

05

Неоднородная пластическая деформация аморфных металлических сплавов под действием квазистатической механической нагрузки

© Е.Е. Слядников,^{1,2} И.Ю. Турчановский¹

¹ Федеральное исследовательское учреждение Институт вычислительных технологий СО РАН, 630090 Новосибирск, Россия

² Томский государственный университет систем управления и радиоэлектроники, 634034 Томск, Россия
e-mail: eeslyadnikov@gmail.com

Поступило в Редакцию 25 апреля 2022 г.

В окончательной редакции 8 октября 2022 г.

Принято к публикации 9 октября 2022 г.

Сформулирована и обоснована гипотеза о том, что квазистатическая деформация в аморфном металлическом сплаве есть сложный релаксационный многоэтапный процесс, представляющий собой упорядоченную во времени иерархическую последовательность взаимосвязанных структурных переходов первого рода. Эти неравновесные процессы последовательно протекают на различных масштабных пространственно-временных уровнях, начиная с самого низшего уровня — кластера атомов первой координационной сферы со временем релаксации τ_η , затем среднего уровня — нанокластера атомов пятой координационной сферы со временем релаксации τ_φ , наконец, высшего уровня — атомов полосы скольжения с пространственным масштабом 10 nm и временем релаксации τ , причем $\tau \gg \tau_\varphi \gg \tau_\eta$. Они сопровождаются превращениями различных видов потенциальной энергии атомов (упругой, неупругой, пластической деформации, ZST) друг в друга. Построены механизм и модель неравновесного перехода упругое механическое состояние — состояние с зонами сдвиговой трансформации, механизм и модель локализованной пластической деформации в аморфном металлическом сплаве. В интервале неединственности в ответ на локально внесенное возмущение возникает бегущая автоволна, переводящая полосу скольжения из режима неупругой деформации в режим пластической деформации. Проведены оценки модельных параметров и вычислены важные физические свойства пластической деформации.

Ключевые слова: аморфно-металлические сплавы, механическая нагрузка, пластическая деформация, неравновесный структурный переход, синергетическая модель, кинетические уравнения, автоволна.

DOI: 10.21883/JTF.2023.01.54069.114-22

Введение

Карта механических состояний аморфно-металлических сплавов (АМС) в параметрах температура–приложенное напряжение σ/μ (μ — модуль сдвига) [1–4] показывает, что в области от абсолютного нуля до комнатной температуры и низких напряжений $\sigma/\mu \ll 10^{-2}$ реализуется упругодеформированное состояние. При увеличении напряжения $\sigma/\mu \leq 10^{-2}$ существует область неупругой деформации. При высоких напряжениях $10^{-2} < \sigma/\mu < 10^{-1}$ реализуется неоднородная пластическая деформация АМС.

Отметим особенности низкотемпературной деформации металлических стекол [1–3], которые были выявлены по диаграммам деформации (кривым „растягивающее напряжение–удлинение“, построенным с помощью экспериментальных данных), а также при экспериментальном исследовании внутреннего трения.

Упругая деформация подчиняется закону Гука, согласно которому деформация ε линейно зависит от приложенного напряжения σ , т.е. $\varepsilon(\sigma) \sim \sigma$. После снятия нагрузки упругая деформация полностью и мгновенно (со скоростью звука) обратима.

В области неупругой деформации зависимость $\varepsilon(\sigma)$ становится нелинейной, деформация образца увеличивается быстрее, чем по линейному закону. После снятия нагрузки уменьшение неупругой деформации запаздывает во времени. Часть неупругой деформации обратима за время наблюдения (эксперимента). Оставшаяся часть неупругой деформации необратима за время наблюдения. Однако если существенно увеличить время наблюдения, то оставшаяся часть неупругой деформации уменьшается.

Считается, что неупругость аморфных сплавов связана со свободным объемом в их структуре: если свободный объем мал, то мала и неупругая деформация. Поэтому неупругость коррелирует со степенью релаксации структуры, при которой происходит уменьшение свободного объема. Неупругая деформация уменьшается после отжига, при котором происходит структурная релаксация, и увеличивается при облучении.

Пластическая деформация (ПД) является неоднородной, локализуется в полосах скольжения. Ширина полосы скольжения достигает 10 nm, а расстояние между полосами скольжения достигает 10 000 nm. Причем на начальной стадии ПД полосы сдвига не возникают

спонтанно по всему объему. Полоса зарождается на свободной поверхности образца, затем распространяется и выходит в виде ступеньки на другую свободную поверхность.

При неоднородной ПД пластическое течение локализовано в полосах скольжения, а зоны твердого тела, расположенные между полосами скольжения, остаются пластически недеформированными. В полосе скольжения происходят изменения атомной структуры: увеличивается концентрации свободного объема, т.е. увеличивается среднее расстояние между атомами.

Скорость распространения полос сдвига очень мала, составляет порядка 0.3 mm s^{-1} и практически не зависит от скорости деформации в диапазоне $2 \cdot 10^{-4} - 10^{-2} \text{ s}^{-1}$ [5,6]. При отжиге структура полос сдвига полностью или частично релаксирует, но ступени полос сдвига остаются, поэтому ПД необратима во времени.

С помощью синхротронного источника проводилось исследование эволюции структуры аморфных сплавов непосредственно в процессе деформации [7–9]. В [7] проводились исследования структуры под действием растяжения *in situ*, что позволило обнаружить изменения структуры металлических стекол на основе циркония, происходящие при упругой деформации. Было установлено, что одноосное растяжение приводит к малому анизотропному изменению расстояний (на доли процента) между атомами первой координационной сферы.

В [8] образцы деформировались пластически, и помимо однородной неупругой деформации аморфной фазы возникала локализованная ПД (полосы сдвига). Неупругая деформация при прокатке приводит к малому анизотропному увеличению расстояния между атомами и, следовательно, к изменению формы первой координационной сферы аморфной фазы. В [9] были получены подобные результаты, причем авторы также связывают изменения формы первой координационной сферы с неупругой деформацией.

Изучение процессов деформации в аморфном металле сталкивается с определенными трудностями, поскольку их невозможно изучать методами просвечивающей электронной микроскопии, используемых для исследования кристаллов. Поэтому, несмотря на значительное количество различных моделей, и механизмов деформации, завершённая теория деформации АМС отсутствует.

Авторы [10] предположили, что в АМС существуют „зоны сдвига“ (shear transformation zone — STZ) с избыточным свободным объемом и конечным временем жизни. „Зона сдвига“ рассматривается как кластер из нескольких десятков атомов, структура которого подвергается действию сдвигового напряжения, переходя из одного состояния с низкой энергией в другое через активационный барьер. Развита вычислительная модель и выполнены численные расчеты такого механизма деформации. Процесс скольжения по механизму STZ считается термоактивируемым, с энергией активации $\sim 1 \text{ eV}$.

Модель „свободного объема“ в АМС, который является некоторым аналогом вакансий в кристаллах, была предложена в работах [6,11]. Однако в связи с отсутствием кристаллической решетки единичный свободный объем на месте отсутствующего атома частично распределен по всему объему АМС. Процесс деформации является серией атомных прыжков в место единичного свободного объема, так что свободный объем как бы перемещается по АМС. Этот механизм деформации является процессом диффузионного типа, энергия активации примерно равна 0.1 eV .

В обоих случаях (механизмах [9–11]) следует рассматривать как прямые, так и обратные атомные прыжки и, учитывая, что в этих механизмах рассматриваются дефекты, не имеющие вектора Бюргерса, движение этих дефектов должно приводить к ПД только при наличии градиента напряжений.

Концепция дислокационного течения в АМС в области неоднородной деформации развита в работах [12,13]. В соответствии с этой моделью вектор Бюргерса двумерных дислокаций Соммианы изменяется по величине и направлению вдоль дислокационной линии. Однако средняя величина вектора Бюргерса имеет значение, близкое к среднему межатомному расстоянию. Авторы [13] предположили, что релаксированные линейные дефекты, подобные дислокациям, образуют произвольные сетки в АМС. Дефекты такого типа могут влиять на низкотемпературные свойства АМС и могут рассматриваться как носители ПД.

Недавно в работах [14–18] было построено феноменологическое описание аморфной пластичности, основанное на физических принципах и молекулярных моделях. Поскольку обычные тепловые флуктуации маловероятны для температур значительно ниже температуры стеклования T_g , состояние конфигурационной разупорядоченности деформируемой системы можно охарактеризовать эффективной температурой беспорядка T_{eff} , контролирующей конфигурационные флуктуации [14]. В [15] переформулирована теория пластической деформации в стеклообразующих материалах с STZ с учетом роли эффективной температуры беспорядка и потока энтропии. Работа [16] посвящена неравновесной термодинамике аморфных материалов и роли внутренних степеней свободы в динамике таких систем. В [17] развита теория эффективной температуры беспорядка в стеклообразующих материалах, выводимых из термодинамического равновесия внешними силами. В [18] использована термодинамика эффективной температуры с внутренними переменными, развитая в [16,17], чтобы переформулировать теорию аморфной пластичности STZ.

Основное положение теории [14–18] заключается в том, что медленные конфигурационные степени свободы аморфных систем слабо связаны с быстрыми колебательными степенями свободы и, следовательно, эти две подсистемы могут быть описаны разными температурами при ПД. Описываемые этой теорией системы включают

некристаллические твердые вещества, при температуре намного ниже их температуры стеклования T_g , плотные зернистые материалы, и различные виды мягких материалов, таких как пены, коллоиды. Причина этого в том, что все эти материалы обладают низкой теплопроводностью (температуропроводностью), поэтому температура может быть локализована в зоне ПД на достаточное время. Однако металлические аморфные сплавы (в том числе из-за наличия электронов проводимости) обладают высокой температуропроводностью. Действительно, для АМС коэффициент температуропроводности имеет порядок $a \sim 10^{-6} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$, ширина полосы скольжения имеет порядок $l \sim 10^{-8} \text{ m}$, поэтому время температурной релаксации для такой подсистемы (l^2/a) имеет порядок 10^{-10} s .

Очевидно, что физический механизм процесса ПД определяется скоростью деформации. Предполагая, что при квазистатической одноосной деформации с $\dot{\epsilon} = 3 \cdot 10^{-4} \text{ s}^{-1}$ полоса скольжения полностью прошла по всей ширине образца, получим скорость движения фронта полосы скольжения $V \sim 10^{-4} \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$. Для оценки времени элементарного акта ПД разделим ширину полосы скольжения $l \sim 10^{-8} \text{ m}$ на скорость движения фронта полосы скольжения $V = 10^{-4} \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$, получим время элементарного акта ПД $l/V = 10^{-4} \text{ s}$. Следовательно, для низких скоростей деформации, когда время элементарного акта ПД много больше времени температурной релаксации ($l/V \gg l^2/a$), диссипация энергии, происходящая при квазистатической ПД, не приводит к существенному увеличению температуры в полосе скольжения из-за высокой температуропроводности. Поэтому в металлических аморфных сплавах управление ПД только эффективной температурой беспорядка T_{eff} недостаточно.

Для описания ПД кристаллических твердых тел предлагается масштабный подход [19]. Считается, что ПД может развиваться как локальное структурное превращение в зонах концентраторов напряжений различного масштаба. Наличие в таких зонах избыточного свободного объема приводит к возникновению в пространстве междоузлий виртуальных узлов новой структуры. Это приводит к протеканию локального структурного превращения с помощью коллективных конфигурационных возбуждений.

Из-за недостатка надежных экспериментальных данных о деформации АМС сложно выделить основные механизмы деформации, взаимосвязано описать ее многокомпонентность (упругая, неупругая, пластическая), ее пространственно-временную иерархичность. Для выработки единой теории деформации АМС необходимо принять во внимание связь процессов макроскопической деформации с изменением структуры на наноструктурном уровне.

Недавно в работах [20,21] сформулированы физический механизм и микроскопическая модель процесса неупругой деформации в аморфной металлической пленке, стимулированного внешним механическим воздей-

ствием. За этот процесс ответственны наноструктурные элементы аморфной среды: нанокластеры, содержащие дополнительный свободный объем, в которых содержатся двухуровневые системы. При деформации стекла происходит возбуждение двухуровневых систем, благодаря чему они дают существенный вклад в неупругую деформацию, структурную релаксацию, образование нанокластеров и нанокристаллов. Физический механизм неупругой деформации металлического стекла при механическом воздействии включает в себя помимо механизма локальных термических флуктуаций также атермический механизм квантового туннелирования атомов или атомных групп, стимулированный сдвиговым напряжением.

Аналитически полученные результаты для неравновесных фазовых переходов первого рода были верифицированы с помощью вычислительного моделирования методом молекулярной динамики [22–24]. Метод молекулярной динамики позволяет проводить прямые вычисления различных интегральных параметров всей моделируемой системы или ее отдельных частей. Для анализа текущего состояния системы и его изменений производился расчет кинетической температуры. При исследовании фазового перехода кристалл–жидкость и обратно рассчитывались различные структурные характеристики, позволяющие определить начало фазового перехода и его длительность. В частности, вычисление ориентационного параметра порядка позволяет различать состояние системы жидкость–кристалл. Результаты [20–24] качественно и количественно описывают закономерности неравновесных структурных превращений в аморфных металлических сплавах, стимулированных термомеханической обработкой. Запланировано провести численные иллюстрации связи кинетики переходов по двум параметрам ближнего и среднего порядка с кинетикой уравнения релаксации ПД в АМС.

В настоящей работе предлагается попытка сформулировать единую теорию ПД: гипотезу физической природы, физические механизмы, синергетическую модель локализованной ПД в аморфных металлических стеклах, стимулированной квазистатической (низкоскоростной) механической нагрузкой.

Анализ особенностей низкотемпературной деформации [1–9] показывает, что полное описание сложного явления — локализованной ПД возможно на основе представлений о неравновесных структурных переходах в самоорганизующихся системах (синергетики) [25] и требует решения следующих задач: 1) формулировка и обоснование гипотезы о физической природе квазистатической деформации в АМС; 2) описание механизма и формулировка кинетической модели, связывающих ближний атомный порядок со средним атомным порядком, описывающих зарождение и развитие ансамбля STZ; 3) описание механизма и формулировка синергетической модели зарождения структурного дефекта более высокого масштабного уровня — полосы скольжения; 4) описание механизма, кинетической модели

автоволнового развития полосы скольжения; 5) выводы и заключение. В соответствии с задачами сформирована структура предлагаемой работы.

1. Формулировка и обоснование гипотезы о физической природе квазистатической деформации

На основе результатов и выводов исследований, проведенных в [1–24], полезно сформулировать и обосновать гипотезу о физической природе квазистатической деформации в АМС. Квазистатическая деформация в АМС есть сложный релаксационный многоэтапный процесс, представляющий собой упорядоченную во времени иерархическую последовательность взаимосвязанных структурных переходов первого рода. Эти неравновесные процессы последовательно протекают на различных масштабных пространственно-временных уровнях, начиная с самого низшего уровня — кластера атомов первой координационной сферы со временем релаксации τ_η , затем среднего уровня — нанокластера атомов пятой координационной сферы со временем релаксации τ_φ , наконец, высшего уровня — атомов полосы скольжения с пространственным масштабом 10 nm и временем релаксации τ , причем $\tau \gg \tau_\varphi \gg \tau_\eta$. Они сопровождаются превращениями различных видов потенциальной энергии атомов (энергии упругой, неупругой, пластической деформации, ZST) друг в друга.

Рассмотрим квазистатическую одноосную деформацию с $\dot{\varepsilon} = 3 \cdot 10^{-4} \text{ s}^{-1}$, временем действия нагрузки $t_{\text{load}} = 100 \text{ s}$ для образца из АМС с шириной 1 cm и с модулем продольной упругости (модулем Юнга) $E = 100 \text{ GPa}$. За время $t_{\text{load}} = 100 \text{ s}$ деформация образца достигает значения $\varepsilon_3 = 3 \cdot 10^{-2}$, а напряжение достигает предела текучести $\sigma_3 = 3 \text{ GPa}$. Экспериментально установлено, что скорость распространения полос сдвига слабо зависит от скорости деформации в интервале $2 \cdot 10^{-4} - 10^{-2} \text{ s}^{-1}$ [5]. Средняя скорость распространения полос сдвига очень мала и составляет порядка $0.3 \text{ mm} \cdot \text{s}^{-1}$ [6].

Рассмотрим твердый образец из аморфно-металлического сплава, первоначально находящийся в неравновесном состоянии металлического стекла и имеющий форму куба. При одноосном растяжении образец деформируется и приобретает форму прямоугольного параллелепипеда. При деформации над системой совершается работа $|A| = \int \sigma(\varepsilon) d\varepsilon$, которая переходит в потенциальную энергию атомов U .

Проведем оценку величины плотности запасенной потенциальной энергии деформации при квазистатической одноосной деформации с $\dot{\varepsilon} = 3 \cdot 10^{-4} \text{ s}^{-1}$, временем действия нагрузки $t_{\text{load}} = 100 \text{ s}$ для образца из АМС с шириной 1 cm и с модулем продольной упругости (модулем Юнга) $E = 100 \text{ GPa}$. За время $t_{\text{load}} = 100 \text{ s}$ деформация образца достигает значения $\varepsilon_3 = 3 \cdot 10^{-2}$, а напряжение достигает предела текучести $\sigma_3 = 3 \text{ GPa}$.

Предполагая, что полоса скольжения полностью прошла по всей ширине образца, получим скорость движения фронта полосы скольжения $V = 10^{-4} \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$.

Известно, что плотность потенциальной энергии однородной продольной упругой деформации равна $e = E\varepsilon^2/2$. При достижении предела пропорциональности $\sigma_1 = E\varepsilon_1$, деформации $\varepsilon_1 = 1 \cdot 10^{-2}$ плотность потенциальной энергии упругой деформации на один атомный объем (атом) равна $v_{\text{el}} \sim 0.85 \cdot 10^{-3} \text{ eV}$. Внутренняя потенциальная энергия атомной системы увеличивается на величину совершаемой над телом работы. Ясно, что v_{el} много меньше средней кинетической энергии атома $e_{\text{kin}} \sim 0.025 \text{ eV}$ на атом при комнатной температуре. При снятии внешней нагрузки образец мгновенно (со скоростью звука) восстанавливает свою первоначальную форму. То есть система совершает работу над внешней средой, возвращает ей свою упругую энергию, а потенциальная энергия атомов системы принимает свое первоначальное значение. Упругая деформация является мгновенно обратимой.

При напряжении выше предела пропорциональности σ_1 , но ниже предела упругости $\sigma_2 = E\varepsilon_2$, $\varepsilon_2 = 2 \cdot 10^{-2}$ наряду с упругой деформацией среда испытывает структурный переход первого рода с образованием нового ближнего порядка η , ориентированного по направлению приложенного напряжения, т.е. возникает неупругая деформация. Для преодоления потенциального барьера между состояниями с первоначальным и новым ближним порядком необходимы накопление в системе критического значения плотности потенциальной энергии упругой деформации $e_{\text{el}}(\sigma_1) = E\varepsilon_1^2/2$ ($v_{\text{el}} \sim 0.85 \cdot 10^{-3} \text{ eV}$ на атомный объем) и время действия нагрузки, превышающее время релаксации τ_η . Работа, совершаемая над системой, идет на увеличение внутренней потенциальной энергии: упругой энергии и энергии неупругой деформации (нового ближнего порядка) $|A| = U_{\text{el}} + U_{\text{anel}}$. При снятии нагрузки образец практически восстанавливает свою форму, т.е. мгновенно совершает работу над внешней средой, равную запасенной в нем упругой энергии. Состояние среды удаляется от равновесия, поскольку внутренняя структура имеет новый ближний порядок. Среда временно запасает эту энергию неупругой деформации U_{anel} , но релаксирует в течение конечного времени. Неупругая деформация, связанная с новым ближним порядком η , является обратимой, хотя и запаздывающей с малым временем релаксации τ_η .

При напряжении выше предела упругости σ_2 наряду с упругой деформацией, неупругой деформацией атомов, образующих первую координационную сферу, возникает дополнительная неупругая деформация атомов нанокластеров со средним временем релаксации τ_φ . Эту деформацию можно описывать возникновением среднего порядка φ (или концентрацией STZ — n , которые запасают дополнительную потенциальную энергию U_{def}). Для преодоления потенциального барьера между состоянием с новым ориентированным

ближним порядком η и состоянием с STZ необходимы дополнительное накопление в системе критического значения плотности потенциальной энергии упругой деформации равной $e_{el}(\sigma_2) - e_{el}(\sigma_1) = E(\varphi_2^2 - \varphi_1^2)/2$ и время действия нагрузки, превышающее время релаксации τ_φ . При $\varphi_2 = 2 \cdot 10^{-2}$ дополнительно запасенная энергия составляет $v_{el} \sim 0.85 \cdot 10^{-3}$ eV на атомный объем. Работа, совершаемая над системой, идет на увеличение внутренней потенциальной энергии: упругой энергии, энергии неупругой деформации U_{anel} , энергии STZ $|A| = U_{el} + U_{anel} + U_{def}$. При снятии нагрузки образец практически восстанавливает свою форму, т.е. мгновенно совершает работу над внешней средой, равную запасенной в нем упругой энергии. Состояние среды еще более удаляется от равновесия, поскольку, наряду с новым ориентированным ближним порядком, во внутренней структуре дополнительно появились STZ. Среда временно запасает энергию STZ U_{def} и релаксирует в течение конечного времени. Неупругая деформация, связанная с STZ, является обратимой, но запаздывающей со средним временем релаксации τ_φ .

При увеличении напряжения до предела текучести σ_3 образец, наряду с упругой и неупругой деформацией, также испытывает ПД. Пластическая деформация выражается в необратимом изменении формы образца (образовании ступенек на поверхности, возникающих при выходе плоскости скольжения на поверхность). Работа, совершаемая над системой, запасается в виде потенциальной энергии упругой деформации, энергии неупругой деформации U_{anel} , энергии STZ U_{def} и энергии дополнительной поверхности образца U_{pl} (энергии ПД). Для преодоления потенциального барьера между состоянием с STZ и состоянием с ПД необходимо дополнительное накопление в системе критического значения плотности потенциальной энергии неупругой деформации $e_{el}(\sigma_3) = E\sigma_3(\varepsilon_3 - \varepsilon_2)$, причем дополнительно запасенная энергия составляет $v_{el} \sim 1.7 \cdot 10^{-3}$ eV на атомный объем. При снятии нагрузки пластически деформированный образец лишь частично восстанавливает свою форму. Энергия упругой деформации полностью и мгновенно возвращается во внешнюю среду. Энергия неупругой деформации U_{el} возвращается за время релаксации τ_η . Потенциальная энергия дефектов STZ U_{def} лишь частично возвращается во внешнюю среду за время релаксации τ_φ , поскольку оставшаяся ее часть переходит в энергию ПД U_{pl} (дополнительную энергию поверхности). Поэтому ПД необратима, время ее релаксации τ велико.

Проведем оценку увеличения локальной температуры в полосе скольжения при условии, что энергия ПД частично (20%) перешла в тепло. Работа, совершенная над системой при достижении предела текучести, имеет порядок $v_{el} \sim 1.7 \cdot 10^{-3}$ eV на атом, что на много меньше средней кинетической энергии атома при температуре стеклования $v_{kin} \sim 5 \cdot 10^{-2}$ eV на атом. Поэтому если внесенная энергия равномерно распределена по объему

системы, то повышение температуры системы незначительно (примерно на $0.2v_{el} \sim 0.34 \cdot 10^{-3}$ eV, т.е. на 5 K). Но энергия ПД выделяется неоднородно в полосах скольжения. Ширина полосы скольжения имеет порядок $l \sim 10^{-8}$ м, а среднее расстояние между плоскостями скольжения имеет порядок $l \sim 10^{-6}$ м. Поэтому локальное увеличение температуры в полосе скольжения имеет порядок температуры стеклования $\sim 100 \cdot 5 \sim 500$ K.

Однако металлические аморфные сплавы (в том числе из-за наличия электронов проводимости) обладают высокой температуропроводностью. Действительно, для АМС коэффициент температуропроводности имеет порядок $a \sim 10^{-6}$ м²·с⁻¹, ширина полосы скольжения имеет порядок $l \sim 10^{-8}$ м, поэтому время температурной релаксации (l^2/a) для такой подсистемы имеет порядок 10^{-10} с.

При квазистатической одноосной деформации с $\dot{\varepsilon} = 3 \cdot 10^{-4}$ с⁻¹ предполагая, что полоса скольжения полностью прошла по всей ширине образца, получим скорость движения фронта полосы скольжения $V \sim 10^{-4}$ м·с⁻¹. Для оценки времени элементарного акта ПД разделим ширину полосы скольжения $l \sim 10^{-8}$ м на скорость движения фронта полосы скольжения $V = 10^{-4}$ м·с⁻¹, получим время $l/V = 10^{-4}$ с.

Следовательно, для низких скоростей деформации, когда время элементарного акта ПД много больше времени температурной релаксации ($l/V \gg l^2/a$), диссипация энергии, происходящая при квазистатической ПД, не приводит к существенному увеличению температуры в полосе скольжения из-за высокой температуропроводности.

Очевидно, что физический механизм процесса ПД определяется скоростью деформации. Поэтому для качественного описания процесса низкоскоростной квазистатической деформации в АМС можно использовать превращения только потенциальной энергии атомов системы.

Таким образом, гипотеза о том, что квазистатическая деформация в АМС есть сложный многоэтапный релаксационный процесс, представляющий собой упорядоченную во времени иерархическую последовательность взаимосвязанных структурных переходов первого рода на различных масштабных пространственно-временных уровнях, которые сопровождаются превращениями различных видов потенциальной энергии друг в друга, обоснована. На основе этой гипотезы можно построить математическую модель квазистатической деформации в АМС.

2. Механизм и модель неравновесного перехода упругое механическое состояние–состояние с зонами сдвиговой трансформации

Отсутствие дальнего порядка во взаимном расположении атомов является определяющим признаком аморф-

ных тел [1–3], поэтому описание их сложной структуры с помощью представлений только о параметре дальнего порядка, как для кристаллов, недостаточно. Экспериментально установлено, что в металлических стеклах, обладающих сильным топологическим беспорядком, часто реализуется довольно совершенный локальный порядок, с точностью до упругих искажений совпадающий с локальным порядком в стабильных или метастабильных кристаллических телах того же состава [1–3].

Пространственная структура металлического стекла образована структурными единицами, соединенными таким образом, что кристаллическая структура не образуется, но элементы некоторого порядка существуют. Структурная единица определяет ближний порядок (от выбранного атома), имеет радиус до $\sim 3\text{--}5 \text{ \AA}$ и включает примерно 1–1.5 тетраэдра, в вершинах которого расположены атомы [1–3].

Средний порядок подразумевает радиус в пределах от $\sim 3\text{--}5$ до 10 \AA [1–3]. В этой области атомы АМС незначительно смещены относительно положений идеального кристалла, но корреляция в положениях атомов еще существует. На расстояниях более $\sim 15 \text{ \AA}$ смещения атомов относительно положений идеального кристалла увеличиваются, корреляция в атомных положениях исчезает, поэтому дальнего порядка в АМС нет. Ближний и средний порядок хорошо определяется из экспериментальных данных и численных расчетов методом молекулярной динамики [1–3, 22–24]. Изменения ближнего и среднего порядка хорошо коррелируют с изменениями атомной структуры при переходах различного типа [1–3, 22–24].

Под механической нагрузкой АМС испытывает однородную неупругую деформацию [1–3], которая на атомном уровне приводит к анизотропному изменению расстояний между атомами, т.е. к изменению ближнего и среднего порядка.

Для описания процесса релаксации аморфной структуры из упругого механического состояния в неупругое состояние введем безразмерную величину, характеризующую структурное состояние среды, которая называется параметром ближнего порядка η . Физически параметр порядка η представляет собой объемную долю (нормированную на объемную долю насыщения) атомов с ближним порядком, испытавшим неупругую деформацию, в единице объема. В упругом состоянии параметр порядка η равен нулю, а в неупругом состоянии параметр порядка η равен единице. Процесс структурной релаксации рассматривается как временная последовательность структурных состояний среды, описываемая изменением параметра порядка со временем, т.е. $\eta = \eta(t)$ [26]. Мы предполагаем, что по параметру η упругое состояние является локально устойчивым, т.е. оно отделено от локально устойчивого неупругого состояния энергетическим барьером. Структурная релаксация деформируемой неравновесной однородной структуры из упругого в неупругое состояние описывается

уравнением Ландау–Халатникова [20, 26, 27] для параметра порядка η :

$$\frac{\partial \eta}{\partial t} = -\alpha_{\eta}(T, \sigma)\eta(\eta - \eta_2)(\eta - 1), \quad \eta_2 = 1 - \frac{E_{cl}}{E_{cl}^*}, \quad (1)$$

$$\alpha_{\eta}(T, A) = \omega_0 \left[e^{-\frac{(E_{\eta} - \sigma V_{\eta})}{kT}} + \Theta(\sigma - \sigma_1) e^{-\frac{a}{a_{dB}}} \right], \quad (2)$$

где $\alpha_{\eta}(T, \sigma)$ — скорость релаксации, которая содержит два члена различной физической природы. Первый „термический“ связан с локальной тепловой флуктуацией атомов первой координационной сферы из первоначального ближнего порядка (упругого деформированного) в новый ближний порядок, испытавший неупругую деформацию. Второй „атермический“ связан с туннелированием в двухъямном потенциале, стимулированным локальным напряжением, атомов первой координационной сферы из первоначального ближнего порядка (упругого деформированного) в новый ближний порядок, испытавший неупругую деформацию. E_{η} — энергия активации атомной перестройки, σ — механическое напряжение, V_{η} — активационный объем кластера, испытавшего атомную перестройку. Здесь $a_{dB}(\sigma)$ — длина волны де Бройля, a — ширина потенциального барьера в двухъямном потенциале [20, 21], $\omega_0 \approx 10^{13}$ Нз. $\Theta(\sigma - \sigma_1)$ — тэта-функция, которая отлична от нуля, когда величина напряжения σ вызывает неупругую деформацию, σ_1 — предел пропорциональности. $E_{cl}(\sigma)$ — плотность энергии упругой деформации, $E_{cl}^*(\sigma_2)$ — критическое значение плотности энергии упругой деформации, σ_2 — предел упругости. В слабдеформированном состоянии среды $\frac{E_{cl}}{E_{cl}^*} \ll \frac{1}{2}$ глобально устойчивым является упругое состояние среды, а неупругое состояние среды является локально устойчивым. При достижении предела пропорциональности $\frac{E_{cl}}{E_{cl}^*} \approx \frac{1}{2}$ упругое и неупругое состояние среды локально устойчивы, находятся вблизи безразличного равновесия. При достижении предела упругости $\frac{E_{cl}}{E_{cl}^*} = 1$ упругое состояние среды становится абсолютно неустойчивым, а неупругое состояние среды является глобально устойчивым. Если плотность энергии упругой деформации достигает значения E_{cl}^* , а время механического воздействия превышает время релаксации α_{η}^{-1} , среда полностью релаксирует в неупругое состояние.

Классический фазовый переход первого рода газ–жидкость протекает через образование критического зародыша новой фазы непосредственно в исходной фазе [26, 27]. Однако образование STZ в объеме аморфной фазы значительно затрудняется дополнительными факторами. Например, плотность структуры в STZ отличается от плотности аморфной матрицы, поэтому для образования STZ необходимо учесть упругие напряжения, возникающие как в STZ, так и в аморфной структуре. При комнатной температуре атомы АМС характеризуются низкой подвижностью, что также тормозит образование STZ.

Итак, упругая энергия и другие факторы увеличивают энергию образования STZ непосредственно в аморфной

структуре, и это неоднородное состояние перестает играть роль активированного комплекса для структурного перехода первого рода. Поэтому в процессе релаксации, стимулированном нагрузкой, вначале среда из упругого состояния переходит в другое однородное состояние — неупругое состояние, которое является предпереходным состоянием, из которого будет образовываться состояние с STZ.

Для описания процесса неравновесного перехода первого рода из упругого состояния среды в состояние с STZ введем еще одну безразмерную величину, характеризующую структурное состояние среды, которая называется параметром среднего порядка φ . В случае состояния с STZ параметром порядка выбираем нормированную объемную долю атомов (нормированную на объемную долю насыщения), находящихся в STZ, в единице объема. В упругом состоянии параметр порядка равен нулю, а в состоянии с STZ параметр порядка равен единице. Процесс структурного превращения рассматривается как временная последовательность структурных состояний среды, описываемая изменением параметра порядка со временем, т.е. $\varphi = \varphi(t)$. Мы предполагаем, что по параметру φ упругое состояние является локально устойчивым, и оно отделено от локально устойчивого состояния с STZ энергетическим барьером. При деформации вначале происходит релаксация структуры из упругого в неупругое состояние по параметру порядка η , при этом в среде накапливается потенциальная энергия локальных смещений атомов в первой координационной сфере (потенциальная энергия неупругой деформации среды). Поэтому энергетический барьер, разделяющий упругое состояние и состояние с STZ по параметру φ , уменьшается. Если плотность энергии упругой деформации достигает значения E_{cl}^* , а время механического воздействия превышает время релаксации α_η^{-1} , среда полностью релаксирует в структуру в неупругом состоянии. При $\eta \rightarrow 1$ энергетический барьер по параметру φ становится очень малым или даже равным нулю. Среда становится неустойчивой относительно образования STZ.

Структурная релаксация деформируемой неравновесной аморфной среды из упругого состояния в состояние с STZ описывается уравнением Ландау–Халатникова [20,26,27] для параметра порядка φ :

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} = -\alpha_\varphi(T, \sigma)\varphi(\varphi - \varphi_2)(\varphi - 1), \quad \varphi_2 = [1 - \eta], \quad (3)$$

$$\alpha_\varphi(T, \sigma) = \omega_0 \left[e^{-\frac{(E_\varphi - \sigma V_\varphi)}{kT}} + \Theta(\sigma - \sigma_1) e^{-\frac{a}{aB}} \right], \quad (4)$$

где $\alpha_\varphi(T, \sigma)$ — скорость релаксации, которая содержит два члена различной физической природы. Первый, „термический“, связан с локальной тепловой флуктуацией среды, а второй „атермический“ связан с тунелированием группы атомов в двухъямном потенциале, стимулированном локальным напряжением σ . E_φ — энергия активации возникновения STZ, V_φ — активационный

объем кластера, испытавшего атомную перестройку с образованием STZ. Если время механического воздействия больше времени релаксации α_η^{-1} , среда полностью релаксирует в структуру в неупругом состоянии $\eta \rightarrow 1$, а энергетический барьер по параметру φ обращается в нуль, и начинается образование STZ. Если время механического воздействия больше времени релаксации α_φ^{-1} , среда полностью релаксирует в состояние с STZ.

Так как процесс образования состояния с STZ непосредственно в аморфной структуре подавлен, то неравновесный переход первого рода вынужден протекать через предпереходное состояние — неупругое состояние и описывается двумя параметрами (η, φ) , подчиняющимися уравнениям (1), (3). Из неупругого состояния система попадает в состояние с STZ через седловую точку в пространстве координат структурного перехода (η, φ) .

Построим модельный потенциал данного фазового перехода $F(\eta, \varphi)$ в пространстве координат структурного перехода (η, φ) . Проведенный анализ (1), (3) показывает, что переход с двумя координатами (η, φ) может быть описан следующей зависимостью модельного потенциала:

$$F(\eta, \varphi) = \frac{\eta_2}{2} \eta^2 - \frac{(1 + \eta_2)}{3} \eta^3 + \frac{\eta^4}{4} + \frac{1}{2} \varphi_2 \varphi^2 - \frac{(1 + \varphi_2)}{3} \varphi^3 + \frac{\varphi^4}{4}, \quad (5)$$

$$\eta_2(E_{cl}) = 1 - \frac{E_{cl}}{E_{cl}^*}, \quad \varphi_2(\eta) = 1 - \eta. \quad (6)$$

При $\frac{E_{cl}}{E_{cl}^*} = \frac{1}{2}$ и $\varphi = 0$ потенциал $F(\eta, 0)$ — двухъямный и симметричный. При $\eta = \frac{1}{2}$ и $\varphi_2(\frac{1}{2}) = \frac{1}{2}$ потенциал $F(0, \varphi)$ — двухъямный и симметричный.

Рассмотрим переход только по координате η , а $\varphi = 0$. Тогда потенциал примет вид

$$F(\eta, 0) = \frac{\eta_2}{2} \eta^2 - \frac{(1 + \eta_2)}{3} \eta^3 + \frac{\eta^4}{4}. \quad (7)$$

При фиксированном параметре $0 < \eta_2 < \frac{1}{2}$ функция $F(\eta, 0)$ имеет два минимума ($\eta_1 = 0$), ($\eta_3 = 1$) и один максимум при ($\eta = \eta_2$), причем $F(0, 0) = 0$, $F(\eta_2, 0) = \frac{\eta_2^3}{6} (1 - \frac{\eta_2}{2})$, $F(1, 0) = -\frac{(1-2\eta_2)}{12}$, т.е. $F(1, 0) < F(0, 0)$. Таким образом, с помощью потенциала $F(\eta, 0)$ можно описать структурное превращение первого рода из упругого состояния ($\eta_1 = 0$) в неупругое состояние ($\eta_3 = 1$) через потенциальный барьер высотой $F(\eta_2, 0)$.

Рассмотрим переход только по координате φ , а $\eta = 0$. При фиксированном параметре $0 < \eta_2 < \frac{1}{2}$ функция $F(0, \varphi)$ имеет один минимум ($\varphi_1 = 0$) и точку перегиба ($\varphi_2 = \varphi_3 = 1$), причем $F(0, 0) = 0$, $F(0, \varphi_2 = 1) = \frac{\varphi_2^3}{6} (1 - \frac{\varphi_2}{2}) = \frac{1}{12}$, $F(0, 1) = -\frac{(1-2\varphi_2)}{12} = \frac{1}{12}$, т.е. $F(0, 1) > F(0, 0)$. Таким образом, из вида потенциала $F(0, \varphi)$ следует, что

прямое структурное превращение первого рода из упругого состояния ($\varphi_1 = 0$) в состояние с STZ ($\varphi_3 = 1$) невозможно.

При фиксированном параметре $0 < \eta_2 < \frac{1}{2}$ функция $F(\eta, \varphi)$ в области определения переменных $0 \leq \eta \leq 1$, $0 < \varphi < 1$ имеет девять особых точек: четыре минимума $(0, 0)$, $(1, 0)$, $(0, 1)$, $(1, 1)$; один максимум $(\eta_2, 1 - \eta_2)$; и четыре седловых точки $(\eta_2, 0)$, $(\eta_2, 1 - \eta_2)$, $(0, 1 - \eta_2)$, $(1, 1 - \eta_2)$. Потенциал $F(\eta, \varphi)$ в точках минимума принимает следующие значения: $F(0, 0) = 0$, $F(1, 0) = -\frac{(1-2\eta_2)}{12}$, $F(0, 1) = \frac{1}{12}$, $F(1, 1) = -\frac{1}{6}(1 - \eta_2)$. Очевидно, что глобальный минимум находится в состоянии $(1, 1)$.

При достижении $\eta = 1$ функция $F(1, \varphi)$ имеет точку перегиба ($\varphi_1 = \varphi_2 = 0$) и точку минимума $(1, 1)$. Потенциальный барьер, разделяющий упругое состояние ($\varphi_1 = 0$) и состояние с STZ ($\varphi_3 = 1$), исчезает.

При фиксированном малом отклонении η от нуля, из начального состояния $(\eta, 0)$ можно сразу попасть в конечное состояние $(\eta, 1)$, но при этом придется преодолевать довольно большой барьер (почти равный максимуму), разделяющий эти состояния. Это классический механизм структурного перехода первого рода.

При прямом превращении упругое состояние – состояние с STZ барьер перехода является слишком большим из-за упругой энергии образования STZ. Но можно совершить переход через предпереходное состояние $(\eta \rightarrow 1, 0)$. В этом состоянии $\varphi_2 = [1 - \eta]$ стремится к нулю, поэтому барьер, который нужно преодолеть, чтобы попасть в состояние с STZ, также стремится к нулю. Значительно выгоднее вначале осуществить переход вдоль координаты η из 0 в 1, что приводит к резкому уменьшению барьера вдоль координаты φ . И лишь затем выполнить переход вдоль координаты φ из 0 в 1.

Теперь можно построить синергетическую модель локализованной ПД (образование полосы сдвига, нового более высокого структурного уровня деформации), в которой средний порядок φ или, что то же самое, концентрация STZ (число зон в единице объема) n играет роль управляющего параметра.

3. Механизм и синергетическая модель локализованной пластической деформации в аморфном металлическом стекле

Релаксационное поведение деформируемого аморфного металлического стекла можно описывать в рамках линейной модели вязкоупругой среды [28]. Эволюция деформации ε под действием постоянного напряжения σ описывается линейным уравнением Кельвина–Фойгта, которое можно интегрировать

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial t} = -\frac{1}{\tau} \varepsilon + \frac{\sigma}{\eta} = \frac{1}{\eta} [-\mu \varepsilon + \sigma],$$

$$\varepsilon(t) = \frac{\sigma}{\mu} \left[1 - \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right) \right], \quad \mu = \frac{\eta}{\tau}. \quad (8)$$

Здесь первое слагаемое описывает релаксацию сдвиговой компоненты деформации со временем τ , второе — течение вязкой жидкости под действием сдвиговой компоненты напряжений σ , η — динамическая сдвиговая вязкость, μ — модуль сдвига.

При разгрузке системы, когда напряжение σ становится равным нулю, интегрирование уравнения (8) дает выражение для релаксации деформации

$$\varepsilon(t) = \varepsilon(0) \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right). \quad (9)$$

Таким образом, линейная модель вязкоупругой среды (8) предсказывает протекающий во времени, т.е. релаксационный характер деформации. Поскольку ε релаксирует к нулевому значению, то полученная деформация обратима во времени, следовательно, она не пластическая. Причина этого в том, что сдвиговое напряжение входит в уравнение релаксации деформации как внешний постоянный параметр. Явление ПД сложное, поэтому процесс перехода режима неупругой деформации в режим пластической деформации обеспечивается самоорганизацией сдвиговой компоненты деформаций, сдвиговой компоненты напряжений с одной стороны и STZ с другой стороны.

Сформулируем синергетическую модель ПД (образования и распространения полосы скольжения), в которой концентрация STZ n играет роль управляющего параметра [25].

Скорость изменения управляющего параметра n задается, с одной стороны, интенсивностью диссипативных процессов, характеризуемой временем релаксации τ_n , а с другой — влиянием коллективной моды, которое определяется ее амплитудой ε и сопряженным полем σ :

$$\dot{n} = -\frac{1}{\tau_n} (n - n_e) - g_n \varepsilon \sigma, \quad (10)$$

где $n_e = n_e(T, \hat{\sigma}_{\text{ext}})$ — равновесное значение n , задаваемое внешними условиями, $\hat{\sigma}_{\text{ext}}$ — тензор внешних напряжений, g_n — константа связи, T — температура. Последнее слагаемое в (10) описывает уменьшение концентрации n при ПД в поле напряжения.

Из наличия в среде вязкого трения сдвиговое напряжение подчиняется уравнению релаксации

$$\dot{\sigma} = -\frac{1}{\tau_\sigma} \sigma + g_\sigma \varepsilon n, \quad (11)$$

где τ_σ, g_σ — константы. Первое слагаемое в (11) описывает процесс релаксации сдвигового напряжения к равновесному значению $\sigma = 0$. Второе слагаемое в (11) учитывает положительную обратную связь между сдвиговой деформацией и STZ, которая приводит к нарастанию сдвигового напряжения и, таким образом, обуславливает процесс самоорганизации.

В качестве параметра порядка выберем величину сдвиговой ПД ε , а в качестве сопряженного поля — соответствующую сдвиговую компоненту тензора напряжений σ . Уравнение, определяющее поведение коллективной моды ε , сводится к уравнению Кельвина–Фойгта для вязкоупругой среды (8). Таким образом, в простейшем случае скорости изменения величин ε , σ , n описываются системой Лоренца (8), (10), (11) [25].

Особенность полученной системы состоит в линейном характере уравнения (8) для скорости изменения параметра порядка ε , и нелинейности уравнений (10), (11) для величин n , σ , изменение которых подчиняется поведению ε . Отрицательный характер нелинейной связи в уравнении (10) означает уменьшение концентрации n при увеличении коллективной моды ε . Соответственно, нелинейное слагаемое в уравнении (11) описывает положительную обратную связь, которая и является причиной, приводящей к качественной перестройке системы в результате самоорганизации в ансамбле STZ.

Указанные равенства формируют полную систему уравнений, которая определяет самосогласованное поведение коллективной моды ПД и STZ. Диссипативный характер ПД реализуется при соотношении времен релаксации $\tau_\sigma, \tau_n \ll \tau$, согласно которому медленный параметр порядка $\varepsilon(t)$ „подчиняет“ быстрые величины $\sigma(t)$, $n(t)$. Тогда в уравнениях (10), (11) можно использовать адиабатическое приближение $\dot{n} = 0$, $\dot{\sigma} = 0$. В результате величины σ , n выражаются через ε следующим образом:

$$n = n_e \left[1 + \left(\frac{\varepsilon}{\varepsilon_m} \right)^2 \right]^{-1}, \quad \varepsilon_m^{-2} = A_n A_\sigma,$$

$$A_n = \tau_n g_n, \quad A_\sigma = \tau_\sigma g_\sigma, \quad \sigma = A_\sigma n_e \varepsilon \left[1 + \left(\frac{\varepsilon}{\varepsilon_m} \right)^2 \right]^{-1}. \quad (12)$$

Учитывая, что в стационарном состоянии $\dot{\varepsilon} = 0$ равенство (12) в пределе ($\varepsilon^2 \ll \varepsilon_m^2$) должно переходить в закон Гука $\sigma = \mu \varepsilon$, получаем критическое значение параметра n_c :

$$n_c^{-1} = \frac{A_\sigma}{\mu} = \tau \tau_\sigma \frac{g_\sigma}{\eta}. \quad (13)$$

Временная зависимость параметра порядка $\varepsilon(t)$ определяется уравнением релаксации Ландау–Халатникова [26,27]

$$\tau \dot{\varepsilon}(t) = -\frac{\partial V}{\partial \varepsilon}, \quad (14)$$

где синергетический потенциал V в зависимости от параметра порядка $\varepsilon(t)$ определяется подстановкой равенств (12) в уравнение эволюции (8). При постоянных значениях τ , η зависимость V в пределе ($\varepsilon^2 \ll \varepsilon_m^2$) сводится к разложению Ландау [26]:

$$V(\varepsilon) = \frac{A}{2} \varepsilon^2 + \frac{B}{4} \varepsilon^4, \quad A = 1 - \frac{n_e}{n_c}, \quad B = \varepsilon_m^{-2} = A_n A_\sigma. \quad (15)$$

Согласно (14), (15) характер стационарного состояния, отвечающего условию $\frac{\partial V}{\partial \varepsilon} = 0$, определяется соотношением между величиной параметра n_e , задаваемой внешними условиями, и критическим значением n_c , определенным равенством (13). В подкритическом режиме $n_e < n_c$ имеем стационарные значения $\varepsilon_0 = \sigma_0 = 0$, и ПД отсутствует. В случае $n_e > n_c$, когда в зависимости (15) параметр $A < 0$, синергетический потенциал $V(\varepsilon)$ имеет минимум $\varepsilon_0 = \left(\frac{|A|}{B} \right)^{\frac{1}{2}}$, и система самопроизвольно переходит в возбужденное состояние с ПД ε_0 :

$$\varepsilon_0 = \varepsilon_m \sqrt{\frac{n_e}{n_c} - 1},$$

$$\sigma_0 = \mu \varepsilon_m \sqrt{\frac{n_e}{n_c} - 1}, \quad n_e = n_c, \quad \text{при } n_e > n_c. \quad (16)$$

Видно, что рост ε приводит к уменьшению n и к росту σ согласно зависимости (16), имеющей гукowski вид при $\varepsilon \gg \varepsilon_m$ и выход на насыщение при достижении предельной степени ПД ε_m . В этой связи можно говорить, что переход системы в возбужденное состояние, определяемое спонтанной ПД $\varepsilon \neq 0$, приводит к трансформации части потенциальной энергии STZ в работу, совершаемую сдвиговой компонентой напряжений $\varepsilon \sigma$.

При малых нагрузках σ_{ext} , когда $n_e(\sigma_{\text{ext}}, T)$ меньше критического значения n_c , концентрация STZ настолько мала, что между ними не устанавливается коллективная связь (взаимодействие). $V(\varepsilon)$ (15) монотонно возрастает, и система релаксирует к стационарным значениям $\varepsilon_0 = \sigma_0 = 0$, $n = n_e$. С ростом нагрузки σ_{ext} обеспечивается условие $n_e > n_c$, между STZ возникает притяжение, формируется конденсат STZ — новое структурное состояние среды с ПД. $V(\varepsilon)$ (15) приобретает минимум в точке $\varepsilon_0 = \varepsilon_m \sqrt{\frac{n_e}{n_c} - 1}$, соответствующей стационарному значению ПД, возникшей на новом масштабном (структурном) уровне (образование плоскости скольжения). Согласно (16), время формирования этого нового структурного уровня деформации $\tilde{\tau}$ и определяемое им значение парциальной вязкости $\eta(\tilde{\tau}) = \mu \tilde{\tau}$ имеют вид

$$\tilde{\tau} = \tau \left[\frac{n_e}{n_c} - 1 \right]^{-1}, \quad \eta(\tilde{\tau}) = \eta \left[\frac{n_e}{n_c} - 1 \right]^{-1}, \quad \eta = \mu \tau. \quad (17)$$

Поскольку вязкость определяется равенством $\eta^{-1} = \frac{\partial \dot{\varepsilon}}{\partial \sigma}$, а включение нового структурного уровня деформации приводит к вкладу $\dot{\varepsilon} = \frac{\varepsilon_m}{\tau}$ в скорость ПД, то эффективная вязкость равна $\eta_{\text{eff}}^{-1} = \eta^{-1} + \eta(\tilde{\tau})^{-1}$. С учетом (17) отсюда при $n_e > n_c$ получаем $\eta_{\text{eff}} = \frac{n_c}{n_e} \eta < \eta$, т.е. формирование нового структурного уровня деформации понижает эффективную вязкость среды.

Выше мы рассмотрели ПД как непрерывное неравновесное структурное превращение, тогда как в действительности оно протекает по механизму первого рода [1,2]. Для этого учтем нелинейный характер диссипативного процесса, в ходе которого модуль сдвига $\mu(\varepsilon)$

уменьшается с увеличением ПД. Удобно воспользоваться простейшей аппроксимацией:

$$\mu(\varepsilon) = \frac{\mu}{1 + \left(\frac{\varepsilon}{\varepsilon_\tau}\right)}, \quad (18)$$

где положительный параметр ε_τ определяет характерный масштаб ПД, на котором проявляется дисперсия. При этом в зависимости $V(\varepsilon)$ возникает барьер, разделяющий исходное и новое стационарное состояние, который характеризует переходы первого рода [25]. В результате синергетический потенциал (15) и уравнение релаксации (14) приобретают вид:

$$V(\varepsilon) = \left(1 - \frac{n_e}{n_c}\right) \frac{\varepsilon^2}{2} - \frac{1}{\varepsilon_\tau} \frac{\varepsilon^3}{3} + \left(\frac{1}{\varepsilon_\tau^2} - \frac{n_e}{n_c \varepsilon_m^2}\right) \frac{\varepsilon^4}{4},$$

$$\tau \dot{\varepsilon}(t) = -\frac{\partial V(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} = -(\varepsilon - \varepsilon_1)(\varepsilon - \varepsilon_2)(\varepsilon - \varepsilon_3), \quad (19)$$

$$\varepsilon_1 = 0, \quad \varepsilon_2 = \frac{\frac{1}{\varepsilon_\tau} - \sqrt{D}}{2\left(\frac{1}{\varepsilon_\tau^2} + \frac{n_e}{n_c \varepsilon_m^2}\right)}, \quad \varepsilon_3 = \frac{\frac{1}{\varepsilon_\tau} + \sqrt{D}}{2\left(\frac{1}{\varepsilon_\tau^2} + \frac{n_e}{n_c \varepsilon_m^2}\right)},$$

$$D = \frac{1}{\varepsilon_\tau^2} - 4\left(1 - \frac{n_e}{n_c}\right) \left(\frac{1}{\varepsilon_\tau^2} + \frac{n_e}{n_c \varepsilon_m^2}\right). \quad (20)$$

Из (19), (20) видно, что при малых n_e дискриминант $D(n_e) < 0$, поэтому существует только одно физическое устойчивое состояние с ПД $\varepsilon_1 = 0$, комплексные корни $\varepsilon_2, \varepsilon_3$ — нефизические. При достижении критического значения $n_e = n_c^*$ (дискриминант $D(n_c^*) = 0$) физическое состояние с ПД $\varepsilon_1 = 0$ остается абсолютно устойчивым, но появляются физические (не комплексные) корни $\varepsilon_2, \varepsilon_3$:

$$\varepsilon_2 = \varepsilon_3 = \left[2\varepsilon_\tau \left(\frac{1}{\varepsilon_\tau^2} + \frac{n_e}{n_c \varepsilon_m^2}\right)\right]^{-1}, \quad n_c^* \simeq \frac{7}{8} n_c, \quad (21)$$

причем новое физическое состояние с отличной от нуля ПД $\varepsilon_2 = \varepsilon_3$ является абсолютно неустойчивым. При дальнейшем увеличении n_e из (20), (21) видно, что корень ε_2 уменьшается и начинает стремиться к корню $\varepsilon_1 = 0$. При достижении сверхкритического значения $n_e = n_c$ дискриминант $D(n_c) = \frac{1}{\varepsilon_\tau^2}$, а физическое состояние с ПД $\varepsilon_1 = 0$ становится абсолютно неустойчивым:

$$\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 0, \quad \varepsilon_3 = \left[\varepsilon_\tau \left(\frac{1}{\varepsilon_\tau^2} + \frac{1}{\varepsilon_m^2}\right)\right]^{-1}, \quad n_c = \frac{\mu}{A_\sigma}. \quad (22)$$

Новое физическое состояние с отличной от нуля ПД ε_3 становится абсолютно устойчивым.

Другими словами, если параметр n_e не превышает критическое значение n_c^* , $V(\varepsilon)$ имеет монотонно возрастающий характер. При $n_e = n_c^*$ появляется плато, которое при увеличении n_e преобразуется в минимум. Состояние с ПД становится синергетически выгодным, начиная со значения $n_e = n_{**}$, при котором достигается условие $V(0) = V(\varepsilon_3)$, обеспечивающее равенство значений потенциала в отсутствие деформации $\varepsilon = 0$

и при стационарном значении $\varepsilon = \varepsilon_3$. При достижении сверхкритического значения n_c барьер, разделяющий состояния $\varepsilon = 0$ и $\varepsilon = \varepsilon_3$, пропадает, и $V(\varepsilon)$ приобретает вид, присущий переходам второго рода.

Обсудим некоторые важные свойства деформируемой среды. Она является нелинейной, на что указывает сложный характер зависимости „напряжение–деформация“ [1,2]. Деформируемая среда в процессе нагружения меняет свою структуру, т.е. является структурно неустойчивой [20,25], например, относительно образования STZ. Деформируемая среда является активной [20,25], так как содержит распределенные по объему локальные источники потенциальной энергии и сдвига — STZ. Согласно представлениям о природе самоорганизации в открытых системах [25], такая активная нелинейная структурно-неустойчивая среда может генерировать автоволновые процессы.

Нелинейность среды приводит к появлению неединственности стационарных однородных решений уравнения релаксации ПД (режимов деформации). В переходной области $n_c^* > n > n_c$ в распределенной системе может возникнуть бегущая автоволна [25], переводящая образец из одного (неупругого) режима деформации в другой (пластический).

Неоднородность аморфной среды приводит к неоднородному распределению STZ, поэтому в некоторой области поверхности образца концентрация STZ может стать больше критической n_c^* . STZ начинают взаимодействовать, притягиваться, наконец, конденсируются в зародыш новой структуры с ПД. Затем протекает эстафетный процесс распространения ПД в направлении максимального касательного напряжения (распространение полосы сдвига), выбранного вдоль направления оси x , который подчиняется автоволновому уравнению [25]:

$$\dot{\varepsilon}(t) = -\frac{1}{\tau}(\varepsilon - \varepsilon_1)(\varepsilon - \varepsilon_2)(\varepsilon - \varepsilon_3) + D \frac{\partial^2 \varepsilon}{\partial x^2}, \quad (23)$$

где D — коэффициент подвижности ПД.

Зададим в качестве начальных условий профиль деформации, изменяющийся в некоторой произвольной точке оси X скачком от $\varepsilon_1 = 0$ до ε_3 . В течение переходного периода начальный профиль перестроится в стационарный фронт волны, распространяющейся вдоль оси x с постоянной скоростью V . В системе координат, связанной с движущимся фронтом волны справа налево, уравнение процесса распространения автоволны (23) примет вид

$$D \frac{d^2 \varepsilon}{dx^2} - V \frac{d\varepsilon}{dx} + \Phi(\varepsilon) = 0,$$

$$\Phi(\varepsilon) = -\frac{1}{\tau}(\varepsilon - \varepsilon_1)(\varepsilon - \varepsilon_2)(\varepsilon - \varepsilon_3). \quad (24)$$

Здесь $\varepsilon(x)$ — деформация, x — координата по оси x , V — линейная скорость перемещения режимов деформации. Граничные условия задаются в виде

$$\varepsilon(+\infty) = \varepsilon_3, \quad \varepsilon(-\infty) = \varepsilon_1. \quad (25)$$

Здесь ε_1 и ε_3 — стационарные деформации образца, соответствующие режиму с пнеупругой деформацией и ПД соответственно. Решение задачи сводится к нахождению величины V , являющейся собственным значением уравнения (24), (25), соответствующим стационарному решению автоволнового уравнения.

Скорость автоволны можно получить, сделав подстановку, понижающую порядок уравнения (24), (25), и интегрируя в пределах от ε_1 до ε_3 :

$$V = \left[\int_{\varepsilon_1}^{\varepsilon_3} \Phi(\varepsilon) d\varepsilon \right] \left[\int_{\varepsilon_1}^{\varepsilon_3} P(\varepsilon) d\varepsilon \right]^{-1}, \quad P(\varepsilon) = \frac{d\varepsilon}{dx}. \quad (26)$$

Это выражение не позволяет точно вычислить V , пока не решены уравнения (24), (25) и не найдена функция $P(\varepsilon)$. Но выражение (26) описывает основные качественные закономерности рассматриваемого явления. Функция $P(\varepsilon)$ по всей ширине фронта имеет постоянный знак плюс, поэтому выражение (26) дает информацию о направлении движения волны (т. е. о знаке V). Также (26) позволяет определить условие, при котором могло бы происходить изменение направления этого движения. Если интеграл $\int_{\varepsilon_1}^{\varepsilon_3} \Phi(\varepsilon) d\varepsilon > 0$, то волна движется в сторону заполнения образца режимом с ПД ε_3 . Равенство $\int_{\varepsilon_1}^{\varepsilon_3} \Phi(\varepsilon) d\varepsilon = 0$ является критическим условием смены направления движения фронта, при котором скорость распространения волны обращается в нуль. Это условие отвечает стационарному состоянию системы, при котором в образце могут устойчиво и стационарно сосуществовать зоны с ПД и неупругой деформацией. Существует критическое значение концентрации n_{**} , при котором скорость движения автоволны равна нулю. Часть среды, испытывавшая неравновесный переход в состояние с ПД (образование и распространение полосы скольжения) является квазистатическим структурным дефектом нового масштабного уровня с большим временем релаксации. ПД необратима, поэтому распространение фронта автоволны в противоположную сторону невозможно.

Используя конкретный вид $\Phi(\varepsilon)$ (24) получим выражение для $\frac{d\varepsilon}{dx}$:

$$\frac{d\varepsilon}{dx} = \sqrt{\frac{1}{2D\tau}} (\varepsilon_3 - \varepsilon)(\varepsilon - \varepsilon_1). \quad (27)$$

Используя (27), получим выражение для скорости волны V :

$$V = \sqrt{2\frac{D}{\tau}} \left(\frac{[\varepsilon_3 + \varepsilon_1]}{2} - \varepsilon_2 \right). \quad (28)$$

Из (28) видно, что скорость распространения автоволны ПД пропорциональна корню квадратному из произведения коэффициента подвижности на обратное время релаксации ПД.

Ширину фронта автоволны можно определить как отношение максимального перепада ПД к максимальному

градиенту деформаций P_{\max} во фронте

$$\delta = \frac{(\varepsilon_3 - \varepsilon_1)}{P_{\max} \sqrt{2D\tau} \frac{1}{(\varepsilon_3 - \varepsilon_1)}}. \quad (29)$$

Таким образом, ширина фронта пропорциональна корню квадратному из произведения коэффициента подвижности на время релаксации ПД.

Тогда решение уравнения (24) имеет вид

$$\varepsilon(x) = \left[\varepsilon_3 + \varepsilon_1 \exp\left(\frac{4x}{\delta}\right) \right] \left[1 + \exp\left(\frac{4x}{\delta}\right) \right]^{-1}. \quad (30)$$

Из (30) следует, что профиль деформации симметричен и P_{\max} соответствует значению деформации, равной $\frac{[\varepsilon_3 + \varepsilon_1]}{2}$. Необходимо отметить, что, поскольку δ, V, ε_3 макровеличины, которые могут быть измерены экспериментально, то соотношения (28), (29) дают средство вычисления коэффициента подвижности, времени релаксации и максимального градиента ПД — важных физических свойств ПД. Характерные экспериментальные значения $\delta \sim l \sim 10^{-8}$ м, $V \sim 10^{-4}$ м·с⁻¹, $\varepsilon_3 \sim 10^{-2}$ [1,2,5,6], тогда из (28), (29) можно вычислить $\tau \sim 10^{-8}$ с, $D \sim 10^{-12}$ м²·с⁻¹, $P_{6\max} \text{ м}^{-1}$.

Таким образом, процесс образования (на свободной поверхности), продвижения и выхода полосы сдвига на другую свободную поверхность образца есть процесс возникновения зародыша и распространения автоволны ПД.

4. Выводы и заключение

Из результатов, полученных в разд. 2–4 следуют выводы:

- квазистатическая деформация в АМС есть сложный релаксационный многоэтапный процесс, представляющий собой упорядоченную во времени иерархическую последовательность взаимосвязанных структурных переходов первого рода. Эти неравновесные процессы последовательно протекают на различных масштабных пространственно-временных уровнях, начиная с самого низшего уровня — кластера атомов первой координационной сферы со временем релаксации τ_η , затем среднего уровня — нанокластера атомов пятой координационной сферы со временем релаксации τ_φ , наконец, высшего уровня — атомов полосы скольжения с пространственным масштабом 10 нм и временем релаксации τ , причем $\tau \gg \tau_\varphi \gg \tau_\eta$;

- при напряжении от предела пропорциональности до предела упругости процесс образования состояния с STZ непосредственно в аморфной структуре подавлен, так как упругая энергия и другие факторы существенно увеличивают энергию образования STZ.

- неравновесный структурный переход первого рода из упругого состояния в состояние с STZ протекает через предпереходное состояние — неупругое состояние и описывается двумя параметрами: ближнего порядка и

среднего порядка, подчиняющимися связанным уравнениям релаксации Ландау–Халатникова;

- скорость релаксации содержит два члена различной физической природы. Первый „термический“ связан с локальной тепловой флуктуацией атомов кластера из упругого деформированного состояния в новое состояние, с неупругой деформацией. Второй „атермический“ связан с туннелированием в двухямяном потенциале, стимулированным локальным напряжением, атомов кластера из упругого деформированного состояния в новое состояние, с неупругой деформацией;

- физической причиной и условием возникновения неустойчивости состояния с первоначальным ближним порядком относительно перехода в состояние с STZ являются накопление плотности потенциальной энергии упругой деформации до критического значения, равного $v_{el} \sim 1.7 \cdot 10^{-3}$ eV на атомный объем, и время действия нагрузки, превышающее время релаксации среднего порядка;

- при напряжении от предела упругости до предела текучести процесс образования состояния с ПД непосредственно в аморфной структуре подавлен, так как упругая энергия и другие факторы существенно увеличивают энергию его образования;

- неравновесный структурный переход первого рода из состояния с STZ в состояние с ПД обеспечивается самоорганизацией сдвиговой компоненты деформаций, сдвиговой компоненты напряжений с одной стороны и STZ с другой стороны, и описываются системой уравнений Лоренца;

- если при увеличении нагрузки концентрация STZ превысит критическое значение, проявляются коллективные эффекты (притягивающее взаимодействие) в поведении STZ, и они могут конденсироваться;

- благодаря притяжению STZ, обладающих запасенной потенциальной энергией, элементарным сдвигом и избыточным свободным объемом, образуется сконденсированный зародыш ПД. Спонтанно возникает коллективная мода ПД, приводящая к „пластической“ добавке к исходной величине упругой и неупругой деформации;

- появляется новый структурный уровень деформации — микроскопическая ПД. При этом к исходному сдвиговому напряжению добавляется коллективная составляющая, а концентрация STZ уменьшается. С ростом величины ПД сдвиговое напряжение и время релаксации нового структурного уровня деформации увеличиваются, а концентрация STZ и эффективная вязкость среды уменьшаются;

- физическими причиной и условием возникновения неустойчивости состояния с STZ относительно перехода в состояние с ПД является дополнительное накопление плотности потенциальной энергии неупругой деформации (энергии STZ) до критического значения, равного $v_{el} \sim 1.7 \cdot 10^{-3}$ eV на атомный объем, и время действия нагрузки, превышающее время релаксации ПД;

- поскольку АМС является неоднородной средой [1,2], то для STZ характерно негомогенное распределение.

Это приводит к локализации установления коллективной связи (притяжения) в ансамбле STZ и к автолокализованному образованию — автоволне, зарождение и распространение которой формирует структурный дефект (полосу скольжения) на более высоком масштабном пространственно-временном уровне [1,2];

- только структурно-неустойчивая, активная, нелинейная среда способна генерировать автоволновые процессы. Среда АМС в процессе нагружения меняет свою структуру, т.е. является структурно неустойчивой относительно образования STZ. Деформируемая среда АМС является активной, так как содержит распределенные по объему локальные источники потенциальной энергии, сдвига и избыточного свободного объема — STZ. Нелинейность среды АМС приводит к появлению неединственности стационарных однородных решений уравнения релаксации ПД.

Проведенное теоретическое рассмотрение позволило вскрыть автоволновую природу эффекта ПД и аналитически вычислить скорость распространения автоволны переключения из режима с неупругой деформацией в режим с ПД. В интервале неединственности (в переходной области) в ответ на локально внесенное возмущение возникает бегущая автоволна, формирующая полосу скольжения. Поскольку экспериментальные значения ширины фронта $\delta \sim l \sim 10^{-8}$ м, скорости фронта, $V \sim 10^{-4}$ м·с⁻¹, ПД $\epsilon_3 \sim 10^{-2}$ определены [1,2,5,6], то можно вычислить важные физические свойства ПД: время релаксации $\tau \sim 10^{-8}$ с, коэффициент подвижности $D \sim 10^{-12}$ м²·с⁻¹, максимальный градиент $P_{6_{max}}$ м⁻¹.

Таким образом, предлагаемые гипотеза, кинетическая и синергетическая модели позволяют сформулировать физическую картину, причину, условие, микроскопический механизм квазистатической неупругой и ПД как сложный релаксационный многоэтапный процесс, представляющий собой упорядоченную во времени иерархическую последовательность взаимосвязанных структурных переходов первого рода. Они объясняют локализованный характер явления ПД в АМС, количественно и качественно описывают результаты и закономерности, полученные экспериментально [1–9]. Возникающие при этом в образце пространственно-временные структуры (автоволны) локализации деформации микроскопического масштаба спонтанно генерируются при деформации с низкой постоянной скоростью. Деформируемая среда в ходе процесса ПД спонтанно расслаивается на малые по ширине плоскости скольжения, и большие по ширине пластически недеформирующиеся области между плоскостями скольжения.

Финансирование работы

Работа выполнена в рамках государственного задания ФИЦ ИВТ СО РАН.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] К. Судзуки, Х. Худзимори, К. Хасимото. *Аморфные металлы* (Металлургия, М., 1987), 328 с.
- [2] А.М. Глезер, Н.А. Шурыгина. *Аморфно-нанокристаллические сплавы* (Физматлит, М., 2013), 452 с.
- [3] Г.Е. Абросимова. УФН, **181**, 1265–1281 (2011). DOI: 10.3367/UFNr.0181.201112b.1265
- [4] F. Spaepen. In: *Houches Lectures XXXV on Physics of Defects* (North Holland Press, Amsterdam, 1981), p. 133–174.
- [5] Г. Нейхаузер, Р.П. Штоссель. В сб.: *Быстрозакаленные металлические сплавы*, под ред. С. Штиба, Г. Варлимонта (Металлургия, М., 1989), с. 247–252.
- [6] F. Spaepen. *Acta Metall.*, **25**, 407–415 (1977). DOI: 10.1016/0001-6160(77)90232-2
- [7] M. Stoica, J. Das, J. Bednarcik, H. Franz, N. Mattern, W.H. Wang, J. Eckert. *J. Appl. Phys.*, **104**, 0135222008. DOI: 10.1063/1.2952034
- [8] Г.Е. Абросимова, А.С. Аронин, Н.С. Афоникова, Н.П. Кобелев. ФТТ, **52** (9), 1763–1768 (2010).
- [9] T.C. Hafnagel, J.A. Wert, J. Almer. *Phys. Rev. B*, **73** (6), 064204 (2006). DOI: 10.1103/PhysRevB.73.064204
- [10] A.S. Argon, H.Y. Kuo. *Mater. Sci. Eng. A*, **39** (1), 101–109 (1979). DOI: 10.1016/0025-5416(79)90174-5
- [11] D.E. Polk, D. Turnbull. *Acta Metall.*, **20**, 493–498 (1972). DOI: 10.1016/0001-6160(72)90004-1
- [12] J.J. Gilman. *J. Appl. Phys.*, **46**, 1625–1633 (1975). DOI: 10.1063/1.321764
- [13] M.F. Ashby, J. Logan. *Scripta Met.*, **7**, 513 (1973). DOI: 10.1016/0036-9748(73)90105-1
- [14] E. Bouchbinder. *Phys. Rev. E*, **77**, 051505 (2008). DOI: 10.1103/PhysRevE.77.051505
- [15] J.S. Langer. *Phys. Rev. E*, **77**, 021502 (2008). DOI: 10.1103/PhysRevE.77.021502
- [16] E. Bouchbinder, J.S. Langer. *Phys. Rev. E*, **80**, 031131 (2009). DOI: 10.1103/PhysRevE.80.031131
- [17] E. Bouchbinder, J.S. Langer. *Phys. Rev. E*, **80**, 031132 (2009). DOI: 10.1103/PhysRevE.80.031132
- [18] E. Bouchbinder, J.S. Langer. *Phys. Rev. E*, **80**, 031133 (2009). DOI: 10.1103/PhysRevE.80.031133
- [19] В.Е. Панин, В.А. Лихачев, Ю.В. Гриняев. *Структурные уровни деформации твердых тел* (Наука, Новосибирск, 1985), 255 с.
- [20] Е.Е. Слядников, И.Ю. Турчановский. ЖТФ, **91** (11), 1662 (2021). DOI: 10.21883/JTF.2021.11.51526.35-21
- [21] Е.Е. Слядников. Изв. вузов. Физика, **64** (12), 27 (2021). DOI: 10.17223/00213411/64/12/27
- [22] С.Ю. Коростелев, Е.Е. Слядников, И.Ю. Турчановский. Изв. вузов. Физика, **65** (8), 49 (2022). DOI: 10.17223/00213411/65/8/49
- [23] S.Yu. Korostelev, E.E. Slyadnikov, I.Yu. Turchanovsky. *AIP Conf. Proc.*, **2509**, 020113 (2022). DOI: 10.1063/5.0084375
- [24] С.Ю. Коростелев, Е.Е. Слядников, И.Ю. Турчановский. *Тез. докл. междунар. конф. «Физическая мезомеханика материалов. Физические принципы формирования многоуровневой структуры и механизмы нелинейного поведения»* (Томск, Россия, 2022), с. 300–301. DOI: 10.25205/978-5-4437-1353-3-183.
- [25] Г. Хакен. *Синергетика* (Мир, М., 1980), 406 с.
- [26] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. *Статистическая физика. Ч. I* (Наука, М., 1976), 584 с.
- [27] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. *Физическая кинетика* (Наука, М., 2001), 528 с.
- [28] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. *Теория упругости* (Наука, М., 1987), 247 с.