

и

$$E_l = \left(l + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega \quad l = x, y; \quad l = m, n \quad (5)$$

Численные оценки

Энергетические уровни атома бора в кристалле кремния, несущем краевую дислокацию, оценены при следующих численных значениях параметров: для кремния модуль сдвига $\mu = 6.81 \times 10^{10}$ Па; постоянная кристаллической решетки a и модуль вектора Бюргера b равны друг другу $a = b = 3.84 \times 10^{-10}$ м; отношение Пуассона $\nu = 0.218$; изменение объема, производимое введением атома бора в кремний $\delta v = .294 \times 10^{-28}$ м³.

Максимальное значение абсолютной величины функции V равно 0.399 и глубина потенциальной ямы оценивается значением 3.30 eV.

В предположении, что максимальная ширина потенциальной ямы соответствует параметру кристаллической решетки, аппроксимация потенциала (1) приводит к значениям «упругих» постоянных $k_x = 57.6 \text{ Nm}^{-1}$ и $k_y = 7.15 \text{ Nm}^{-1}$, при этом частоты

$\omega_x = 0.566 \times 10^{14} \text{ s}^{-1}$ и $\omega_y = 0.200 \times 10^{14} \text{ s}^{-1}$. $\frac{\omega_x}{\omega_y} \approx \frac{99}{35}$ Энергия основного состояния

$E_{0,0} = E_{0x} + E_{0y} = 0.117 \text{ eV} + 0.0413 \text{ eV} = 0.158 \text{ eV}$ и состояние $E_{01} = 0.241 \text{ eV}$. Максимальное значение энергии «x-состояний» $E_{13,0} = 3.21 \text{ eV}$ и для «y-состояний» $E_{38,0} = 3.23 \text{ eV}$.

Выводы

Приведенные результаты позволяют предположить возможность излучения фотона атомом примеси в поле упругих напряжений краевой дислокации при смене квантовых состояний.

Список литературы

1. Gutkin M. Yu., Aipantis E.C. *Phys. Stat. Sol.* **214**, 245 (1999)
2. Власов Н.М., ФТТ, **43**, 1999 (2001)

УДК 539.3

ДИНАМИКА СТРУКТУРНОСТИ ПРИ ПЛАСТИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ ПОЛИКРИСТАЛЛОВ НА МЕЗОУРОВНЕ

Осташев В. В., Шевченко О. Д.

Псковский педагогический институт им. С.М.Кирова Псков, Россия

1. Общие положения

Известно, что неоднородность микропластических деформаций в поликристаллических материалах и их осциллирующий характер является общей чертой кинетики микропластических деформаций на мезоуровне. Спектральный анализ кривых микропластических деформаций позволяет дать математическое описание энергетических

состояний мезоуровня и отобразить его адекватной функциональной и геометрической структурой. Возникающая деформационная структура определяется как форма локализации процесса и как определенная корреляция в расположении мезодефектов и связей между ними. Принципиально такой подход может быть реализован только в рамках замкнутой системы определений, когда деформируемый поликристаллический материал представляется системой открытой, нелинейной динамической, многоуровневой иерархической, диссипативной самоорганизующейся, грубой, информационной [1].

Комплексная оценка поведения деформируемого поликристаллического материала под нагрузкой позволяет рассматривать пластическую деформацию как защитную реакцию его на внешнее воздействие. Каждый мезодефект в своей работе решает одну главную задачу – экономию энергии, и, прежде всего, мезодефект должен выжить в условиях стесненной релаксации – все остальные его функции возникают как побочные продукты этой деятельности, а разряд сдвиг – поворот или отдельный акт (сдвиг или поворот) можно рассматривать как финальный акт решения этой задачи. Установление связей с другими мезодефектами на одноименном уровне или по иерархическому принципу служит средством оптимальной организации таких разрядов. Решая задачу экономии энергии, совокупность мезодефектов проходит последовательные ступени самоорганизации, которые в условиях развитой пластической деформации всегда носят общий компенсационный характер.

Динамика структурности в деформируемом поликристаллическом материале проявляется в виде явлений синхронизации и стохастичности, и представляет собой две основных тенденции развития мезоструктуры – проявления устойчивости и неустойчивости. Деформируемый поликристаллический материал приводится к модели эволюционного равновесия, как некоего вида хаотической синхронизации деформационных дефектов на мезоуровне по трансляционным и ротационным модам деформации. Каждый формализованный деформационный дефект представляется в виде осциллятора с определенной амплитудно – частотной характеристикой и взаимодействием в предельных случаях от полностью некогерентного до полностью когерентного. Характеристикой когерентности является коэффициент синхронизации (КС). Одновременно КС является интегральной мерой устойчивости гармоник спектра, играющих роль внутренних степеней свободы развивающейся в процессе деформации структуры [1].

Мезодефект каждого иерархического уровня включается в работу в результате энергетических и информационных взаимодействий на предыдущем структурном уровне – при этом энергия является мерой интенсивности процесса, информация (энтропия) – мерой его упорядоченности. Одновременно когерентность сдвигов определяет процессы массопереноса, объем запасенной энергии и объем информации на структурном уровне, а интенсивность поворотов меняет скорость их движения на смежных уровнях так, что интегральный эффект парных взаимодействий «сдвиг – поворот», как релаксационный процесс, обеспечивает макроскопическую пластическую деформацию.

Известно, что, изменяя в определенной комбинации условия деформирования (жесткость нагружения, скорость деформации, рабочая длина образца, дисперсность структуры), при испытании можем получать контрастные результаты по характеристикам прочности и пластичности [2]. Для деформируемого поликристаллического материала условия деформирования определяют степень открытости его как системы и соответствующий уровень энтропии, или, по-другому – определенной степени открытости на каждом структурном уровне соответствует свой критический уровень энтропии. В структурно определенных системах информация I представляет собой сохраняющуюся величину только вместе с энтропией N. Поскольку N и I аналитически перестановочны, исчисляемы в одних единицах, информацию и энтропию можно рассматривать как единую шкалу движения точки, которая описывает динамику структурности и является мерой устойчивости структуры. Согласно классическим представлениям эн-

тропия отражает ту часть энергии, которая рассеялась, деградировала в тепловой форме и не может быть использована для совершения работы.

Изменение структурного состояния материала в процессе деформации от ε_1 до ε_2 может быть представлено как разность энтропий

$$I_0 = H(\varepsilon_1) - H(\varepsilon_2),$$

и именно в этом заключается сущность неэнтропийного принципа представления информации I_0 .

2. Экспериментальные основы

Экспериментальное изучение динамики структурности при статическом деформировании основано на исследовании полей смещения узлов делительной сетки, нанесенной непосредственно на образец. Геометрическим образом мезодефекта на нижнем структурном уровне является ячейка делительной сетки размером 10 мкм. Более грубые структурные уровни определяются набором исходных ячеек. Каждой ячейке делительной сетки ставится в соответствие мезодефект определенного структурного уровня. Геометрическим образом мезодефекта на нижнем структурном уровне является ячейка делительной сетки размером 10 мкм. Более грубые структурные уровни характеризуются набором ячеек. Поле смещений численным дифференцированием преобразуется в поле дисторсии $\beta_y = \varepsilon_y + \omega_y$. Линейные, сдвиговые и ротационные составляющие микропластической деформации для ячейки делительной сетки размером i , определенные по ансамблю мезодефектов на длине X , описываются некоторой случайной функцией $e_i(x|e_j)$, где $i=10, 20, \dots, 120$ мкм, e_j - средняя деформация. Спектральный анализ всех составляющих выполнен путем расчета периодограмм для дискретных деформаций от 10 до 120 мкм. Коэффициент синхронизации относительно анализируемых иерархических уровней и переходе от одной дискретной деформации к другой определяется как отношение числа синхронизированных частот к общему количеству рассчитанных гармоник спектра. Расчет энтропии и информации проводили по методике [3].

Методом математического планирования исследовали влияние условий деформирования образцов из меди М0 на характеристики прочности и пластичности[3].

Результаты и обсуждение

Основой для анализа динамики структурности служат зависимости изменения КС по трансляционным и ротационным модам деформации для разномасштабных мезодефектов от степени и условий деформации и расчет информационных взаимодействий (рис1).

По закономерностям изменения КС деформационные дефекты можно разбить на три группы и задать иерархию структурных уровней (рис1-а1,б1):

- I - уровень внутризеренных пластических деформаций, размер дефекта 10,20 мкм;
- II - уровень межзеренных пластических деформаций, размер дефекта 40,60 мкм.;
- III - уровень взаимодействия групп зерен как целого - 80,120 мкм.

Три структурных уровня фиксируются при всех условиях испытания, кроме образцов с ультрамелкой структурой.

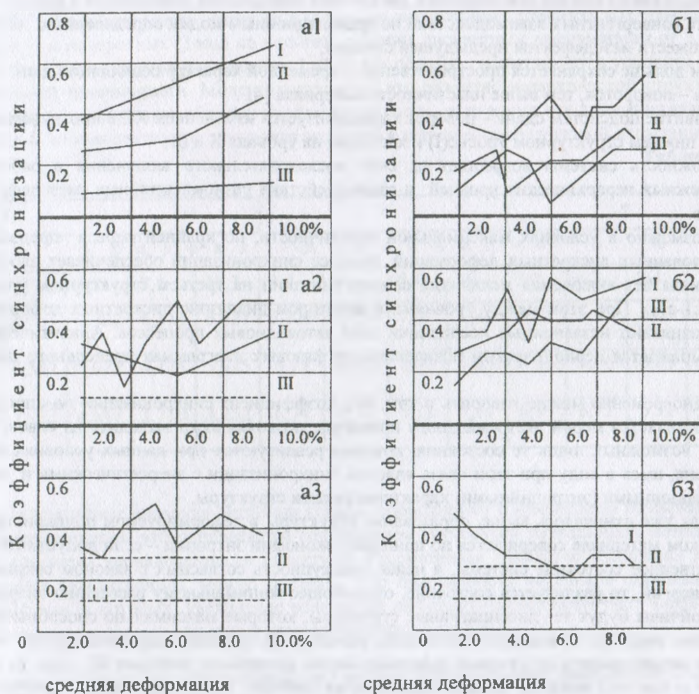


Рис1. Зависимость коэффициента синхронизации от величины средней деформации :

- 1a1, 1a2, 1a3 – КС для линейных (ϵ), сдвиговых (γ), поворотных (ω) мод деформации в условиях максимальной пластичности,
- 1b1, 1b2, 1b3 – КС для линейных (ϵ), сдвиговых (γ), поворотных (ω) мод деформаций в условиях максимальной прочности.

В основе динамики структурообразования в самом общем виде лежит конкуренция двух начал – наращивания неоднородности и диссипативного начала, стремящегося рассеять эту неоднородность. Исследование периодограмм трансляционных и ротационных мод микропластических деформаций показывает, что частотный спектр в процессе деформации меняется, и это характерно только для нелинейных систем. По аналогии с развитием сложных систем стадию увеличения числа гармоник и уменьшения КС называем дивергентной, стадию стабилизации числа гармоник и уменьшения КС – конвергентной. Эти особенности наиболее ярко проявляются на образцах с контрастными характеристиками прочности и пластичности. Для образцов испытанных в условиях максимальной пластичности характерны закономерности (рис1а):

- мезодефекты каждой последующей дискретной деформации развиваются в результате конвергентных взаимодействий по трансляционным модам определенных множеств мезодефектов предыдущей ступени;
- чем больше сохраняется пространственно – временной характер осциллирующий движений – поворотов, тем выше пластичность материала [4] ;
- развитие подсистем сдвиг – поворот характеризуется изменением КС в противофазе на нижнем структурном уровне(I) и хаотично на уровнях II и III;
- сложность системы возрастает за счет последовательного включения в работу сложных иерархических уровней и взаимодействия разномасштабных мезодефектов.

Возможно в условиях максимальной пластичности, по крайней мере в пределах исследованных дискретных деформаций, процесс синхронизации обеспечивает работу материала без включения механизма самоорганизации на третьем структурном уровне(рис1-a1). При этом между уровнями в некотором диапазоне дискретных деформаций возникают независимые посредники типа автоволновых процессов. Аналитически это выражается периодическим появлением на фазовых диаграммах предельного цикла[2].

Одновременно можно говорить о том, что коэффициент синхронизации по определению является мерой экстремального принципа, позволяющего выделить из совокупности возможных лишь те состояния, которые реализуются при данных условиях испытания, имея в виду при этом связь явления синхронизации с энергетическими и информационными (энтропийными) характеристиками структуры.

Как уже отмечалось выше, образование структуры в деформируемом поликристаллическом материале совершается по принципу экономии энтропии – если допустимо не единственное состояние системы, а целая совокупность согласных с законом сохранения энергии, то реализуется состояние, отвечающее минимальному рассеянию энергии и устойчивы будут те диссипативные структуры, которые максимально способны поглощать энергию. Совпадение начальных значений КС по всем деформационным модам и независимость от условий деформирования начального значения КС (рис 1) говорит о том, что имеются выделенные степени свободы, на которых концентрируется энергия мезоуровня, и существуют специальные, выработанные в процессе деформации степени свободы (гармоники), препятствующие диссипации.

Устойчивые состояния когерентных структур мезодефектов в состоянии синхронизации, характеризующиеся ростом КС, определяются известным принципом теории осцилляторных нейронных сетей – для n некогерентных осцилляторов со случайно или равномерно распределенным набором частот и фаз суммарная плотность поглощаемой энергии пропорциональна n , а мезодефекты в условиях полной синхронизации способны поглотить энергию пропорционально квадрату их числа [5]. Таким образом, можно говорить, что возрастание КС способствует сопротивлению развитию деформации и повышению ресурса пластичности (рис 1,а).

С информационной точки зрения формирование структуры на мезоуровне представляет собой последовательный процесс уменьшения неопределенности а синхронизация мезодефектов это по существу накопление информации – увеличение числа элементов , обладающих заданным признаком. В терминах теории информации КС на данном структурном уровне можно определить как индивидуальный символичный код, составленный с помощью символического алфавита, длина которого $L(n)$, функционально связана с числом рассматриваемых мезодефектов или гармоник спектра.

В табл. 1 приведен расчет энтропии в условных энтропийных единицах для трансляционных () и поворотных () мод по четырем средним дискретным деформациям от 3,9 до 10,3 % на трех структурных уровнях I, II, III для образца, испытанного в условиях максимальной пластичности. Модель показывает, что развитие иерархической структуры способствует снижению общей энтропии по уровням, в то время как динамика взаимодействия мезодефектов одного уровня меняется в зависимости от условий испытания.

Таблица 1

уровень	ε				ω				γ			
	Средняя деформация в %											
	3,9	6,3	8,4	10,3	3,9	6,3	8,4	10,3	3,9	6,3	8,4	10,3
I	7,957	7,002	6,371	6,021	6,125	7,159	7,67	6,44	6,88	6,41	6,05	6,22
II	6,342	5,025	4,125	3,975	6,75	6,91	6,05	5,81	6,32	6,76	6,05	5,91
III	3,923	4,647	3,710	3,252	6,74	6,72	6,12	7,14	6,99	6,71	6,51	6,85

Рассчитанные значения энтропии хорошо коррелируют с изменением коэффициента синхронизации, что определяется содержанием внутренней энтропийной метрики в КС, как меры упорядоченности структуры. Рассматривая совместно изменения КС и энтропии (негэнтропии), можно полагать, что пластичность материала определяется процессами, в которых увеличение количества информации опережает рост числа элементов синхронизации или длину символьного алфавита $L(n)$.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки РФ (грант Е 02 - 4.0 - 160).

Список литературы

1. Осташев В.В., Шевченко О.Д. Формализация моделей деформируемого поликристаллического материала в терминах мезомеханики. // ЖТФ 2002. т.72. в.4, 41-45.
2. Осташев В.В., Шевченко О.Д. Самоорганизация и устойчивость диссипативных структур в деформируемых поликристаллах. Материалы I Международного семинара «Фракталы и прикладная синергетика», Москва 1999, 96.
3. Яглом А.М., Яглом И.М. Вероятность и информация. М. Наука. 1973.
4. Панин В.Е. Физическая мезомеханика, компьютерное конструирование материалов. Новосибирск. Наука. 1995.
5. Касти Дж. Большие системы, связность, сложность, катастрофы. М. Мир. 1982.