместном решении системы нелинейных уравнений (4.10)—(4.12) и уравнения, описывающего режим активного нагружения,

$$\sigma_a = K[\sigma - b(\rho_m + \gamma \rho_s) v_m(\sigma^*)] \quad (4.13)$$

где K -- модуль эффективной податливости, $v_m = v_0 (\sigma^* / \sigma_0)^m$,

$\sigma^* = \sigma - \alpha G b \rho^{1/2}$, моделировали кривые прерывистой деформации с учетом основных характерных особенностей явления. Была получена типичная пилообразная кривая $\sigma - \varepsilon$ при численном решении системы нелинейных дифференциальных уравнений (4.10)—(4.13). При этом показано, что прерывистая текучесть проявляется в определенной области изменения значений управляющих параметров — скорости деформации, концентрации растворенных атомов и коэффициента диффузии. Также отмечается, что существуют критические значения деформации, немонотонным образом зависящие от скорости деформации. При их достижении проявляется рассматриваемый эффект.

Таким образом, показано, что при соответствующем изменении управляющих параметров и достижении ими в точке бифуркаций критических значений нелинейная динамическая система в виде деформируемого твердого тела претерпевает так называемый *неравновесный фазовый переход* — переход от стационарного пластического течения к новому упорядоченному во времени динамическому состоянию — прерывистой текучести. Переход к указанному динамическому состоянию контролируется балансом энергии в системе, т.е. соотношением между латентной энергией, запасаемой в системе за счет увеличения плотности дислокаций, и диссипацией энергии в результате аннигиляции, иммобилизации дислокаций и др. Прерывистую текучесть рассматривают как динамическое состояние деформируемого материала в виде диссипативной структуры.

Рассмотрено возникновение *автоколебательного режима* пластической деформации в сплавах с точки зрения общего синергетического подхода. В качестве исходных уравнений выбрано уравнение переноса импульса для континуума непрерывно распределенных дислокаций, которое в случае однородного распределения совпадает с уравнением движения отдельной дислокации

$$m \frac{dv}{dt} = b\sigma - f(v) \quad (4.14)$$

и уравнение Гилмана-Джонстона для режима активного нагружения

$$\frac{d\sigma}{dt} = K(\dot{\epsilon} - \rho b\sigma), \quad (4.15)$$

Здесь K — эффективная податливость системы образец-машина;

m — масса дислокации;

σ — внешнее приложенное напряжение;

ρ — плотность дислокаций;

$\dot{\epsilon}$ — заданная скорость пластической деформации;

$f(v)$ — сила торможения, имеющая N-образный вид и обусловленная примесными атмосферами.

Линейный анализ устойчивости системы (4.14), (4.15) показал, что единственное состояние равновесия $v_0 = \dot{\epsilon}/\rho b$, $\sigma_0 = f(v_0)/b$ становится неустойчивым при $\partial f/\partial v < 0$, т.е. в области отрыва дислокаций от закрепляющих примесей. Асимптотическими методами в области неустойчивости был найден предельный цикл, соответствующий колебаниям переменных v и σ . Получена зависимость периода колебаний от параметров системы. В частности, показано, что с ростом скорости пластической деформации и температуры период колебаний уменьшается.

Нестабильный характер протекания пластической деформации (в общем случае возникновение скачков нагрузки на кривых деформационного упрочнения) обуславливается взаимодействием исходной дефектной структуры кри-

сталлов и субструктуры, образующейся в процессе деформации. В частности, при пластической деформации предварительно облученных монокристаллов меди и закаленных с предплавленных температур образцов из алюминия в исходной дефектной структуре указанных материалов, содержащей большое количество вакансионных и межузельных призматических петель и тетраэдров дефектов упаковки, образуются **бездефектные каналы** шириной 0,1—0,5 мкм. Это обуславливает развитие неоднородности пластической деформации на ее начальной стадии, что отражается на кривых деформационного упрочнения в виде характерных скачков нагрузки

Механизм образования бездефектных каналов в облученных или закаленных кристаллах рассматривается с кинетических позиций как "закономерная эволюция дислокационного ансамбля в кристалле при заданных условиях его деформирования". При этом, помимо процессов размножения, аннигиляции и диффузии дислокаций, учитывается также механизм взаимодействия скользящих дислокаций с призматическими петлями дефектов упаковки. В результате указанного взаимодействия дефекты заменяются дислокациями, образуя на них пороги и перегибы.

Таким образом, дискретность пластической деформации, проявляющаяся на микроуровне, обусловлена развитием процессов самоорганизации на мезоскопическом уровне. Характерным примером является феномен шейкообразования при деформации пластичных металлов и сплавов — пластическая неустойчивость h-типа. На мезоуровне процессы, предопределяющие шейкообразование, связаны с включением доминантных ротационных мод деформации. Локализация деформации носит многоуровневый характер на микро-, мезо- и макроуровнях. При этом самоорганизация диссипативных структур контролируется не только коллективным взаимодействием дефектов, но и изменением вида напряженного состояния в зоне концентрации процессов диссипации энергии.

4.2.4 Контрольные вопросы к разделу 4.2

- 1 Перечислите эффекты нелинейности при малых деформациях. В чём заключается эффект упругого последствия? Что представляет собой кривая разгрузки?
- 2 Почему даже на стадии упругой деформации избыточная энергия внешнего воздействия кумулируется в локализованных сильно неравновесных областях?
- 3 Почему локальные сильно неравновесные области образуют открытую, способную к самоорганизации подсистему?
- 4 Почему закон Гука считают всего лишь приближением? Что такое физический предел упругости?
- 5 Что является одним из признаков смены типа диссипативных структур?
- 6 Какое соотношение лежит в основе классификации явлений пластической неустойчивости? Что это уравнение описывает?

- 7 Что представляет собой нестабильность h-типа? нестабильность S-типа? Т- нестабильность? В каких процессах реализуются перечисленные нестабильности?
- 8 С чем связано возникновение волн деформации в условиях множественного скольжения?
- 9 Что обуславливает образование волны сдвиговой деформации? Что необходимо учитывать для корректного описания пластической деформации твердого тела?
- 10 Что представляет собой термин "релаксационные волны"? Какие процессы вызывает разгрузка каких-либо зерен поликристаллов в процессе формирования релаксационной волны?
- 11 Перечислите общие условия возникновения волн релаксации в деформируемом твердом теле.
- 12 Каким путем достигается автокаталитичность и чем определяется демпфирующий фактор при пластическом деформировании?
- 13 Назовите примеры проявлений волнового характера пластической деформации, наблюдаемых визуально.
- 14 Как Чернов объяснил образование специфических фигур на поверхности образцов из железа и стали при растяжении?
- 15 С чем связано возникновение вогнутых и выпуклых линий на поверхности образцов?
- 16 Каким уравнением описывается плотность подвижных дислокаций с точки зрения нелинейной кинетики дислокаций? Запишите частное решение этого уравнения. Что оно описывает?
- 17 Какая оригинальная модель образования полос Чернова – Людерса была предложена после анализа полей смещения? В результате чего формируется полоса распространения в соответствии с этой моделью?
- 18 Что является подтверждением связи распространения полос Чернова— Людерса с волновой природой пластической деформации?
- 19 Что обеспечивает в локализованной полосе скольжения условия для кооперативного взаимодействия двух процессов деформации — трансляции синглетного скольжения и ротации?
- 20 При совместном развитии каких процессов возможно распространение автоволн пластической деформации?
- 21 Запишите систему уравнений, которая описывает распространение вдоль деформируемого образца автоволны в виде подвижной полосы локализованного течения при фиксированных внешних напряжениях.
- 22 С чем связан и как проявляется эффект прерывистого течения (Портевина-Ле-Шателье)? Что делает кривую деформации пилообразной при жестком нагружении и ступенчатой при мягком нагружении?
- 23 В какой области фиксируется прерывистость течения? Какие факторы оказывают влияние на проявление этого эффекта?

- 24 Какая степенная зависимость была установлена между частотой температурных пиков N и величиной ΔT ?
- 25 Какими динамическими процессами обычно контролируется неустойчивость пластического течения?
- 26 Назовите три популяции дислокаций. Запишите систему дифференциальных уравнений, которой описывают эволюция плотности дислокаций во времени с учетом процессов превращения одной популяции дислокаций в другую. Какие дислокационные механизмы при этом учитываются?
- 27 Чем контролируется переход от стационарного пластического течения к новому упорядоченному во времени динамическому состоянию — прерывистой текучести?
- 28 Чем обуславливается нестабильный характер протекания пластической деформации (в общем случае возникновение скачков нагрузки на кривых деформационного упрочнения)?
- 29 В каких случаях образуются бездефектные каналы? Какой механизм учитывается при этом, помимо процессов размножения, аннигиляции и диффузии дислокаций?
- 30 Чем обусловлена дискретность пластической деформации, проявляющаяся на микроуровне?

4.3 Элементы линейной механики разрушения

4.3.1 Пластическая деформация и разрушение

Как отмечалось в разделе 2.3, первая попытка объяснить расхождение между теоретической прочностью и прочностью, найденной измерением, была сделана в работе Гриффитса (1920 г.) по разрушению стекла. В своей работе «Явления разрушения и течение твердых тел» Гриффитс впервые получил уравнения для определения разрушающего напряжения при нагружении хрупких твердых тел. Гриффитс использовал теорему «минимума энергии», согласно которой равновесное состояние твердого тела при нагружении в *упругой* области отвечает минимуму потенциальной энергии системы в целом. При анализе критерия разрушения Гриффитс дополнил эту теорему положением о том, что состояние равновесия возможно, если оно отвечает условию, при котором система может переходить от неразрушения к разрушению путем процесса, включающего *непрерывное уменьшение* потенциальной энергии.

Для того чтобы применить эту теорему к проблеме разрушения *реальных* твердых тел, необходимо было учесть *увеличение* потенциальной энергии, обусловленное образованием новых поверхностей раздела внутри твердого тела (поверхностную энергию γ). Гриффитс доказал следующую теорему: «В упругих твердых телах, деформируемых внешними силами, сумма потенциальной энергии приложенных сил и энергия деформации тела уменьшается при появлении трещины, поверхность которой свободна от сил сцепления».

Таким образом, основные выводы из теории Гриффитса следующие:

В исходном состоянии материал, подчиняющийся чисто упругим закономерностям, содержит микротрещины. Имея закругленные концы, эти микротрещины способны к росту, при котором происходит *релаксация упругих напряжений* в объеме порядка объема самого дефекта. Основным препятствием для разрушения является энергия вскрывающихся поверхностей - *поверхностная энергия*. Взаимосвязь между выделяющейся упругой энергией и поверхностной характеризуется выражением (2.28).

Данное выражение было подтверждено экспериментально для стекла и некоторых других хрупких материалов. При хрупком разрушении *энергия движения трещины на единицу длины* G_c равна истинной поверхностной энергии 2γ , т. е. является константой материала, связанной с прочностью межатомных связей. Для металлических материалов G_c не равна поверхностной энергии. Таким образом, изложенные выше рассуждения справедливы для очень острой трещины в *хрупком* материале (например, в стекле) при отсутствии пластической деформации.

В действительности же, разрушение металлов – это более сложный процесс, чем разрушение совершенно хрупких материалов, т. к. в металле может одновременно действовать несколько механизмов разрушения, коренным образом отличающихся друг от друга. Здесь характерным является *пластическая*

деформация, обычно предшествующая разрушению. В металлах пластическая деформация начинается при сравнительно низких напряжениях, гораздо ниже $\sigma_{\text{теор}}$. Поэтому в местах концентрации напряжений (или у вершины трещины) пластическая деформация может начаться раньше разрушения. **Направленная** микропластическая деформация около существующих концентраторов напряжений уменьшает пики напряжений и тормозит разрушение. **Хаотическая** неоднородная микропластическая деформация создаёт концентраторы напряжений и способствует разрушению. Диалектика взаимосвязи пластической деформации и разрушения – объект физической теории разрушения.

Опыт показывает, что пластическая деформация в кристаллических материалах осуществляется неоднородно не по всему объёму образца, а лишь внутри изолированных областей, называемых **полосами скольжения**. Расстояние между полосами скольжения в монокристаллах, так же как и величина скольжения в отдельной полосе, колеблется в широких пределах: обычно она лежит в пределах от 10^{-6} до 10^{-4} см, а величина скольжения – от 10^{-7} до 10^{-5} см. **Направление скольжения** практически всегда совпадает с направлением вектора решетки в плотноупакованной области. В поликристаллических материалах полоса скольжения ограничена одним зерном.

Орован и Фелбек впервые обратили внимание на то обстоятельство, что любая трещина в конструкционных материалах окружена более или менее **локализованной зоной пластической релаксации**. Понятно, что существование этой зоны связано с определенными энергетическими затратами и в феноменологическом плане может быть учтено введением вместо истинного поверхностного натяжения некоторого **эффективного** $\gamma_{\text{эфф}}$. Из эксперимента хорошо известно, что $\gamma_{\text{эфф}}$ может превосходить $\gamma_{\text{ист}}$ на 2-4 порядка.

Взгляды Ирвина не отличались от точки зрения Орована. Ирвин предположил, что при образовании поверхностей раздела в пластичных материалах высвобождаемая энергия упругой деформации в значительной степени затрачивается на пластическое течение у вершины трещины. Критическое значение этой энергии существенно превышает величину поверхностной энергии.

Ниже на рисунке 4.9 впереди фронта трещины показана **зона** пластической деформации толщиной 2Δ . Пластическая деформация увеличивает работу разрушения на величину $\gamma_{\text{пл}}$. Опыт показывает, что

$$\gamma_{\text{пл}} = (10^2 \div 10^4)\gamma,$$

где γ – поверхностная энергия. Это значит, что поверхностной энергией можно пренебречь по сравнению с **работой пластической деформации в пластической зоне** впереди трещины.

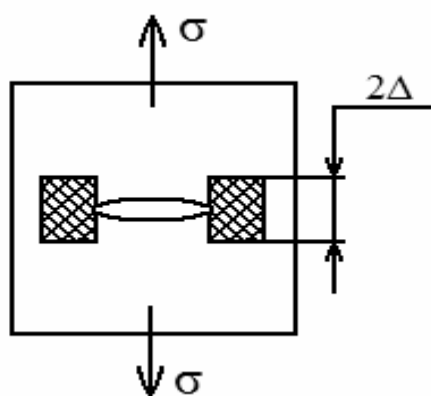


Рисунок 4.9

4.3.2 Классификация трещин

В литературе приводится следующая классификация трещин:

1) **Субмикротрещины.** По Гриффитсу, когда

$$\gamma \approx \frac{G \cdot a}{8} \approx 2 \frac{\text{Дж}}{\text{м}^2},$$

размер трещины у хрупких тел при напряжениях $\sigma \approx 200$ МПа равен нескольким микронам, и может быть определен по формуле:

$$C_{\text{Грифф.}} = \frac{8\gamma E}{\pi \sigma^2}$$

2) **Микро– и макротрещины.** По Оровану, с учётом пластической деформации у вершины «тупых» трещин, вводится энергия $\gamma_{\text{эфф}} = \gamma + \gamma_{\text{пл}}$. Размер трещин изменяется от мм до метра и может быть определен по формуле:

$$C_{\text{Орована}} = \frac{8\gamma_{\text{эфф}} E}{\pi \sigma^2}$$

Эти трещины способны медленно подрастать за счёт флуктуаций.

3) **Макро– и магистральные трещины.** Имеют размеры от сантиметров до нескольких метров, могут подрастать до тех пор, пока напряжения у вершины трещины не достигнут значений теоретической прочности $\sigma_{\text{теор}}$ и произойдёт потеря механической устойчивости твёрдого тела. Эта область, которой занимается механика разрушения.

4.3.3 Коэффициент интенсивности напряжений и вязкость разрушения

Корректных способов теоретического расчёта $\gamma_{\text{эфф}}$ нет, поэтому в механике разрушения значения $\gamma_{\text{эфф}}$ вычисляют обратным путём – через известные из опыта напряжения разрушения σ_p образцов с готовой критической трещиной C_*

$$\sigma_p = \frac{K_{IC}}{\sqrt{\pi \cdot C_*}} \quad (4.16)$$

где K_{IC} – критический коэффициент интенсивности напряжений у вершины трещины.

Ирвин показал, что поля деформаций и напряжений на фронте трещины можно описать с помощью **коэффициента интенсивности напряжений K** . При наличии трещины поля напряжений у ее края очень сильно локализованы и быстро затухают, так что если зона пластической деформации у края трещины по сравнению с ее длиной и размером образца мала, то при математической трактовки процесса размером этой зоны можно пренебречь и рассматривать поведение тела как в упругой задаче. Это позволило различные виды разрушения материала моделировать путем растяжения специального образца **с предварительно созданной трещиной**.

Следует отметить, что закономерности механики деформируемого тела – сопротивление материалов, теории упругости, пластичности, ползучести – вначале были развиты главным образом для тел:

- 1) **гладких**, в которых отсутствуют резкие изменения сечения или надрезы в широком смысле слова;
- 2) **сплошных** не только в исходном состоянии (полное отсутствие в теле трещин, полостей и пор до деформации), а также во всем процессе нагружения, т. е. появление и развитие трещин и полостей под нагрузкой не учитывалось.

Между тем, реальные твердые тела почти всегда разрушаются по сечению неодновременно (от точки к точке) вследствие развития трещин. Если бы тело не имело дефектов, например пор и трещин, ни исходно, ни в процессе нагружения, то это означало бы, что процесс разрушения происходит без трещин, т. е. одновременно по всему сечению и внезапно. Разрушение развивается во времени и обусловлено именно развитием процесса образования трещин из одного или нескольких центров и их последующим ростом.

Стремление отразить при лабораторных механических испытаниях влияние неравномерности в реальных изделиях привело к появлению большого числа методов с заведомо созданной неравномерностью напряженного и деформированного состояния. С этой целью используются образцы с надрезом и с готовой трещиной. Надрезы и трещины вызывают уже в упругом состоянии резкую неравномерность и переход от линейного к плоскому или к объемному напряженному состоянию. Поэтому закономерности, полученные без учета неравномерности и объемности для гладких и сплошных тел, оказываются во многих случаях недостаточными, а иногда неверными для конструкционной оценки материала.

В отличие от гладких и надрезанных образцов в телах **с трещинами** практически всегда возникают неоднородные и несимметричные напряженные состояния. На основе различия между медленным (стабильным) и быстрым (нестабильным) периодами развития трещины Дж. Р. Ирвин предложил методику испытаний и расчета для оценки несущей способности образца (элемента конструкции), содержащего трещину известной длины. Напряженно-деформированное состояние у края трещины определяется или **коэффициентом интенсивности напряжений K_I** (нормальный отрыв), или K_{II} (поперечный сдвиг), или K_{III} (антиплоская деформация).

Когда напряжения и деформации на фронте трещины достигают **критической величины**, возникает неустойчивость разрушения. Это критическое состояние при разрушении по типу I в условиях плоской деформации контролируется **критическим** значением $K_I = K_{IC}$. Если реализуется предельное состояние, связанное с разрушением по типу II, то критерием разрушения является K_{IIIC} , по типу III - K_{IIIIC} . Эти критерии отвечают вполне определенным механизмам движения берегов трещины. На рисунке 4.10 показаны типы трещин в зависимости от ориентации направления их движения по отношению к направлению действия нагрузки: I – нормальный отрыв, II – поперечный сдвиг, III – продольный сдвиг (антиплоская деформация).

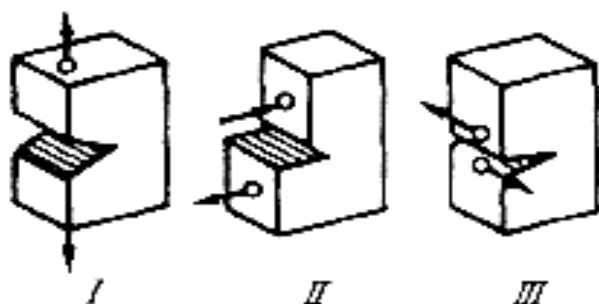


Рисунок 4.10

Критический коэффициент интенсивности напряжений у вершины трещины K_{IC} определяется как

$$K_{IC} = \sqrt{E G_{IC}} \quad (4.17)$$

Здесь G_{IC} – вязкость разрушения – энергетический критерий разрушения по Ирвину. Под **вязкостью разрушения** понимают сопротивление материала продвижению в нем трещины. Суть вопроса состоит в определении протяженности трещины, которой материал может сопротивляться при той или иной нагрузке. Каждому данному материалу, размеру образца, характеру приложенных напряжений отвечает свой **критический размер трещины**, отделяющий состояние стабильности от состояния ее быстрого распространения. Чем выше вязкость материала, тем больше этот размер.

В количественном отношении вязкость разрушения характеризуют коэффициентом интенсивности напряжений K и энергией деформации, освобождающейся при распространении трещин, на единицу ее длины или движущей силой трещины G . Как видно из (4.17) эти величины жестко связаны.

При подстановки (4.17) в уравнение (4.16) критерий Ирвина принимает вид

$$\sigma_{\text{Ирвина}} = \sqrt{\frac{E \cdot G_{IC}}{\pi C_*}} \quad (4.18)$$

В формуле Ирвина C_* – длина **макротрещины** (имеет размеры от миллиметра до метра). Критерий Гриффитса аналогичен

$$\sigma_{\text{Грифф}} = \sqrt{\frac{8\gamma \cdot E}{\pi C_*}} \quad (4.19),$$

но здесь C^* – длина *субмикротрещины* (имеет размеры в пределах нескольких микрон).

G_{1c} – мера эффективной энергии для „тупых” макротрещин, определяет условие роста квазихрупкой трещины со следами пластической деформации аналогично тому, как истинная поверхностная энергия γ отражает условие роста хрупкой трещины Гриффитса.

Таким образом, теории хрупкого и квазихрупкого разрушения в линейной механике разрушения формально представлены одними и теми же выражениями. Отличие лишь по величине энергетических затрат: γ , или G_{1c} , или $\gamma_{\text{эфф}}$. В этом кроется противоречие. В 1977г Коттрелл (основоположник дислокационной теории разрушения) писал: неясно одно противоречие в теории разрушения, почему во многих случаях хрупкого разрушения (что видно по характеру излома) измеряемая работа разрушения во много раз больше γ – истинной поверхностной энергии.

С другой стороны, подходы линейной механики разрушения не применимы для анализа рассеянного разрушения, когда впереди трещины возникает множество микротрещин; проблема их учета связана с рассмотрением эффектов коллективного взаимодействия трещин. Решение самых простых задач этого класса пока не имеет даже качественного описания. Нет ответа и на вопрос, что является мерой повреждаемости материала при наличии в нем системы трещин. Понятно, что мерой повреждаемости не может быть ни суммарный объем пустот, ни какая-либо другая осредненная геометрическая характеристика системы трещин.

Ответы на все эти вопросы способны дать активно развиваемые в настоящее время квантовая механика дефектов и фрактальная кинетика разрушения. В них рассматривается разрушение как неравновесный фазовый переход в системе, далекой от равновесия. Учитывается влияние дискретности среды на показатели сопротивления разрушению с помощью фрактальной размерности диссипативной структуры, контролирующей это разрушение. С данных позиций в последние годы удалось значительно продвинуться в понимании физики разрушения. И, тем не менее, несмотря на интенсивные экспериментальные исследования, проблема разрушения твердых тел, актуальность которой не требует специального обсуждения, по сути, остается открытой.

4.3.4 Контрольные вопросы к разделу 4.3

- 1 Каким положением Гриффитс дополнил теорему о «минимуме энергии»?
- 2 Почему в упругих твердых телах, деформируемых внешними силами, сумма потенциальной энергии приложенных сил и энергии деформации тела уменьшается при появлении трещины?
- 3 Перечислите основные выводы из теории Гриффитса.

- 4 Почему при хрупком разрушении энергия движения трещины на единицу длины G_c равна истинной поверхностной энергии 2γ , а для металлических материалов G_c не равна поверхностной энергии.
- 5 Чем отличается направленная микропластическая деформация около существующих концентраторов напряжений от хаотической неоднородной микропластической деформации?
- 6 Что представляют собой полосы скольжения? В каких пределах колеблется расстояние между полосами скольжения и величина скольжения в отдельной полосе в монокристаллах? в поликристаллических материалах?
- 7 Как определяется направление скольжения?
- 8 С чем связано существование локализованной зоны пластической релаксации?
- 9 Почему поверхностной энергией можно пренебречь по сравнению с работой пластической деформации в пластической зоне впереди трещины?
- 10 Приведите классификацию трещин.
- 11 По каким формулам можно определить размер трещин? В каких пределах изменяется размер субмикротрещин? микро– и макротрещин?
- 12 Как в механике разрушения вычисляют значения $\gamma_{эфф}$?
- 13 С какой целью используются образцы с надрезом и с готовой трещиной?
- 14 В чем отличие гладких и надрезанных образцов от образцов с трещинами?
- 15 Какую методику испытаний и расчета предложил Дж. Р. Ирвин?
- 16 Какими коэффициентами интенсивности напряжений определяется напряженно-деформированное состояние у края трещины?
- 17 Схематически изобразите типы трещин в зависимости от ориентации направления их движения по отношению к направлению действия нагрузки.
- 18 Как определяется критический коэффициент интенсивности напряжений у вершины трещины K_{IC} ?
- 19 Что понимают под вязкостью разрушения? Что представляет собой критический размер трещины?
- 20 Как связаны вязкость материала с критическим размером трещины?
- 21 Запишите критерий Ирвина и критерий Гриффитса. Какова длина макротрещин и субмикротрещин в этих критериях?
- 22 Почему подходы линейной механики разрушения не применимы для анализа рассеянного разрушения, когда впереди трещины возникает множество микротрещин? С рассмотрением каких эффектов связана проблема учета этих микротрещин?

4.4 Микроскол - критическая стадия хрупкого разрушения материалов

4.4.1 Основные свойства субмикротрещин

Размеры субмикротрещин меньше размеров трещин Гриффитса $C_{\text{Грифф}}$. Зарождение субмикротрещин в поле средних значений внешних напряжений энергетически невыгодно (термодинамически запрещено), поэтому необходимо или запастись латентную, скрытую, энергию, или создать область перенапряжений. Данный процесс связан с пластической деформацией, которая предшествует зарождению субмикротрещин и сопровождает их зарождение.

Процесс зарождения субмикротрещин можно представить в следующей последовательности:

- 1) накопление работы внешних сил в виде энергии дислокаций;
- 2) перенос энергии потоками дислокации;
- 3) концентрация напряжений в местах градиентов дислокаций;
- 4) релаксация напряжений путём зарождения новых поверхностей – субмикротрещин.

Форма субмикротрещин влияет на их стабильность и механизмы зарождения и роста. Для случая $d \sim \lambda_{\text{субстр}} \gg C$ (где C – длина трещины, $\lambda_{\text{субстр}}$ – характерный размер субструктуры, d – размер зерна) возможны три формы:

- 1) Упругая трещина ($C < C_{\text{Грифф}}$).

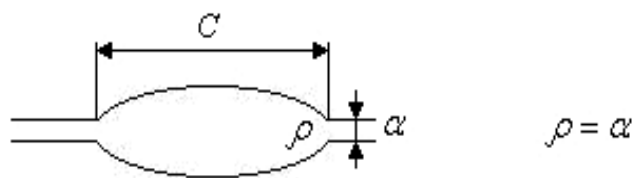


Рисунок 4.11

Упругая трещина (рисунок 4.11) механически нестабильна. Она является концентратором напряжений. Чем острее надрез трещины ρ тем выше уровень напряжений. Здесь a – межатомное расстояние.

- 2) Дислокационная трещина.

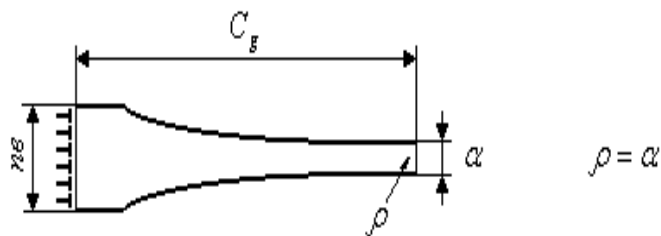


Рисунок 4.12

Равновесная дислокационная трещина (рисунок 4.12). Она имеет длину $C_g \approx n^2 b / 2$, где n – число дислокации (■) в трещине, b – величина вектора Бюргерса ($b \approx a$). Если число дислокаций $n = 25$ длина трещины $C_g \approx 0,1 \text{ мкм}$. Вокруг себя (на

расстояниях $r \gg C_g$) трещина создаёт большие внутренние напряжения σ_g , равные

$$\sigma_g \approx \frac{Dnb}{2} \quad (4.20)$$

И на расстояниях $r \approx C_g$,

$$\sigma_g \sim \sigma_{\text{теор}} \approx D$$

где D – модуль материала (выражает плотность энергии связи атомов).

Анализ энергии и условий равновесия дислокационной трещины во внешнем поле растягивающих напряжений σ показал, что трещины размерами $C_g \ll C_{\text{Гр}}$ находятся в устойчивом равновесии. При достижении размеров $C_g \approx C_{\text{Гр}}$ теряют равновесие. Потеря устойчивости дислокационных трещин происходит по механизму Гриффитса.

Оказывается, упругая трещина длиной C теряет устойчивость при растягивающих напряжениях σ в два раза больших, чем дислокационная трещина той же длины. При одинаковых напряжениях дислокационная трещина теряет устойчивость, имея размеры (длину) в четыре раза меньшие, чем упругая трещина. Дислокационная трещина опасней упругой трещины.

3) Пора. Это механически стабильная трещина, захлопывание которой энергетически невыгодно. Локальные напряжения около поры во много раз меньше, чем около упругих и дислокационных трещин. Например, около цилиндрической поры $\sigma_{\text{max}} \approx 3\sigma$.

При пластической деформации пористость зарождается вероятнее всего за счёт объединения дислокаций. При чисто вакансионном механизме (закалка, радиационное облучение) пора не является источником внутренних напряжений. При этом поры имеют широкий спектр размеров от 100 б до 250 б.

4.4.2 Микроскол – первичный источник разрушения металлов в процессе их пластичности

Как отмечалось выше, учёт пластической деформации у вершины «тупых» трещин позволяет ввести эффективную поверхностную энергию $\gamma_{\text{эфф}} = \gamma + \gamma_{\text{пл}}$. Пластическая деформация увеличивает работу разрушения на величину $\gamma_{\text{пл}}$. Отмечалось также противоречие, возникшее при оценке $\gamma_{\text{эфф}}$ для микро и макротрещин. Было замечено, что излом хрупкий, но энергия разрушения большая $\gamma_{\text{эфф}} \gg \gamma$. Ещё Стро высказал идею, что зародышевый хрупкий скол (субмикротрещина) – это начальная стадия разрушения с энергией γ - истинной поверхностной энергией.

Мешков разработал физическую теорию разрушения, основанную на **модели микроскола**. Субмикротрещина не способна возбудить пластическую релаксацию в кристаллах ОЦК – железа. Если в зоне вершины субмикротрещины окажется несколько источников дислокации, то размер зоны концентрации напряжений в десять раз меньше размера самой трещины. При $C_g \sim 0.1 \text{ мкм}$ (или 1000 ангстрем) радиус пластической зоны $r_{\text{пласт}} \sim 10 \text{ нм}$ (то есть 100 ангстрем).

Внешнее напряжение, при котором на острие субмикротрещины достигается $\sigma_{\text{теор}}$ и рвутся связи, было названо **сопротивлением микросколу** $R_{\text{мс}}$. Оказалось, что сопротивление микросколу $R_{\text{мс}}$ – это функция размера зерна, то есть структурного фактора. Данная характеристика не зависит от температуры, скорости деформации, вида напряжённого состояния. Схема Гриффитса оказалась применима в модели микроскола.

Перечислим особенности **модели микроскола, предложенной Стро**:

- 1) Трещина Гриффитса – основа модели.
- 2) Все дислокации скопления входят в трещину.
- 3) Критерий разрушения $\sigma_{\text{Грифф}} = \sigma_{\text{разр}}$, который определяется растягивающим напряжением «взрывного» распространения зародышевой трещины.
- 4) Формула Стро для микроскола:

$$\sigma_{\text{разр}} = \sigma_0 + \left(\frac{6\pi\gamma G}{1-\nu} \right)^{0.5} d^{-0.5} \quad (4.21)$$

Здесь σ_0 – напряжение трения дислокаций; ν – коэффициент Пуассона; G – модуль сдвига; d – размер зерна.

По своей структуре формула Стро совпадает с уравнением Холла-Петча для предела текучести металла.

Рассмотрим теперь **модель микроскола по Мешкову**. Перечислим основные отличия в модели микроскола, предложенной Мешковым:

- 1) Раскрытие зародышевой субмикротрещины (расклинивание, подрастание) на докритической стадии роста трещины обеспечивается не нормальными (растягивающими), а **касательными** τ напряжениями. Причём учитываются не действующие касательные τ напряжения, а эффективные $\tau_{\text{эфф}}$.

$$\tau_{\text{эфф}} = \tau - \tau_0 \quad (4.22),$$

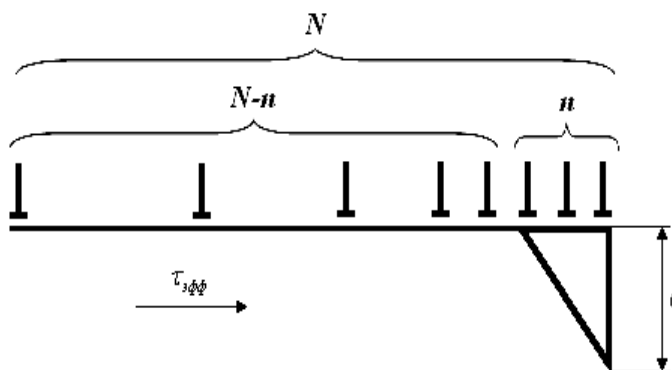
где τ_0 - сопротивление решетки движению дислокаций (трение).

- 2) Критерием микроскола является не критическое напряжение σ , а размер зародышевой C_3 субмикротрещины, достигшей длины трещины Гриффитса $C_3 = C_{\text{Грифф}}$.

Задача физики микроскола - предложить корректный расчёт C_3 субмикротрещины в момент её прихода к лавинному росту. Здесь возможно установить связь со структурой металла. При длине трещины $C_3 = d$ (d - размер зерна) трещина может стабилизироваться. Например, вблизи температуры хрупкого перехода в структуре феррита наблюдается 2% стабильных трещин. Таким образом, задача Гриффитса применима только в модели микроскола.

Рассмотрим расчётную схему зародышевой субмикротрещины C_3 микроскола, предложенную Ю. Мешковым. На рисунке 4.13 приведена данная

схема. Здесь N, n – числа дислокаций; $\tau_{эфф}$ – эффективное касательное напряжение.



Скол происходит по плоскости с наименьшей упаковкой атомов. Для ОЦК – железа это плоскость (100). Структурное происхождение микроскола может быть разным. Это скопление дислокаций у границы (что показано на рисунке 4.13) и их сброс в трещину; изломы карбидов и т. д. Субграницы (малоугловые с углом $\sim 1^\circ$) не являются барьерами для дислокаций.

Зародышевая субмикротрещина проходит две стадии.

Рисунок 4.13

I стадия – квазиравновесное состояние.

Трещина не чувствительна к действию нормальных σ напряжений. Трещина медленно подрастает под действием эффективных касательных $\tau_{эфф}$ напряжений, которые подталкивают и сбрасывают дислокации в трещину.

II стадия – критическая. Данная стадия наступает, когда зародышевая субмикротрещина становится равной трещине Гриффитса $C_3 = C_{Грифф}$, при этом нормальное напряжение становится равным напряжению Гриффитса $\sigma = \sigma_{Грифф}$ и трещина переходит к лавинному росту.

У Стро размер зародышевой трещины равен

$$C_3 = \frac{n^2 b^2 G}{8\pi(1-\nu)\gamma} \approx n^2 b \quad (4.23),$$

причем, постулировано, что все дислокации скопления сваливаются в трещину, то есть $n = N$.

Ю. Мешков показал, что достаточно $n = 10 - 20$ дислокаций, то есть $n = (0,2-0,27)N$. При этом установлено, что

$$C_3 \approx \frac{d}{70} \quad (4.24),$$

где d – размер зерна (или эквивалентный структурный элемент металла). Соотношение (4.24) характеризует типичную величину субмикротрещины в материале на любой стадии его пластической деформации. Если в критерий Гриффитса подставить соотношение (4.24), то получим численное выражение, пригодное для грубой оценки зависимости напряжения хрупкого разрушения от размера зерна.

$$\sigma_p \approx \left(\frac{300\gamma E}{\pi} \right)^{0,5} d^{-0,5} = K_p d^{-0,5} \quad (4.25),$$

где $K_p = 140 - 200 \text{ МПа}^{3/2}$. Более точное выражение σ_p будет дано ниже.

Ещё раз подчеркнём особенности, отличающие **зародышевую субмикротрещину** от **стабильной полостной микротрещины** тех же геометрических размеров:

- 1) Зародышевая субмикротрещина – дефект в виде клина с идеально острой вершиной ($\rho \approx b \approx a$), находящийся в упругом равновесии с дислокационным скоплением и окружающей матрицей.
- 2) Размер субмикротрещины полностью определяется величиной внутреннего эффективного касательного напряжения, удерживающего клин в равновесии. Рост же микротрещины (свободной микрополости) целиком определяется величиной внешнего нормального напряжения по механизму Гриффитса.
- 3) Залечивание субмикротрещин достигается низкотемпературным отжигом, снимающим внутренние напряжения. Залечивание свободных микрополостей (микротрещин) требует высокотемпературного диффузионного отжига.
- 4) Субмикротрещины не реагируют на нормальные напряжения до тех пор, пока последние не достигнут значений, соответствующих гриффитсовским для данного размера трещины.
- 5) Основное отличие субмикро- и микротрещин не в их геометрических размерах, а в различном их отношении к действию касательных и нормальных напряжений в деформированном материале.
- 6) Зародышевые субмикротрещины могут развиваться по-разному в зависимости от того, стала ли данная субмикротрещина разрушающей по Гриффитсу или нет. В первом случае она быстро переходит в микро- и макротрещину. Во втором – либо “заморозится” на стадии упругого равновесия, либо подрастает до микротрещины размером $C \approx d$ и становится спутником, но не источником разрушения.

4.4.3 Сопротивление микросколу – напряжение разрушения на пределе текучести металла

Микроскол представляет собой процесс идеального хрупкого роста субмикротрещины в малых объемах кристалла с совершенной решёткой. Для начала этого процесса необходимо, чтобы к трещине размером C_3 было приложено соответствующее ей растягивающее напряжение Гриффитса:

$$\sigma_{\text{Грифф}} = \sigma_{\text{мс}} = \sqrt{\frac{8\gamma E}{\pi C_3}} \quad (4.26)$$

Ю. Мешков показал, что размер зародышевой субмикротрещины в ферритном зерне стали равен

$$C_3 = \frac{\alpha^2 \pi^2 (1 - \nu)^2 d^2 \tau_{эфф}^2}{G^2 b} \quad (4.27),$$

где G – модуль сдвига, b – величина вектора Бюргерса, ν – коэффициент Пуассона, d – размер зерна, α – коэффициент сброса дислокаций в субмикротрещину.

Можно видеть, что размер C_3 зависит от размера зерна d и эффективного напряжения сдвига $\tau_{эфф}$. Вычислить $\tau_{эфф}$ для различных стадий деформирования затруднено, поэтому в общем случае пластического течения материала при деформировании трудно определить $\sigma_{мс}$. Однако существует **физический или условный предел текучести** σ_T , для которого известно соотношение Холла-Петча:

$$\sigma_T = \sigma_0 + K_T d^{-0.5} \quad (4.28)$$

Из соотношения Холла-Петча можно достаточно точно получить значение $\tau_{эфф}(T)$:

$$\tau_{эфф}(T) = \tau_T - \tau_0 = \frac{1}{2} K_T d^{-0.5} \quad (4.29)$$

Здесь учтено, что $\tau = (1/2)\sigma$, что справедливо при осевом растяжении.

Важно подчеркнуть, что **напряжение микроскола на пределе текучести** представляет собою важную механическую характеристику материала – **сопротивление стали хрупкому разрушению**, от которой зависят основные силовые показатели работы изделия, его конструктивная прочность. Эта характеристика названа **сопротивлением микросколу** $R_{мс} = \sigma_{мс}(T)$. Окончательно

$$R_{мс} = 4 \left(\frac{\gamma E}{\pi} \right)^{0.5} \frac{G \sqrt{b}}{\alpha \pi (1 - \nu) K_T} d^{-0.5} = K_p d^{-0.5} \quad (4.30)$$

Если использовать известные для стали значения параметров, входящих в формулу (4.30), а именно

$$R_{мс}(\gamma = 1,8 \text{ Дж/м}^2 = 1,8 \cdot 10^4 \text{ даН/мм}; E = 2 \cdot 10^4 \text{ даН/мм}^2; G = 8 \cdot 10^3 \text{ даН/мм}^2; b = 2,5 \cdot 10^{-7} \text{ мм})$$

$$\nu = 0,25; \alpha \approx 0,25; K_T = 1,6 \text{ даН/мм}^{3/2}, \text{здесь (да) означает (дека), то есть } 10),$$

то в численной форме сопротивление микросколу будет

$$R_{mc} = 18d^{-0.5}, \text{ даН/мм}^2; \quad d, \text{ мм}$$

Таким образом, из всего вышеперечисленного следует вывод, имеющий большое значение и практическую ценность: по величине зерна можно определить одну из важнейших механических характеристик стали – сопротивление микросколу.

Ещё в 50 годы прошлого века Г.В. Ужик ввёл механическую характеристику стали – **сопротивление отрыву** R_{σ} , которая характеризует среднюю величину сил сцепления всей массы поликристаллов по сечению образца. Был разработан способ определения R_{σ} при испытании на растяжение цилиндрических образцов со специальным кольцевым острым надрезом.

Опыт показал, что R_{mc} является физически интерпретированным сопротивлением отрыву по Ужику-Копельману.

Физический критерий хрупкого разрушения – **критерий микроскола** – записывают как отношение сопротивления микросколу к пределу текучести материала $\frac{R_{mc}}{\sigma_T}$. Это отношение получило название **коэффициента вязкости**.

Теория дислокаций и микроскола позволили физически обосновать важнейшие технические характеристики прочности конструкционных материалов – предел текучести и сопротивление отрыву, их зависимость от фундаментальных параметров и структуры металла.

4.4.4 Контрольные вопросы к разделу 4.4

- 1 Опишите последовательность процесса зарождения субмикротрещин. Какие формы субмикротрещин вы знаете?
- 2 Схематически изобразите упругую и дислокационную трещину. Опишите их.
- 3 Какие внутренние напряжения σ_g создаёт трещина вокруг себя на расстояниях $r \gg C_g$ и на расстояниях $r \approx C_g$. Какая трещина (дислокационная или упругая) опасней?
- 4 Что представляет собой пора? Каковы локальные напряжения около поры? За счёт чего зарождается пористость при пластической деформации?
- 5 Является ли пора источником внутренних напряжений при вакансионном механизме (закалка, радиационное облучение)? В каких пределах изменяются при этом размеры пор?
- 6 Какое напряжение называется сопротивлением микросколу? Функцией какого фактора является сопротивление микросколу?
- 7 Перечислите особенности модели микроскола, предложенной Стро.
- 8 Перечислите основные отличия в модели микроскола, предложенной Мешковым.

- 9 Рассмотрите расчётную схему зародышевой субмикротрещины S_3 микроскопа, предложенную Ю. Мешковым.
- 10 По какой плоскости происходит скол? Какая это плоскость для ОЦК – железа? Каково структурное происхождение микроскопа?
- 11 Опишите две стадии, которые проходит зародышевая субмикротрещина.
- 12 По какой формуле определяется размер зародышевой трещины у Стро? У Мешкова?
- 13 Запишите формулу, определяющую зависимость напряжения хрупкого разрушения от размера зерна.
- 14 Перечислите особенности, отличающие зародышевую субмикро-трещину от стабильной полостной микротрещины тех же геометрических размеров.
- 15 Чему равен размер зародышевой субмикротрещины в ферритном зерне стали, согласно Мешкову?
- 16 Что такое физический или условный предел текучести? Запишите соотношение Холла-Петча. Какое значение можно достаточно точно получить из соотношения Холла-Петча?
- 17 Что представляет собой такая механическая характеристика материала, как сопротивление стали хрупкому разрушению? Что от неё зависит? Как эта характеристика иначе называется?
- 18 Как определяется сопротивление микросколу в численной форме для стали?
- 19 Кто ввёл механическую характеристику стали – сопротивление отрыву? Что она характеризует? Каков способ определения данной характеристики?
- 20 Запишите физический критерий хрупкого разрушения – критерий микроскопа. Какое отношение получило название коэффициента вязкости?

4.5 Физические модели элементарных носителей разрушения (микро-скопическая картина разрушения)

В 80-е годы развитие общезначимых концепций сильно неравновесных и нелинейных явлений (И. Пригожин, Г. Хакен, Р. Стратонович) сделало возможным дальнейшее понимание природы разрушения. Разрабатываются модели элементарных носителей разрушения – дилатонов (С.Журков и сотр.) и фрустронов (Е.Панин и сотр.) как проявление коллективных нелинейных локальных эффектов фазовых переходов в неравновесных твёрдых телах (открытых системах). Рассмотрим эти модели.

4.5.1 Дилатонный механизм прочности, пластичности и разрушения твёрдых тел

Зарождение трещины происходит путём накачки энергии из окружающей среды в разрушающую флуктуацию плотности – дилатон.

Идея о существовании флуктуаций плотности была высказана польским физиком М. Смолуховским в 1908 году для объяснения опалесценции (резкого помутнения) прозрачных сред в момент фазовых переходов. До и после фазовых переходов среда практически прозрачна. Флуктуации плотности возникают в теле спонтанно как следствие хаотического движения атомов или в результате суперпозиции упругих волн, описывающих колебания решетки кристалла. Размер области флуктуации плотности определяется *длиной свободного пробега фононов* Λ . Линейный размер Λ зависит от структурных дефектов, примесных атомов и других неоднородностей твёрдого тела, в малодефектных телах определяется температурой. *Время жизни флуктуации* $\tau_d = \frac{\Lambda}{C}$, где C – скорость звука. Дилатон – отрицательная флуктуация плотности, его можно рассматривать как короткоживущий ($\tau_d = 10^{-9} - 10^{-10}$ с) микродинамический флуктуационный дефект, внутри которого межатомные связи растянуты на величину $\varepsilon_d \gg \varepsilon_{\text{среднее}}$.

Рассмотрим основные положения *дилатонной концепции*.

1) Неравновесному состоянию тела под нагрузкой сопоставляется рождение в нём метастабильной системы квазичастиц – «газа избыточных фононов».

2) Зарождение трещины – конденсация газа избыточных фононов – результат образования критической флуктуации плотности, критического дилатона. Этот процесс осуществляется как фазовый переход. Взаимодействуя с окружающей средой, дилатоны благодаря пониженной плотности и в силу ангармонических эффектов оказываются ловушками для фононов. Это приводит к разогреву и тепловому расширению дилатонов до критической величины, распаду дилатона и возникновению в твёрдом теле микропустот.

3) Подсистему в твёрдом теле с характерным линейным размером Λ и объёмом

$$V_d = \Lambda a^2 \quad (4.31)$$

где a – межатомное расстояние с деформацией растяжения ε будем называть дилатоном мощностью ε_d . Ограничимся приближением Дебая, в котором фононы имеют одинаковую групповую скорость, равную скорости C звука. Принимается, что дилатон является физически элементарным объёмом твёрдого тела при его крупнозернистом огрублении, то есть достаточно большой подсистемой, чтобы воспользоваться принципом локального равновесия неравновесной термодинамики. Это позволяет использовать термодинамические величины и уравнение состояния твёрдого тела.

4) Кинетика дилатона как открытой системы в термостате характеризуется тремя скоростями.

Первая скорость $\mathfrak{G}_+ = \frac{\Delta W}{\Delta t}$ притока (накачки) упругой энергии фононов $W = KV_d$ в дилатон, где K – модуль упругости. Скорость накачки энергии фононов задаётся приращением энергии $\frac{\Delta W}{W} \approx \frac{\Delta \omega}{\omega}$ и минимальным интервалом времени $\Delta t \sim \omega^{-1}$, где ω – дебаевская частота. Воспользуемся далее термодинамической постоянной G Грюнайзена, которая определяет ангармонические изменения частоты при деформации ε :

$$\frac{\Delta \omega}{\omega} = G\varepsilon \quad (4.32)$$

Тогда скорость притока упругой энергии в дилатоне будет равна

$$\mathfrak{G}_+ = \frac{\Delta W}{\Delta t} = \frac{G\varepsilon W}{\Delta t} = \varepsilon G W \omega \quad (4.33)$$

Вторая характерная скорость $\mathfrak{G}_e$ – скорость установления равновесия (релаксации) в дилатоне.

Третья скорость $\mathfrak{G}_-$ – скорость рассасывания флуктуации, то есть дилатона, и установления равновесия во всей системе. При условии $\mathfrak{G}_e < \mathfrak{G}_-$ дилатон можно рассматривать локально квазиравновесным.

Скорость рассасывания дилатона за счёт выноса энергии фононами равна

$$\mathfrak{G}_- = \frac{W}{\tau_d}; \quad \text{поскольку} \quad \tau_d = \frac{\Lambda}{C}, \quad \text{где} \quad C = \frac{a}{T} = a\omega,$$

то

$$\mathfrak{G}_- = \frac{Wa\omega}{\Lambda} \quad (4.34)$$

При условии $\mathfrak{G}_+ \geq \mathfrak{G}_-$ дилатон безактивационно и необратимо поглощает избыточные фононы, достигает предельной критической деформации. Из равенства (4.31) и (4.32) следует, что критическая мощность дилатона равна

$$\varepsilon_d^* = G^{-1} \left(\frac{a}{\Lambda} \right) \quad (4.35)$$

При этом дилатон распадается, образуя зародышевую трещину. Распад происходит с огромной скоростью, определяемой временем жизни флуктуации $\tau_d \approx 10^{-9} - 10^{-10}$ с. Кумулятивный распад дилатона приобретает характер микро-взрыва.

5) Будем исходить из уравнения Дебая состояния твёрдого тела, которое для условий всестороннего (трёхосного) растяжения напряжением σ и равновесной деформации ε принимает вид:

$$\sigma = \varepsilon K - G \frac{E}{V} \quad (4.36)$$

где E – энергия колебаний в кристалле объёмом V ; K – модуль объёмного растяжения – сжатия. Отметим, что **термодинамическая постоянная Грюнрайзена**, характеризующая ангармонизм колебаний, выражается следующим образом через термодинамические свойства твёрдого тела:

$$G = \frac{\Delta\omega}{\omega\varepsilon} \left(\approx \frac{1}{\varepsilon_*} \right) = \frac{3\alpha KV}{C_V} \quad (4.37)$$

Здесь ε_* – предельная деформация межатомной связи, при которой тела теряют устойчивость и распадаются; 3α – объёмный коэффициент теплового расширения, C_V – теплоёмкость при постоянном объёме.

Используем уравнение Дебая состояния твёрдого тела применительно к критическому дилатону, полагая, что его деформация ε_d^* в объёме V_d вызвана флуктуацией энергии колебаний E на величину U , которую определим уравнением:

$$U = \frac{\varepsilon_d^* K V_d}{G} - \frac{G V_d}{G} \quad (4.38)$$

После подстановки в уравнение (4.38) выражений (4.31, 4.32 и 4.35) формула энергии образования критического дилатона – зародышевой трещины – принимает вид:

$$U = \frac{C_v}{3\alpha} \varepsilon_d^* - \frac{V_d}{G} \sigma \quad \text{или} \quad U = G^{-1} \left(\frac{a}{\Lambda} \right) \frac{C_v}{3\alpha} - \frac{\Lambda a^2}{G} \sigma \quad (4.39)$$

6) Сравним дилатонную модель разрушения с кинетическим уравнением прочности академика С.Н.Журкова:

$$\tau = \tau_0 \exp \left(\frac{U_0 - \gamma \sigma}{kT} \right) \quad (4.40)$$

Экспериментально наблюдаемая энергия активации разрушения:

$$U = U_0 - \gamma \sigma \quad (4.41)$$

где U_0 – характеристика межатомной связи, численно совпадает с энергией сублимации; величина $\gamma = (10 - 100)a^3$ (a – межатомное расстояние) является структурно чувствительной величиной, определяет активационный объём и коэффициент перенапряжения; σ – внешнее растягивающее напряжение; τ – время до разрушения; $\tau_0 - 10^{-13}$ с – величина порядка периода тепловых колебаний атомов; k – постоянная Больцмана.

Оказалось, что первое слагаемое уравнения (4.39) дилатонной модели численно совпадает с начальной энергией активации зарождения трещины U_0 в формуле (4.41):

$$U_0 = \frac{C_v}{3\alpha} \varepsilon_d^* = G^{-1} \left(\frac{a}{\Lambda} \right) \frac{C_v}{3\alpha} = \varepsilon_* \left(\frac{a}{\Lambda} \right) \frac{C_v}{3\alpha} \quad (4.42)$$

Это совпадение очень важное, поскольку тогда

$$\gamma = \left(\frac{V_d}{G} \right) = \frac{\Lambda a^2}{G} \quad \text{или} \quad \gamma = \frac{\Lambda a^3}{aG} \quad (4.43)$$

Это означает, что активационный объём дилатона много больше (в $\frac{\Lambda}{a}$ раз) атомного $\sim a^3$. В связи с этим отпадает необходимость в гипотезе о сильных локальных концентраторах напряжений. Поскольку всегда $\Lambda \gg a$, теоретическая прочность в массивных телах не может быть достигнута. Действительно, рекордно высокие значения прочности получены на “усах” и тонких полимерных волокнах.

7) Кинетическое уравнение прочности (4.40) может быть записано в другом виде, если требуется знать прочность σ_* на разрыв:

$$\sigma_* = \frac{1}{\gamma} \left(U_0 - RT \lambda \ln \frac{\tau}{\tau_0} \right) \quad (4.44)$$

Используя концепцию дилатона, уравнение (4.44) можно привести к другому виду:

$$\begin{aligned} \sigma_* &= \frac{U_0}{\gamma} - \frac{RT \lambda \ln(\tau/\tau_0)}{\gamma} = \varepsilon_* \left(\frac{a}{\Lambda} \right) \frac{C_V G}{3\alpha V_d} - \frac{GRT \lambda \ln(\tau/\tau_0)}{V_d} = \frac{\varepsilon_* K}{\frac{\Lambda}{a}} - \frac{GRT \lambda \ln(\tau/\tau_0)}{V_d} = \\ &= \varepsilon_* \left(\frac{a}{\Lambda} \right) K - \frac{GRT \lambda \ln(\tau/\tau_0)}{V_d} = \frac{K}{\frac{\Lambda}{a}} \left(\varepsilon_* - \frac{G \Lambda RT \lambda \ln(\tau/\tau_0)}{K V_d a} \right) \end{aligned}$$

Здесь $\varepsilon_d^* = \frac{\Lambda GRT \lambda \ln(\tau/\tau_0)}{a V_d K}$ – представляет собой флуктуирующую критическую деформацию межатомных связей в дилатоне V_d , при которой обеспечивается накачка энергии в локальный микроразрыв с образованием зародышевой микротрещины или поры. Тогда прочность на разрыв

$$\sigma_* = \frac{K}{\frac{\Lambda}{a}} (\varepsilon_* - \varepsilon_d^*) \quad (4.45)$$

8) Рассматриваемый дилатонный механизм разрушения твёрдых тел предполагает связь между реальной прочностью и длиной свободного пробега фононов. Как следует из (4.45), при прочих равных условиях реальная прочность тем больше, чем меньше длина свободного пробега Λ фононов. Отсюда следует, что разнообразие прочностных свойств сводится к зависимости величины Λ от структурных неоднородностей, легирующих примесей и других несовершенств реальных тел. Поэтому для решения проблемы прочности изучение зависимости длины свободного пробега фононов от различного рода структурных факторов приобретает первостепенное значение.

Необходимо подчеркнуть важную особенность дилатонного механизма.

При микровзрыве на границе дилатона возникает перепад давлений. В результате дилатон оказывается не только очагом локального разрушения, но одновременно флуктуационным источником дислокаций. Элементарные механизмы разрушения и пластической деформации взаимосвязаны и действуют одновременно. Этим разрешается многолетняя дискуссия о том, что первично: разрушение или пластическая деформация.

4.5.2 Фрустронная модель элементарного носителя разрушения

Несмотря на очевидные успехи, дилатонная модель не может объяснить все особенности разрушения, в частности, выпадают из рассмотрения различия в поведении хрупких и вязких тел. Это связано с игнорированием сдвиговой (скалывающей) составляющей деформации ε_s , флуктуации которой (ε_s) приводят к разрыву межатомных связей, тогда как рост дилатации $|\Delta\varepsilon_d|$ уменьшает энергию активации U зарождения дилатона.

Однако нельзя утверждать, что обусловленное появлением дилатона поле деформации ε_d означает лишь пропорциональное увеличение сдвиговой компоненты ε_s . Перестройка потенциального рельефа кристалла $U \sim \varepsilon_d$ под напряжением $\sigma \sim \varepsilon_d$ приводит к кинетическому фазовому переходу в неравновесное состояние, в котором кристалл приобретает возможность течь подобно жидкости. При этом кроме слабовозбуждённых атомов, совершающих колебания вблизи узлов решётки, появляются сильновозбуждённые (атом-вакансионные состояния), которые безактивационно движутся над флуктуирующим рельефом Пайерлса. Обеспечивается дрейфовый режим их переноса. Колебаниям слабо-возбуждённых атомов соответствуют коллективные возбуждения – квазичастицы **фононы** (звуковые волны).

Фононы имеют реактивный закон дисперсии (зависимость фазовой скорости от длины волны или частоты)

$$\omega(k) = Ck \quad (4.46),$$

где $\omega = \frac{2\pi}{T}$, $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ – волновое число, C – скорость звука.

Соотношение (4.46) означает, что $\lambda = CT$, где T – период колебаний.

Движению сильновозбуждённых атомов сопоставляют коллективную моду (возбуждение), связанную с дрейфом, называемую **релаксонами**. Название «релаксоны» ассоциирует с тем, что такие квазичастицы (сильные, нелинейные возбуждения) имеют релаксационный закон дисперсии

$$\omega(k) = i\nu k^2, \quad (4.47)$$

здесь ν – кинематическая вязкость среды, i – мнимое число.

Интенсивность дрейфовых потоков релаксонов зависит от распределения плотности бозе-конденсата релаксонов.

Для описания вязко-упругой среды кроме сдвиговой деформации ε_s вводится величина ΔN – разность заселенности уровней сильно- и слабовозбуждённых состояний. Если $\Delta N > \Delta N_{\text{критич}}$ стационарное распределение бозе-конденсата релаксонов обнаруживает солитонообразные провалы на однород-

ном фоне (**солитон** – единичная волна в нелинейной активной среде). Образование тёмного солитона означает локальное ухудшение пластичности и концентрацию сдвиговых напряжений. Условие стабилизации тёмного солитона и образования трещины скола находится из сопоставления скорости v_- оттока упругой энергии при взаимодействии релаксонов и скорости v_+ её накачки за счёт внешней нагрузки, по аналогии с анализом образования критического дилатона ε_d^* .

$$v_- = \frac{\Delta W}{\Delta t}; \quad v_+ = W_S \omega_D, \quad (4.48)$$

где ω_D – дебаевская частота.

Упругая энергия сдвига $W_S \sim \mu \alpha^3$, где μ – модуль сдвига. Принимаем, что ΔW_S определяется формулой типа Грюнайзена для фононов.

$$\frac{\Delta W_S}{W_S} = G_r \cdot \varepsilon_S, \quad (4.49)$$

где G_r – параметр ангармонизма релаксонов, аналог параметра Грюнайзена для фононов.

Интервал времени для Δt задаётся частотой релаксации ω_r :

$$\Delta t \sim \frac{1}{\omega_r}; \quad \omega_r = v \cdot k^2 < v \cdot \left(\frac{2\pi}{\alpha} \right)^2, \quad (4.50)$$

где $\frac{2\pi}{\alpha}$ – волновое число для самой короткой длины волны в кристалле.

Из условия $v_+ = v_-$, используя формулы (4.48–4.50), находим ε_s^* :

$$v_+ = W_S \cdot \omega_D = v_- = \frac{\Delta W_S}{\Delta t} = \frac{G_r \cdot \varepsilon_s^* \cdot W_S}{\Delta t} = G_r \cdot \varepsilon_s^* \cdot W_S \cdot v \cdot \left(\frac{2\pi}{\alpha} \right)^2,$$

откуда

$$\varepsilon_s^* = \frac{\omega_D}{G_r \cdot v \cdot \left(\frac{2\pi}{\alpha} \right)^2} = \frac{\alpha^2 \cdot \omega_D \cdot G_r^{-1}}{2\pi v \cdot 2\pi} \approx R_e \cdot G_r^{-1} \quad (4.51)$$

Здесь $\frac{\alpha^2 \omega_D}{2\pi v} \equiv R_e$ – эквивалент числа Рейнольдса – гидродинамического параметра.

Элементарный носитель разрушения при критической деформации скола ε_s^* получил название **фрустрон** (от frustration – крушение надежд)

$$\varepsilon_{fr} = \varepsilon_s^* \approx R_e \cdot G_r^{-1} \sim (vG_r)^{-1} < 1 \quad (4.52)$$

Величина ε_s^* зависит, в отличие от дилатона ε_d^* , не только от ангармонизма колебаний (параметра G), но и от свойств текучести среды v – кинематической вязкости. По определению $\varepsilon_{fr} < 1$, и эффективное число Рейнольдса R_e удовлетворяет условию $R_e < G_r^{-1}$, отвечающему ламинарному течению, обусловленному наличием релаксонов. Физически это означает, что пластическое течение не размывает элементарный носитель разрушения в материалах с кинематической вязкостью, превышающей критическое значение.

$$v_{крит} = G_r \cdot \alpha^2 \cdot \omega_D \quad (4.53)$$

У вязких материалов конвективные процессы пластического течения препятствуют образованию фрустронов, **вязкое разрушение происходит по дилатонному механизму**. Хрупкие материалы имеют высокую кинематическую вязкость. **Хрупкое разрушение реализуется по фрустронному механизму**.

Таким образом, **фрустронно-дилатонная модель** элементарных носителей разрушения твёрдых тел, предложенная синергетикой конденсированных сред, учитывает влияние нормальных и касательных (растягивающих и сдвиговых) напряжений и соответствующих деформаций. Элементарные очаги разрушения возникают в результате кинетических фазовых переходов в локальных участках систем вдали от равновесия. В основе хрупкого разрушения лежит микроскол.

Фрустрон – элементарный очаг разрушения – субмикротрещина скола. Фрустрон зарождается внутри области дилатации как задержанный сдвиг. Появление фрустрона обусловлено критическим сочетанием слабо и сильновозбужденных состояний, что даёт солитонное решение в распределении бозе-конденсата релаксонов. Солитоны соответствуют структурным дефектам – дислокациям.

4.5.3 Контрольные вопросы к разделу 4.5

- 1 Что представляет собой дилатон? Чем определяется размер области флуктуации плотности?
- 2 От чего зависит линейный размер длины свободного пробега фононов?
- 3 Как определяется время жизни флуктуации?
- 4 Какими скоростями характеризуется кинетика дилатона?
- 5 Как называется и определяется первая скорость? Что определяет термодинамическая постоянная Грюнаизена? Чему равна скорость притока упругой энергии в дилатоне с учетом постоянной Грюнаизена?
- 6 Как называется вторая скорость и третья скорость?
- 7 Как определяется скорость рассасывания дилатона за счёт выноса энергии фононами? Чему равна критическая мощность дилатона?
- 8 Чем определяется скорость распада дилатона? Как постоянная Грюнаизена выражается через термодинамические свойства твёрдого тела?
- 9 Запишите формулу энергии образования критического дилатона.
- 10 Запишите формулы, определяющую критическую деформацию межатомных связей в дилатоне и прочность на разрыв.
- 11 Почему для решения проблемы прочности изучение зависимости длины свободного пробега фононов от различного рода структурных факторов приобретает первостепенное значение?
- 12 Что первично: разрушение или пластическая деформация.
- 13 Почему дилатонная модель не может объяснить все особенности разрушения?
- 14 К чему приводит перестройка потенциального рельефа кристалла под напряжением?
- 15 Что представляют собой фононы? релаксоны? солитоны?
- 16 Как зависит фазовая скорость от длины волны или частоты?
- 17 Какая величина, кроме сдвиговой деформации, вводится для описания вязко-упругой среды?
- 18 Как находится условие стабилизации тёмного солитона и образования трещины скола? Что называют фрустроном?
- 19 От чего зависит величина критической деформации скола?
- 20 По какому механизму происходит вязкое разрушение материалов? хрупкое разрушение материалов?

4.6 Синергетика и теория фракталов – методологическая основа решения актуальных проблем физики твердого тела

Неустойчивости и различного рода структурирование – это обычные процессы для материаловедения. Поскольку эти процессы оказывают существенное влияние на свойства материалов, необходимо их понимание с тем, чтобы научиться ими управлять. Проведенный анализ диссипативных структур, самоорганизующихся в различных по своей природе системах (химических, физических, биологических и др.), показывает, что эти структуры обладают общими свойствами (см. раздел 3). Выявление общих закономерностей процесса самоорганизации еще раз подчеркнуло одну из наиболее привлекательных сторон синергетики – ее универсальность, заключающуюся в возможности сведения огромного, множества явлений к нескольким основным закономерностям. Использование этих закономерностей открывает новые перспективы в познании сложных процессов, протекающих в металлах и сплавах при их получении и обработке.

Оказалось, что диссипативных структуры, самоорганизующиеся в неравновесных нелинейных системах, можно количественно описывать **фрактальной размерностью**. Данное обстоятельство стимулировало развитие нового направления в физике твердого тела **теории фракталов и фрактального материаловедения**.

4.6.1 Понятие о фракталах

Понятие фрактал (от лат. *fractus* – расколотый, раздробленный, состоящий из фрагментов) ввел в 1975 году французский ученый Бенуа Мандельброт для обозначения нерегулярных, но самоподобных структур с **дробной** (нецелой) размерностью. Таким образом, фрактальная размерность отличается от евклидовой целочисленной размерности (0, 1, 2, 3) дробностью размерности. Хотя теория дробной размерности была разработана в математике еще в 20-е годы, однако в физику эти представления вошли недавно. Рождение фрактальной геометрии связано с выходом в 1977 году книги Мандельброта «Фрактальная геометрия природы». Позднее Мандельброт дал такое определение фрактала: **«Фракталом называется структура, состоящая из частей, которые в каком-то смысле подобны целому»**.

Математики говорят: «Фрактал – бесконечно самоподобная фигура». А самое удивительное – это фигура с дробным числом измерений, например, 0,63-мерная или, скажем, 1,6- мерная. Но как размерность может быть нецелой? Ведь размерность характеризует геометрический объект числом переменных, которые необходимо задать, чтобы указать местоположение одной из точек объекта. Например, для задания точки на линии необходимо одно единственное число, точки на поверхности – два числа, точки на объеме – три числа. Но су-

ществуют и другие более абстрактные способы определения размерности. Представим отрезок в один сантиметр. Сколько отрезков длиной в $1/10$ см понадобится для того, чтобы покрыть этот отрезок? Очевидно, десять. А сколько квадратов со стороной в $1/10$ см потребуется для того, чтобы покрыть квадрат со стороной в 1 см? Сто. Куб со стороной в 1 см можно покрыть тысячей кубами с ребрами в $1/10$ см. Мы видим, что размерность появляется в показателях степеней: 10^1 , 10^2 , 10^3 . Эта последовательность *не зависит от масштаба*, выбранного для измерения мерного отрезка, стороны мерного квадрата или ребра мерного куба. Важно следующее: геометрический объект характеризуется минимальным числом «клеток», необходимых для покрытия объекта.

Обозначим показатель степени в вышеуказанных соотношениях d , число клеток N , а размер «клетки» u . Тогда из рассмотренных нами примеров получим выражение

$$N = \left(\frac{1}{u}\right)^d \quad (4.54)$$

Перейдем от обычных геометрических объектов к фрактальным. Классическим примером фрактального объекта может служить *канторовское множество* или «*пыль*» *Кантора*. Возьмем единичный отрезок. Разделим его на три равные части, а затем удалим среднюю треть. Повторим ту же операцию снова: разделим каждый из двух оставшихся отрезков на три равные части и удалим средние трети. Повторяя эту операцию до бесконечности, мы получим странную «пыль» точек – бесконечное множество «микроотрезков», которые уже невозможно охарактеризовать их длинами. Однако этому предельному множеству можно приписать некоторую размерность, если использовать подход, рассмотренный выше.

После первой операции деления отрезка на три равные части и удаления средней трети для покрытия получившегося множества нужно взять два отрезка длиной $1/3$. После второй операции понадобятся четыре отрезка длиной $1/9$, после третьей – восемь отрезков длиной $1/27$. После n -ой операции число N отрезков равно 2^n , а длина каждого из отрезков равна $1/3^n$. Чтобы определить размерность канторовского множества d устремим N к бесконечности, а размер u к нулю. Получим соотношение

$$2^n = (3^n)^d$$

откуда

$$d = \log 2 / \log 3$$

что примерно 0,63 (удивительно близкое знаменитому числу Фибоначчи, которое равно 0,618). Следовательно, *канторовскому множеству*, которое уже не линия, но и не точки, соответствует дробная размерность, заключенная между 0 (размерность точки) и 1 (размерность линии).

Аналогичным образом можно построить двухмерные геометрические объекты с размерностью между 1 и 2, и трехмерные с размерностью между 2 и 3. Действительно, если каждая сколь угодно малая часть фрактальной линии содержит в себе уменьшенную копию всей линии, то значит, она состоит не из точек, а из функций. И значит, это уже не линия в евклидовом смысле «длина без ширины», а нечто большее, некая «толстая линия». То есть **фрактальная линия** – уже не одномерная евклидова линия, но еще и не двумерная поверхность. Фрактальная линия есть некая «толстая линия» дробной размерности больше единицы и меньше двух. Чем более изломана фрактальная линия, тем ближе к двум ее фрактальная размерность. Соответственно, и **фрактальная поверхность** – это уже не поверхность размерности 2, но еще не объемное тело размерности 3. Фрактальная поверхность есть некая, так сказать, «вспененная» поверхность дробной размерности больше двух, но меньше трех.

Открытие Мандельбротом фрактальных объектов позволило по-новому взглянуть на удивительный мир форм, существующих в природе. Большинство этих форм не являются правильными геометрическими объектами, но могут быть охарактеризованы дробными размерностями. Например, облако является не каким – нибудь объемным телом или поверхностью, а неким промежуточным геометрическим объектом с размерностью, заключенной между 2 и 3. Примером естественных, природных, фракталов являются коллоидные агрегаты, облака, полимеры, пористые среды, дендриты кристаллов и другие. Фрактальность природных объектов показывает наличие упорядоченности в структурах, кажущихся внешне беспорядочными.

Бесконечное дробление и подобие мельчайших частей целому – это есть принцип «устройства» природы. В настоящее время придумано множество искусственных моделей, иллюстрирующих этот принцип.

Фракталы обладают двумя важнейшими признаками: **изломанностью и самоподобием**. Изломанность фрактала понятна и визуально, и математически как отсутствие производной в каждой точке излома. Самоподобные фрактальные функции, не имеющие производной ни в одной своей точке, были открыты еще в конце XIX века (функции Вейерштрасса). Однако по эстетическим соображениям эти патологические «некрасивые» функции были решительно отвергнуты всеми математиками. Для осознания могущества этой идеи потребовалось еще сто лет. Итак, самоподобные фрактальные функции, не имеющие производной ни в одной своей точке, описывают весь реальный мир. Математики говорят: «Фрактал – бесконечно самоподобная фигура». Итак, общим для фрактальных структур является их самоподобие – основное свойство, обеспечивающее выполнение во фракталах основного закона – закона единства в многообразии мироздания.

Фракталы могут быть **линейными и нелинейными**. Линейные фракталы – это фракталы, определяемые линейными функциями, то есть уравнениями первого порядка. Они проявляют самоподобие в самом бесхитросном «прямолинейном» виде: любая часть есть уменьшенная точная копия целого. Значительно богаче и разнообразнее нелинейные фракталы – это фракталы, опреде-

ляемые нелинейными функциями, то есть уравнениями степени выше первой. Более разнообразным является и самоподобие нелинейных фракталов: в них часть есть неточная, а похожая деформированная копия целого.

«Фрактал, – пишет американский ученый Джеф Проузис, – это объект, обладающий бесконечной сложностью, позволяющий вблизи рассмотреть не меньше деталей, чем издалека. Классический пример – Земля. Из Космоса она выглядит как шар. Приближаясь к ней, мы обнаружим океаны, континенты, побережья и цепи гор. Позднее взору предстанут более мелкие детали: кусочек земли на поверхности горы, столь же сложный и неровный, как сама гора. Потом покажутся крошечные частички грунта, каждая из которых сама является фрактальным объектом».

Итак, конец XX века ознаменовался не только открытием поразительно красивых и бесконечно разнообразных структур, названных фракталами, но и осознание фрактального характера геометрии природы. Если на заре естествознания Галилей утверждал, что книга природы написана на языке окружностей и треугольников, то к концу XX века стало ясно, что книга природы написана на языке нелинейных фракталов.

И если на начальной стадии в концепции фрактала доминировало компьютерное моделирование, сегодня все более популярным становится математический аппарат интегрирования и дифференцирования дробного порядка. Это имеет фундаментальное значение не только для самой математики, но и для развития естественных и гуманитарных направлений.

Теория фракталов, начиная с геометрических понятий, оказалось, охватывает и физические объекты, выходящие за рамки геометрической версии. Физические системы с фрактальной структурой обладают уникальными свойствами с точки зрения общеизвестных свойств. К свойствам такого рода, например, относится степенная зависимость между параметрами системы. Фракталы иначе рассеивают электромагнитное излучение, по-другому колеблются и звучат, иначе проводят электричество, по фракталам иначе происходит диффузия вещества. Аналитические методы в теории фракталов, основанные на математическом аппарате интеродифференцирования дробного порядка, позволяет наиболее тонко и тщательно исследовать фрактальные функции в физике.

Как ни парадоксально, открытие фрактальных множеств не только установило существование непрогнозируемых процессов, но и научило человека ими управлять, поскольку неустойчивость открытых систем делает их чрезвычайно чувствительными к внешнему воздействию. При этом открытые системы демонстрируют удивительную пластичность: чутко реагируя на толчок извне, они сохраняют тип движения. Теперь становится понятно, почему мир создан из хаоса. Понятие детерминированного хаоса соединило невозможное: сняло противоречие между хаосом и порядком, выведя науку на настоящее понимание природных процессов и форм. Изучение фракталов и синергетики меняет привычные представления людей об окружающем мире и вместе с тем помогает постичь этот мир в его развитии.

4.6.2 Числа Фибоначчи и пропорция "золотого сечения"

Дробная метрическая размерность фрактальных диссипативных структур характеризует не только их геометрический образ, но отражает процессы их образования и эволюции, определяет динамические свойства. Традиционные же методы геометрии, широко используемые в естествознании, основаны на приближенной аппроксимации структуры исследуемого объекта фигурами типа отрезок, многоугольник, многогранник, у которых топологическая и метрическая размерности совпадают и равны 1,2,3.

Известно множество примеров своеобразной упорядоченности структуры как живой, так и неживой природы, заключающейся в особом расположении однородных элементов, описываемых числами Фибоначчи. **Числами Фибоначчи** называются члены численной последовательности, каждый из которых, начиная с третьего, равен сумме двух предыдущих. Например:

$$1, 1, 2, 3, 5, 8, 13, 21, 34, 55, 89, 144 \dots \quad (4.55)$$

Рассмотрим классическую задачу Фибоначчи о росте деревьев. Пусть дерево растет так, что каждая ветвь первый год тянется вверх или в сторону, а затем, начиная со второго года, ежегодно дает по одному боковому побегу. На рисунке 4.14 приведена схема роста дерева. Можно видеть, что, начиная с третьего года, число веток соответствует последовательности Фибоначчи.

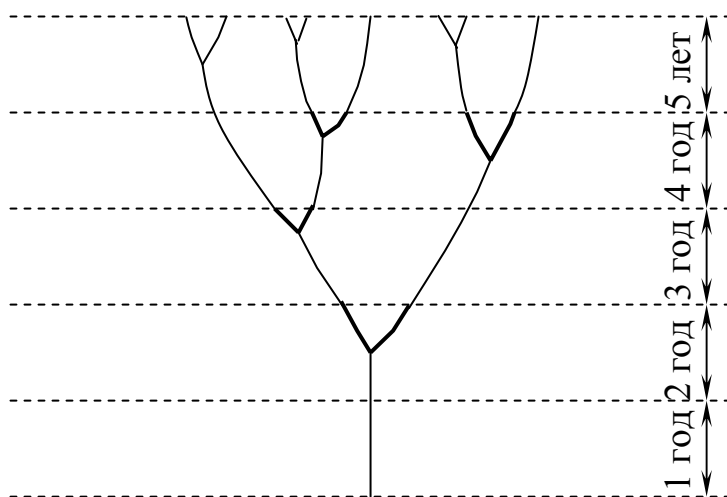


Рисунок 4.14

Геометрическое подобие, являющееся фундаментальной основой эволюции материи и одновременно методом конструирования ее форм, стало инструментом и методом работы человеческого сознания. Еще у древних греков господствовали воззрения о существовании универсальных сценариев развития природы и соответствующих им геометрических образов. К Пифагору и Платону восходит идея о связи гармонии природы с гармонией чисел, интерес к ко-

торой не утихает на протяжении всей истории развития естественных наук. Открытие Фейгенбаумом (1978 г) скейлингового закона эволюции нелинейных динамических систем, испытывающих бифуркации, стимулировали новую волну исследований математической гармонии природы.

Со времен Возрождения в математике бытует определение особого случая разделения целого на две неравные части, которому присущи два рода связи частей целого между собой: аддитивная и мультипликативная. Примером последней является известная еще в античные времена пропорция "золотого сечения". Классический пример золотого сечения – деление отрезка в среднепропорциональном отношении, когда целое так относится к своей большей части, как большая к меньшей:

$$\frac{a+b}{b} = \frac{b}{a} \quad (4.56)$$

Члены геометрической прогрессии вида

$$a_n = a_1 q^{n-1}, \quad (4.57)$$

где $n = 1, 2, 3, \dots$

образуют числа Фибоначчи, т.е.

$$a_n = a_{n-2} + a_{n-1}, \quad (4.58)$$

если q будет корнем квадратного уравнения $q^2 = 1 + q$. Корни этого квадратного уравнения совпадают с отношениями золотого сечения (4.56).

Другим уникальным свойством чисел Фибоначчи является универсальный предел отношения соседних чисел Фибоначчи с большими номерами, который равен золотому отношению:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{a_n}{a_{n-1}} = 1,618 \quad (4.59)$$

Природа дает множество примеров расположения однородных элементов, описываемых числами Фибоначчи. Например, число спиралей в чешуйках еловых шишек, число лепестков у ромашек, в расположении семечек крупного подсолнуха.

Очевидно, свойство самоподобного преобразования структур заложено в растениях генетическим кодом. В стехиометрии химических соединений встречаются числа Фибоначчи. Можно предположить, что некоторые инварианты, которые мы наблюдаем в макроскопическом масштабе, связаны с золотым отношением, сохраняющимся в микроскопических масштабах вплоть до атомного

уровня. Названию "золотое сечение" (или "золотое число") мы обязаны Леонардо да Винчи. Эти эпитеты отражали обнаруженную универсальность феномена, подтвержденную в дальнейшем законами физического и биологического мира.

Перспективным при исследовании фрактальных структур оказалось использование обобщенной золотой p – пропорции. **Обобщенной золотой p – пропорцией** называют положительный корень d уравнения

$$X^{p+1} = X^p + 1,$$

задающего бесконечное число пропорциональных делений отрезка при $p \rightarrow \infty$. При $p = 1, 2, 3, 4 \dots$ решение этого уравнения дает следующую последовательность обобщенных золотых p – пропорций:

$$d_1 = 1,618 \rightarrow d_2 = 1,465 \rightarrow d_3 \rightarrow 1,380 \rightarrow d_4 \rightarrow 1,324 \dots\dots \quad (4.60)$$

Золотая p – пропорция обладает теми свойствами, что при вычитании единицы она переходит в числа обратные их p – й степени, т.е.

$$d_p - 1 = d_p^{-p} \quad (4.61)$$

и образует ряд d_p^{-p} p – пропорций:

$$0,618 \rightarrow 0,465 \rightarrow 0,380 \rightarrow 0,324 \dots\dots \quad (4.62)$$

Использование обобщенных p – пропорций позволило определять **спектры самоподобных размерностей фрактальных множеств**.

Физический смысл универсальности золотого сечения в природе еще не раскрыт. Ключом к его пониманию служит принцип минимума производства энтропии, контролирующий самоорганизацию и самооптимизацию диссипативных структур при переходах устойчивость – неустойчивость – устойчивость.

4.6.3 От дислокационного к фрактальному материаловедению

Развитие физики твердого тела в последние три десятилетия привели к важным открытиям и формированию новой парадигмы управления свойствами материалов **путем управления фрактальной мезоструктурой**. Новая парадигма связывает свойства материалов не с исходной микроструктурой, а **динамической мезоструктурой**, самоорганизующейся в неравновесных условиях.

Динамика трансформации старой структуры, потерявшей устойчивость, в новую контролируется принципами синергетики. Система в состоянии неравновесности способна к самоорганизации диссипативных структур и к самовы-

бору оптимальной фрактальной структуры, необходимой для дальнейшего функционирования системы как целой.

Использование принципов синергетики и теории фракталов позволяет устанавливать связь между процессами, протекающими на различных масштабных уровнях (микро, мезо, макро). Как известно, линейная механика разрушения рассматривает только заключительный этап эволюции системы - разрушение. Физическая мезомеханика структурно-неоднородных сред акцентирует свое внимание на кооперативном взаимодействии процессов пластической деформации и разрушения на различных масштабных уровнях с введением адекватного для каждого уровня математического аппарата. Установлено, что пластическое течение происходит одновременно на нескольких уровнях, причем трансляция на одном уровне, обязательно сопровождается поворотом на более высоком уровне и наоборот.

Количественный анализ мезоструктур требует применения подходов фрактальной геометрии, позволяющей устанавливать взаимосвязь между процессами самоорганизации фрактальных мезоструктур со свойствами материалов. Понимание фрактальной природы самоорганизации дислокационных структур позволило перейти от *дислокационного* к *фрактальному материаловедению*.

Дислокационное материаловедение определило принципы управления свойствами материалов путем воздействия на элементы структуры, отвечающие *микроуровню* (дислокации). Фрактальное материаловедение ставит своей задачей на основе подходов синергетики и теории фракталов разработать принципы управления свойствами материалов путем формирования пространственно-упорядоченных самоподобных структур на *мезоуровне*.

Следует отметить, что концепция фракталов пока еще не нашла должного практического отражения в исследованиях материаловедов в силу своей относительной новизны. Сложилась ситуация подобная введению представлений о дислокациях. Известно, что длительное время в материаловедении концепция дислокаций не находила признания. Вероятно, переход к новым представлениям требует временного интервала, в течение которого идея становится прозрачной.

Представления о дислокациях, как о линейных дефектах кристаллической решетки, были введены в 20-30-х годах XX века для объяснения низкой прочности реальных кристаллов по сравнению с теоретической, рассчитанной на основе учета сил межатомной связи в идеальном кристалле. Однако осознание фундаментальной значимости новых представлений для развития материаловедения пришло лишь через 20 лет, после того как на основе дислокационной теории были раскрыты не только природа низкой прочности реальных кристаллов, но и нашли объяснения множество феноменов, сопровождающих пластическую деформацию (зуб текучести, эффект Портвена — Ле Шателье, стадийность пластического течения, наличие пороговых дислокационных субструктур и другие).

К 60-70 годам в физике твердого тела сформировалось новое научное направление — «физика дефектов в кристаллах», приведшее к развитию *дислока-*

ционного материаловедения. На базе этого направления были созданы новые технологические методы управления свойствами металлов и сплавов путем изменения их дислокационной структуры с помощью комбинации теплового и механического воздействия. Это позволило получить пространственно-упорядоченную субструктуру.

Успехи современного материаловедения в значительной степени связаны с установлением зависимости свойств материалов от их состава, способов получения и обработки. Управление свойствами материалов традиционно базируется на триаде Курнакова: *состав – структура – свойства*. Изменение микроструктуры осуществляется не только путем изменения химического состава, но и путем целенаправленного введения различными приемами препятствий для движения дислокаций. Обобщение большого экспериментального массива исследований фазовых равновесий, изменений свойств и их зависимостей от состава позволило в свое время Н.С. Курнакову выделить самостоятельный раздел общей химии, который он назвал физико-химическим анализом материалов.

Таким образом, до недавнего времени проблема решалась на базе **дислокационного материаловедения** и на основе **законов равновесной термодинамики**, установленных для **изолированных систем**, т. е. для таких систем, которые не допускают переноса энергии и вещества через свои границы. Однако, как отмечалось выше, мир, в котором мы живем - сложноорганизован. Он открыт, т.е. является не ставшим, а становящимся, не просто существующим, а непрерывно возникающим миром. Открытые системы в отличие от идеализированных замкнутых (изолированных) систем обмениваются с окружающими телами как энергией и веществом, так и информацией.

В силу сказанного, реальной представляется возможность установления связи между составом, фрактальной структурой и свойствами материала. Это ставит задачу развития фрактального материаловедения. Согласно современным представлениям, в электронной структуре металла и сплава уже заложен генетический код, осуществляющий приспособление системы к внешнему воздействию. Задача управления свойствами сплавов и получение материалов с заданными свойствами сводится к отысканию способов целенаправленного усиления обратных связей. Указанная проблема сама по себе достаточно сложна и требует объединения физиков, химиков, механиков, материаловедов и технологов. Как отметил Г.Р. Иваницкий, в наших знаниях имеется пробел, не позволяющий понять единую картину мира. Объединение подходов неравновесной динамики и теории фракталов повысит наши познания сложного.

Необходимо акцентировать внимание на том, что создание гетерофазных полупроводников с фрактальной на атомном уровне структурой уже привело к прорыву в получении полупроводников с уникальными свойствами, завершившимся присуждением Ж.И.Алферову Нобелевской премии. Это означает, что путь создания материалов с управляемой фрактальной структурой будет в XXI веке приоритетным. Синергетика является теорией нелинейных динамических систем, равно пригодной для анализа свойств механических, термодинамиче-

ских, физических, химических, биологических и других сложных систем. Теория фракталов является базой для количественного описания диссипативных структур. Фрактальный анализ произвел революцию в характере исследований, ведущихся в различных областях науки: метеорологии, медицине, геологии, экономике, физике и т. д.

Рассмотренное выше, означает необходимость **объединения подходов синергетики и теории фракталов**, так как диссипативные структуры, самоорганизующиеся в открытых системах, **фрактальны**. Синергетика расширила понятие структуры, придало ей универсальность, а теория фракталов позволила ввести новые количественные показатели структур в виде **фрактальной размерности**. Это является **базой для моделирования структур** различной природы. Следует иметь в виду, что различные уровни структуры (микро-, мезо- и макромасштаб) можно описать в рамках мультифрактального анализа.

В связи с этим уместно привести следующее высказывание Н.Н. Моисеева «...река знаний действительно распадается на все большее число рукавов и проток, но это не приводит к их усыханию, ибо непрерывно идет обратный процесс». В реке знаний появились новые протоки — синергетика и представление о фракталах. Их объединение сулит, в частности, прорыв в области материаловедения.

4.6.4 Контрольные вопросы к разделу 4.6

- 1 Что такое фрактал? Кто и с какой целью ввел понятие фрактала?
- 2 Какое определение фрактала дал Мандельброт? Какие способы определения размерности вы знаете?
- 3 Что такое канторовское множество или «пыль» Кантора? Как определить размерность канторовского множества?
- 4 Что такое фрактальная линия? фрактальная поверхность? Приведите примеры естественных, природных, фракталов.
- 5 Что означают такие понятия как изломанность и самоподобие фрактала?
- 6 Дайте определение самоподобным фрактальным функциям. Кто их открыл?
- 7 Какие фракталы называются линейными? нелинейными?
- 8 Какие числа называют числами Фибоначчи? Рассмотрите задачу Фибоначчи о росте деревьев и классические примеры золотого сечения.
- 9 Что называют обобщенной золотой p – пропорцией? Какими свойствами обладает золотая p – пропорция? Что позволило определять использование обобщенных p – пропорций?
- 10 Какие явления смогла объяснить дислокационная теория? Какое научное направление привело к развитию дислокационного материаловедения? На чем

базируется управление свойствами материалов в дислокационном материаловедении?

- 11 С чем связывает свойства материалов новая парадигма? В чем отличие физической мезомеханики структурно-неоднородных сред от линейной механики разрушения?
- 12 Каковы цели и задачи дислокационного материаловедения? фрактального материаловедения?
- 13 Что является базой для моделирования структур различной природы?

Список использованных источников

- 1 Баррет, Ч.С. Структура металлов: [пер. с англ.]. В двух частях. Ч. 1 /Ч.С. Баррет, Т.Б. Масальский. – М.: Металлургия, 1984. – 352 с.: ил.
- 2 Горелик, С.С. Рентгенографический и электроннооптический анализ: учебное пособие /С.С. Горелик, Л.Н.Расторгуев, Ю.А. Скаков. – М.: Металлургия, 1970. – 366 с.: ил.
- 3 Пинес, Б.Я. Лекции по структурному анализу: учебное пособие / Б.Я. Пинес. – Харьков: Изд-во Харьковского ун-та, 1967. – 476 с.: ил.
- 4 Косолапов, Г.Ф. Рентгенография: учебное пособие /Г.Ф. Косолапов. – М.: Высшая школа, 1962. – 332 с.: ил.
- 5 Епифанов, Г.И. Физика твердого тела: учебное пособие /Г.И. Епифанов. – М.: Высшая школа, 1977. – 288 с.: ил.
- 6 Уэрт, Ч. Физика твердого тела: [пер. с англ.] /Ч.Уэрт, Р.Томпсон. – М.: Мир, 1984. –568с.: ил.
- 7 Китель, Ч. Введение в физику твердого тела: [пер. с англ.] /Ч. Китель. – М.: Наука, 1978. –792с.: ил.
- 8 Мешков, Ю.Я. Структура металла и хрупкость стальных изделий / Ю.Я Мешков, Г.А. Пахаренко. - Киев: Наукова думка, 1985. – 268 с.: ил.
- 9 Владимиров, В.И.Физическая природа разрушения металлов /В.И. Владимиров. – М.: Металлургия, 1984.–280 с.: ил.
- 10 Иванова, В.С.Разрушение металлов / В.С. Иванова. – М.: Наука, 1979. – 159 с.: ил.
- 11 Физика прочности и пластичности / Под редакцией академика С.Н. Журкова. – Л.: Наука, 1986. – 152 с.: ил.
- 12 Тихоплав, В.Ю. Гармония хаоса, или фрактальная реальность / В.Ю. Тихоплав, Т.С. Тихоплав. - СПб.: Весь, 2003. - 352 с.: ил.
- 13 Савченков, Э.А. Основы неравновесной термодинамики и синергетики открытых систем: учебное пособие / Э.А. Савченков. – Оренбург: ОГУ, 2002. – 38 с.: ил.
- 14 Шашкова, Л.В. Введение в синергетику. От классической (равновесной) к современной (неравновесной) термодинамике и синергетике: учебное пособие / Л. В. Шашкова. – Оренбург: ГОУ ВПО ОГУ, 2006. – 146 с.: ил.
- 15 Иванова, В.С. Синергетика и фракталы в материаловедении / В.С. Иванова, А.С. Баланкин, И.Ж. Бунин, А.А. Оксогоев. – М.: Наука, 1994. – 383 с.: ил.
- 16 Панин, В.Е. Структурные уровни пластической деформации и разрушения / В.Е. Панин [и др.] – Новосибирск: Наука. Сиб. отд. – ние, 1990. – 255 с.: ил.
- 17 Олемской, А.И. Синергетика конденсированной среды / А.И. Олемской, А.А. Кацнельсон – М: Едиториал УРСС, 2003. – 336 с.: ил.