

07,10

Деформация упругой матрицы, индуцированная фазовыми превращениями во включениях с образованием янус-частиц

© В.Б. Федосеев

Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,
Нижний Новгород, Россия

E-mail: vbfedoseev@yandex.ru

Поступила в Редакцию 1 апреля 2026 г.

В окончательной редакции 17 апреля 2026 г.

Принята к публикации 23 апреля 2026 г.

Изменение поля упругих напряжений изотропной эластичной матрицы в окрестности частицы, меняющей форму, смоделировано в рамках электростатической аналогии. Рассмотрен случай, при котором фазовый переход в частицах дисперсной фазы индуцирует деформацию упругой матрицы.

Ключевые слова: морфология частиц, упругое поле, дипольный и квадрупольный момент, композиционный материал.

DOI: 10.61011/FTT.2026.04.63324.9356

1. Введение

Механическое напряжение может быть одним из термодинамических факторов, определяющих положение характеристических кривых и точек на фазовых диаграммах (бинодали, ликвидуса, критических температур расслаивания, точек эвтектики и др.). Для расслаивающихся растворов полимеров подобные явления известны с середины XX в. [1]. Их термодинамическая интерпретация описана в [2].

Влияние сдвиговой деформации на фазовое состояние описано для полимерных систем [3,4] и сплавов [5]. В этих обзорах рассмотрены явления, связанные с фазовыми превращениями, индуцированными деформацией. В [1] изменение растворимости компонентов полимерной смеси связывают с тем, что механическое поле подавляет флуктуации концентрации и разрушает зародыши новой фазы.

Несколько иная интерпретация предложена в [6]. Она основана на термодинамическом описании эффекта формы при фазовых превращениях в малом объеме. Рассмотрение расслаивающегося полимерного раствора в пористой матрице показало, что ее деформация способна менять состав сосуществующих фаз и способствовать гомогенизации смеси ограниченно растворимых компонентов.

Естественно предположить существование обратного эффекта, при котором фазовый переход индуцирует деформацию. В материаловедении к подобным явлениям можно отнести дисперсионное упрочнение или разрушение материалов, обусловленное возникновением внутренних напряжений в зоне фазовых превращений [5,7]. Не менее ярким примером являются сплавы с памятью формы [8].

Задача настоящего сообщения — рассмотреть случай, при котором фазовый переход в частицах дисперсной фа-

зы индуцирует деформацию упругой матрицы. Причиной деформации является возникновение янус-конфигурации при переходе частицы из гомогенного состояния в гетерогенное. Этот процесс сопровождается, как и всякое искажение сферической формы, изменением линейных размеров частиц.

Янус-конфигурация достаточно часто возникает при фазовых превращениях в частицах или включениях, содержащих расслаивающийся твердый раствор. Образование янус-частиц сопровождается изменением формы, следствием чего является деформация окружающей частицу среды с соответствующим изменением упругого поля.

Равновесная форма янус-частицы определена соотношением поверхностного натяжения межфазных границ. Деформация незначительна при хорошем смачивании возникающих фаз и увеличивается с ростом поверхностного натяжения межфазной границы до состояния абсолютного несмачивания [9,10]. Например, когда смачивание близко к идеальному $\gamma_G \cong |\gamma_L - \gamma_R|$, относительные удлинение и сужение при образовании янус-частицы незначительны и составляют доли процента. Максимальная деформация достигается, если смачивание уменьшается до предела $\gamma_G \cong \gamma_L + \gamma_R$. В этом случае относительные удлинение и сужение имеют величину 57 и -21% соответственно. Здесь γ_I — поверхностные натяжения внешних ($I = L, R$ — левая и правая) и межфазной ($I = G$) границ.

Рис. 1 демонстрирует изменения размеров частицы при расслаивании раствора на две фазы с образованием янус-конфигурации.

Одним из результатов формирования янус-частиц является появление упругих дипольных и квадрупольных моментов, взаимодействие которых может сопровождаться коллективными эффектами, связанными с переориентацией и смещением частиц.

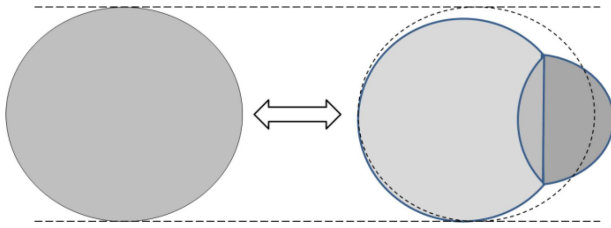


Рис. 1. Деформация при образовании янус-частицы.

Энергия, выделяющаяся при фазовом превращении, может рассеиваться в окружающей частицу среде в виде тепла, поля упругих напряжений и пластических деформаций. Например, в окрестности сфероида с одноосной пластической дисторсией возникает поле упругих напряжений, описанное в [11]. Согласно приведенным оценкам, оно имеет достаточную энергию для зарождения в окрестности сфероида дислокационных петель, т. е. является источником пластической деформации. Моделирование подобных процессов в сплавах с памятью формы описано в [7].

2. Вариация поля упругих напряжений в результате образования янус-частиц

Для моделирования упругого поля использована электростатическая аналогия между уравнениями электростатики и теории упругости [12]. Напряжения окружающей частицу изотропной матрицы моделировались функцией $\sigma(r) \propto \delta V/r^3$ [12,13], где радиус r отсчитывается от геометрических центров сферической частицы или отдельных фаз α и β , а роль заряда выполняет δV — дилатация матрицы около сферического включения. Для отдельных фаз дилатация определялась их объемными долями $\delta V_\beta = \delta V\theta$, $\delta V_\alpha = \delta V(1 - \theta)$, где $\theta = V_\beta/V$ —

объемная доля фазы β , V и V_β — объемы частицы и фазы.

В общем случае при фазовых превращениях объем системы меняется, вместе с ним меняется дилатация δV . Далее использовано приближение постоянства объема частицы $\delta V = \text{const}$, при котором энтальпийные эффекты не рассматриваются. Фазовые превращения с образованием структуры core–shell не влияют на поле упругих напряжений.

На рис. 2 схематически показаны поля напряжений в окрестности частиц сферической (рис. 2, *a*) и двух янус-частиц, имеющих разные объемные доли фаз θ (рис. 2, *b* и *c*). На больших расстояниях различия упругого поля между этими состояниями сглаживаются.

Искажение исходного распределения упругих напряжений можно связать с расхождением геометрических центров исходной сферы и отдельных фаз, образующих янус-конфигурацию. Заметим, что центры фаз могут отличаться и при образовании конфигурации core–shell, но core-фаза не выходит за границы исходной сферы и не влияет на упругое поле.

На рис. 3 показана вариация поля упругих напряжений $\delta\sigma(r) \approx (\delta V_\alpha/r_\alpha^3 + \delta V_\beta/r_\beta^3) - \delta V/r_0^3$ при образовании янус-конфигурации из сферической частицы $\delta V = \delta V_\alpha + \delta V_\beta$. Обозначим координаты исходной сферической частицы (x_0, y_0) , центр янус-частицы имеет координаты (x_J, y_J) , центры фаз (x_α, y_α) , (x_β, y_β) . Рассмотрим случай с неподвижным центром частицы $(x_J, y_J) = (x_0, y_0)$, при этом координаты свяжем по правилу рычага: чем больше объемная доля фазы, тем ближе она к центру частицы $(x_0 = x_\alpha + (x_\beta - x_\alpha)\theta, y_0 = y_\alpha + (y_\beta - y_\alpha)\theta)$. В этом случае точка (x_J, y_J) остается центром симметрии упругого поля, даже если при фазовом превращении образуются несимметричные частицы (рис. 3, *b*).

Фазовое превращение приводит к росту напряжений в аксиальных областях и снижению их в радиальной области, там где размер частицы становится меньше.

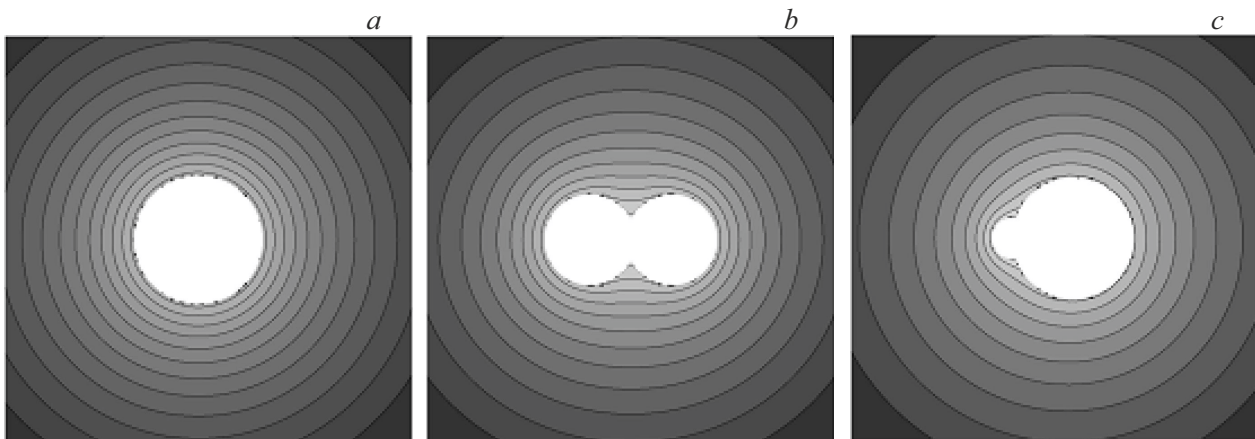


Рис. 2. Поле упругих напряжений вокруг *a*) сферической частицы, *b* и *c*) янус-частиц с объемной долей $\theta = 50$ и 90% соответственно.

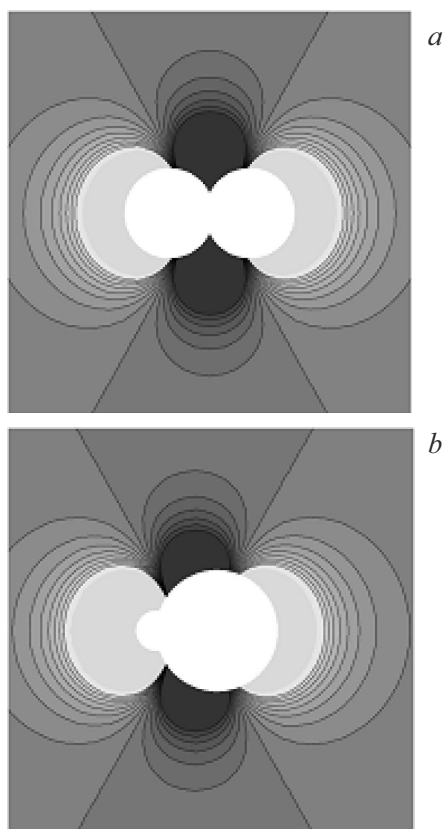


Рис. 3. Вариация поля упругих напряжений при образовании янус-частиц с объемной долей $a) \theta = 50$ и $b) 90\%$.

Если в исходном и конечном состоянии центры частицы совпадают (рис. 3 и 4, b) или близки — $(x_1, y_1) \cong (x_0, y_0)$, упругое поле около нее имеет квадрупольный момент. Более строго аналогичная ситуация смоделирована для сфероида [11]. В общем случае образование янус-конфигурации может происходить со смещением геометрического центра частицы: $(x_1, y_1) \neq (x_0, y_0)$. При этом меняется локализация об-

ластей усиления и ослабления упругих напряжений, а также симметрия упругого поля (рис. 4).

Квадрупольный момент исчезает с увеличением расстояния между исходным и конечным положением центра частицы, вместе с этим появляется и возрастает дипольный момент (рис. 4, a и c). Во всех случаях энергия упругого поля янус-частицы больше, чем у сферы. Заметим, что возникновение дипольного момента не следует связывать с изменением морфологии частиц. Дипольный момент появляется при смещении в упругой матрице любого объекта. Например, при сдвиге центра сферы на δx вариация поля имеет вид $\delta\sigma(x, y) \approx (x^2 + y^2)^{-3/2} - ((x + \delta x)^2 + y^2)^{-3/2}$. Напряжения растут с той стороны, куда смещается сфера, и снижаются с противоположной. Как и в электростатике, суммарная энергия поля возрастает с ростом дипольного момента, поэтому смещение центра частицы становится энергетически невыгодным. Следствием является появление сил, стремящихся вернуть янус-частицу к исходному геометрическому центру (на рис. 4 — из состояний (a) и (c) к состоянию (b)). Расхождение между исходным и конечным положением центра частицы может возникать при большой скорости фазового превращения. Сдвиг может возникать, когда на частицу действует внешняя сила. Смещение может стать необратимым, если приводит к пластической деформации, при которой матрица „забывает“ исходную конфигурацию упругого поля.

Другим аспектом изменения морфологии частиц при фазовых превращениях является возникновение между ними упругих взаимодействий, подобных взаимодействиям между электрическими диполями и квадрупольями [14,15]. Результатом может быть притяжение, отталкивание или ориентация частиц. Пример взаимодействия упругих (дилатационных) диполей рассмотрен в [16].

Рис. 5 демонстрирует примеры вариации упругих напряжений в окрестности двух одинаковых янус-частиц с $\theta = 50\%$ при разном их расположении.

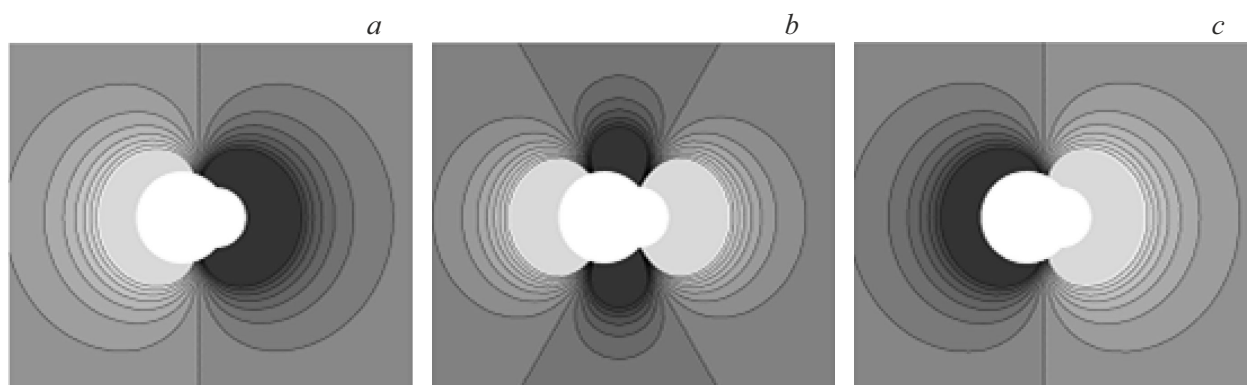


Рис. 4. Вариация поля упругих напряжений янус-частиц с $\theta = 70\%$ при разном положении геометрических центров исходной и конечной конфигурации: $a)$ центр частицы смещен в сторону фазы с меньшим объемом, $b)$ центры совпадают, $c)$ центр частицы смещен в сторону фазы с большим объемом.

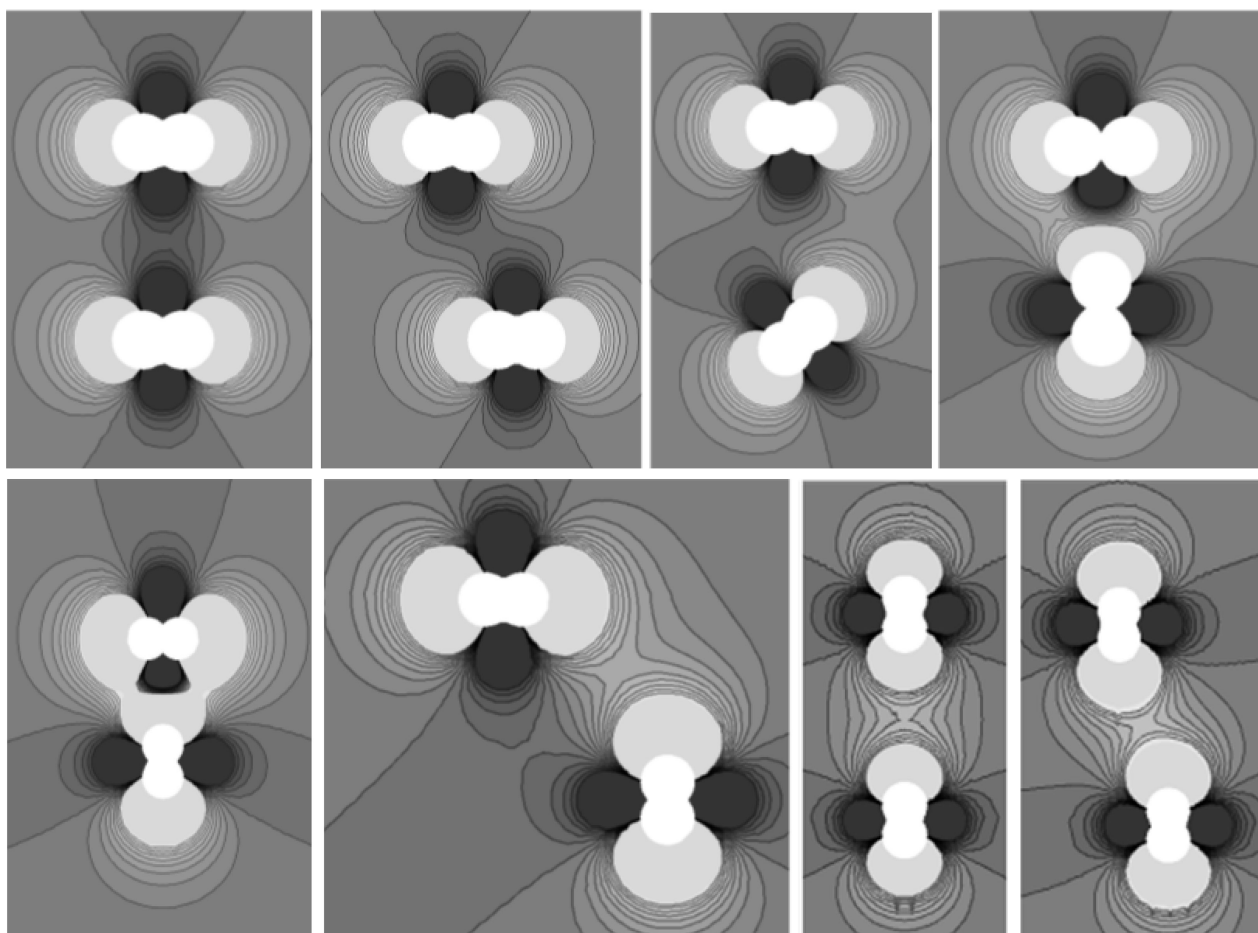


Рис. 5. Вариация поля упругих напряжений при различном положении и ориентации двух янус-частиц с $\theta = 50\%$.

3. Заключение

Электростатическая аналогия позволяет показать, что преобразование сферы в янус-конфигурацию того же объема приводит к росту упругой энергии. При минимизации избыточной упругой энергии система может использовать разные механизмы релаксации упругих напряжений. Например, в непластичной матрице возможно изменение ориентации и сдвиг соседних частиц, согласование ориентации формирующихся янус-частиц с полем соседних частиц, перераспределение компонентов фаз внутри частицы в соответствии с наиболее выгодной ориентацией, гомогенизация с возвратом к сферической конфигурации с последующим образованием янус-частицы с более выгодной ориентацией, подавление фазового перехода либо переход частицы в метастабильное состояние core-shell. В пластичной матрице к этому можно добавить самоорганизацию, агрегацию или выталкивание частиц на поверхность.

Разнообразие механизмов допускает существование разных сценариев коллективного поведения частиц при фазовом превращении. Отклик матрицы композиционного материала на это поведение может представить

самостоятельный интерес. Образование янус-частиц меняет характеристики, связанные с размером, формой, ориентацией и концентрацией дисперсной фазы, которые оказывают существенное влияние на свойства композиционного материала.

Взаимосвязь упругой энергии с морфологией частиц позволяет утверждать, что внешнее воздействие на композиционный материал может противодействовать или содействовать фазовым превращениям с формированием янус-конфигурации. В конечном итоге равновесному состоянию должен соответствовать минимум суммарной энергии частицы и матрицы с учетом упругого поля и дефектов, образовавшихся в ее окрестности.

Конфликт интересов

Автор заявляет, что у него нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] С.А. Вшивков, С.Г. Куличихин, Е.В. Русинова. Успехи химии **67**, 3, 261 (1998). [S.A. Vshivkov, S.G. Kulichikhin, E.V. Rusinova. Russ. Chem. Rev. **67**, 3, 233 (1998).]

- [2] S. Frenkel. *Pure Appl. Chem.* **38**, 1–2, 117 (1974).
- [3] А.Я. Малкин, С.Г. Куличихин, В.А. Кожина. *Высокомолекулярное соединение. Серия А* **38**, 8, 1403 (1996). [A.Ya. Malkin, S.G. Kulichikhin, V.A. Kozhina. *Polymer Sci. Ser. A* **38**, 8, 932 (1996).]
- [4] A.Ya. Malkin. *Adv. Colloid. Interface Sci.* **290**, 102381 (2021).
- [5] И.К. Разумов, А.Е. Ермаков, Ю.Н. Горностырев, Б.Б. Страумал. *УФН* **190**, 8, 785 (2020). [I.K. Razumov, A.E. Ermakov, Yu.N. Gornostyrev, B.B. Straumal. *Phys. — Usp.* **63**, 8, 733 (2020).]
- [6] А.В. Шишулин, В.Б. Федосеев. *ЖТФ* **90**, 3, 358 (2020). [A.V. Shishulin, V.B. Fedoseev. *Tech. Phys.* **65**, 3, 340 (2020).]
- [7] П.К. Кабанова, А.Б. Фрейдин. *Вычислительная механика сплошных сред* **15**, 4, 466 (2022). [P.K. Kabanova, A.B. Freidin. *Computat. Continuum Mech.* **15**, 4, 466 (2022).]
- [8] J.M. Jani, M. Leary, A. Subic, M.A. Gibson. *Materials & Design* (1980–2015) **56**, 1–2, 1078 (2014).
- [9] V.B. Fedoseev. *Colloid J.* **87**, 6, 992 (2025).
- [10] В.Б. Федосеев. *Письма в ЖТФ* **51**, 11, 22 (2025). [V.B. Fedoseev. *Tech. Phys. Lett.* **51**, 6, 20 (2025).]
- [11] Н.А. Берт, А.Л. Колесникова, А.Е. Романов, В.В. Чалдышев. *ФТТ* **44**, 12, 2139 (2002). [N.A. Bert, A.L. Kolesnikova, A.E. Romanov, V.V. Chaldyshev. *Phys. Solid State* **44**, 12, 2240 (2002).]
- [12] Д.П. Хирт, И. Лоте. *Теория дислокаций*. Атомиздат, М. (1972). 599 с. [J.P. Hirth, J. Lothe. *Theory of Dislocations*. McGraw Hill Inc. (1968).]
- [13] Ю.Н. Работнов. *Механика деформируемого твердого тела*. Наука, М. (1988). 744 с.
- [14] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. *Теория поля*. Физматлит, М. (2003). 536 с.
- [15] И.Г. Каплан. *Межмолекулярные взаимодействия. Физическая интерпретация, компьютерные расчеты и модельные потенциалы*. Бином, М. (2014). 394 с. [I.G. Kaplan. *Intermolecular Interactions: Physical Picture, Computational Methods and Model Potentials*. J. Wiley & Sons, Ltd (2006).]
- [16] С.А. Кукушкин, А.В. Осипов. *ФТП* **47**, 12, 1575 (2013). [S.A. Kukushkin, A.V. Osipov. *Semiconductors* **47**, 12, 1551 (2013).]

Редактор Е.В. Толстякова