

СИСТЕМНЫЙ ПОДХОД К АНАЛИЗУ ФОРМИРОВАНИЯ И ДЕГРАДАЦИИ СТРУКТУР НАНОМАТЕРИАЛОВ

Витязь П. А., Хейфец М. Л., Колмаков А. Г.*

*Президиум НАН Беларуси, Минск, Беларусь,
mlk-z@mail.ru*

** ИМЕТ им. А.А. Байкова РАН, Москва, Россия*

Ввиду склонности наноструктур к самоорганизации, образованию кластеров и ансамблей подструктур на разных масштабных уровнях, для количественного описания структур наноматериалов традиционные методы описания подходят слабо. Для этого необходимо привлечение системного подхода на основе современных математических методов. Перспективным направлением системного подхода в материаловедении, позволяющим при изучении структур материалов учитывать их свойства, является мультифрактальный анализ.

В связи с тем, что любое описание материала, испытывающего внешние воздействия, является по существу описанием системы, то для полного понимания протекающих при этом в материале процессов необходимо использовать представления о системном характере строения материалов.

Современные представления о структуре материала базируются на рассмотрении его как открытой нелинейной системы. При этом свойства материала в условиях внешних воздействий определяются процессами структурообразования, протекающими при обмене системой энергией, веществом и информацией с окружающей средой. Указанные процессы в большинстве случаев носят необратимый, неравновесный характер и приводят к образованию в системах пространственных и временных структур. При направленном характере взаимодействия между системой и внешней средой имеет место формирование устойчивых регулярных стохастически самоподобных структур на разных масштабных уровнях, в результате возникает упорядоченность на крупномасштабном уровне. Для обозначения этого явления был предложен термин "самоорганизация". Макромасштабный характер упорядочения приводит при описании системы к необходимости выделения ее отдельных частей (подсистем). Структурные изменения и процессы, протекающие в материалах при их обработке и эксплуатации, зависят от большого количества параметров, поэтому более адекватное их описание связано с использованием системного подхода.

Каждая система существует в определенном масштабном интервале. Строгое и однозначное определение границ существования системы в настоящее время еще не разработано. Верхнюю границу можно условно обозначить, как такой масштабный уровень, на котором данная система становится уже подсистемой (элементом) более крупной системы, а нижнюю границу - как такой масштабный уровень, на котором элементы (подсистемы), входящие в систему уже можно рассматривать как собственно системы. Таким образом системы, как объекты исследований, обладают двумя важнейшими качествами: целостность (принципиальная несводимость свойств системы к сумме свойств составляющих ее элементов и невыводимость из последних свойств системы) и иерархичность (каждый компонент системы может рассматриваться как система, а сама исследуемая система, в свою очередь, как один из компонентов более широкой системы).

Развивающаяся в последнее время прикладная синергетика рассматривает материал как открытую систему, свойства которой контролируются диссипативными структурами, формирующимися в ней в процессе обмена энергией, веществом и информацией с окружающей средой. Под диссипативными системами понимаются неравновесные динамические системы, у которых энергия упорядоченного процесса переходит в энергию процесса неупорядоченного и в конечном счете в тепловую энергию. Рассмотрение

диссипативных систем в качестве динамических подразумевает, что такие системы могут математически описываться системой уравнений, допускающих существование на бесконечном интервале времени единственного решения для каждого начального условия, а эволюция их математической модели однозначно определяется начальным состоянием. Подобным системам свойственно нелинейное поведение и неравновесные фазовые переходы. Это связано со спонтанным образованием в таких системах пространственных и временных структур.

Необходимо отметить, что эволюция систем и сопровождающие ее процессы самоорганизации структур могут протекать только в случае направленного обмена системами веществом, энергией и информацией с окружающей средой. В этом случае в неравновесной диссипативной системе возникают устойчивые пространственно неоднородные упорядоченные структуры, обладающие определенной формой, размерами, временем жизни и устойчивые относительно малых возмущений. Представления о таких структурах, названных «диссипативными», были развиты Г.Николисом и П.Пригожиным.

Диссипативные структуры обычно обладают более низкой симметрией, чем симметрия исходного состояния, а также обладают важным свойством - самоподобием. Процессы самоорганизации структур при эволюции диссипативных систем протекают как правило на разных, взаимосвязанных между собой масштабных уровнях, и отличаются стадийностью. Переход от одной стадии эволюции к другой сопровождается перестройкой диссипативных структур. Примерами диссипативных структур могут служить структуры дислокаций, субзерен, зерен, пор, трещин, топография поверхности, кластеры в аморфных материалах и другие. Во всех случаях эти структуры образуются и самоорганизуются при направленных и определенным образом организованных внешних воздействиях на эволюционирующую систему и уже имеющихся в этой системе накопленной энергии и структурной информации.

В случае хаотического характера воздействий на открытую систему она будет стремиться к устойчивому состоянию, которое характеризуется минимумом свободной энергии и наименьшей организованностью. Для характеристики подобных процессов используется термин «деградация» и в целом ряде случаев процессы эволюции и деградации описываются с применением одних и тех же математических моделей.

Диссипативные структуры существуют только в условиях внешнего воздействия на систему, поэтому после его прекращения (например, для механического нагружения - после снятия нагрузки) они в принципе должны исчезнуть. Однако вследствие наличия полей упругих напряжений, ограниченных возможностей диффузии и ряда других причин в твердых телах это не происходит. Диссипативные структуры остаются или сохраняются частично, в своего рода «замороженном» виде или в виде «следов» (например, поверхностей разрушения). Именно такие «замороженные» структуры и «следы» и изучают в рамках традиционных подходов материаловедения.

Ярко выраженным системным подходом обладает концепция физической мезомеханики. Согласно этой концепции, материал, например, при деформировании рассматривается как многоуровневая самоорганизующаяся система, в которой механизмы деформации на микро-, мезо- и макроуровнях органически взаимосвязаны в соответствии с принципом масштабной инвариантности. При этом различные материалы в различных условиях характеризуются различными сочетаниями масштабных структурных уровней и связанных с ними механизмов деформации. В соответствии с концепцией физической мезомеханики, в общем случае, если система материала реагирует на всех трех масштабных уровнях, то это, в конце концов, приводит к разрушению. Если же масштабная инвариантность реализуется только на микро- и мезомасштабных уровнях, то при механическом воздействии пластическая макродеформация протекает однородно по всему материалу как осреднение неоднородной деформации на микро- и мезомасштабных уровнях. Таким образом, с точки зрения физической мезомеханики систе-

ма является устойчивой к внешним воздействиям, в том случае, когда она реагирует на эти воздействия только на микро- и мезоуровне, а макромасштабный уровень исключен.

Особый интерес представляет системный подход к описанию сложных иерархических систем в физической мезомеханике деформируемого твердого тела. Он показывает, что стадийность пластической деформации и разрушения связана с масштабными уровнями в деформируемом твердом теле, как самоорганизующейся иерархической системе. Процесс начинается с возникновения разориентированных дислокационных субструктур, проходит через иерархию мезомасштабов фрагментации материала и завершается разрушением материала, как целого. Описание данного процесса может быть проведено на основе теории неравновесных фазовых переходов, при этом необходимо определить масштабные уровни гомеостаза деформируемого материала на различных стадиях разрушения.

Развитием системного подхода можно считать также информационную физику, которая направлена на единое обоснование математического описания материальных и знаковых систем в естественных науках и основана на использовании обобщенной меры информации - информации преобразования, которая в конкретных частных случаях сводится к известным на настоящий момент количественным мерам информации. При этом классические количественные меры информации выступают в качестве мер нарушения симметрии в исследуемых системах.

Частным случаем информации преобразования является мультифрактальная информация, на основе которой строится информационная интерпретация мультифрактального формализма. Эта интерпретация позволила создать методологию цифровой мультифрактальной параметризации структур реальных материалов. В рамках данной методологии можно наиболее адекватным способом количественно описывать самоподобие диссипативных структур (а также и других структур с неоднородным распределением элементов) и давать оценку конфигурации исследуемой структуры в целом.

ВЛИЯНИЕ ОСОБЕННОСТЕЙ МИКРОСТРУКТУРЫ НА МАГНИТОЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА СЛОИСТЫХ ГЕТЕРОСТРУКТУР НИКЕЛЬ – ЦИРКОНАТ-ТИТАНАТ СВИНЦА

Поддубная Н. Н.¹, Клубович В. В.¹, Кузнецова Т. А.²

¹ *Институт технической акустики НАН Беларуси, г. Витебск, Беларусь,*

² *Институт порошковой металлургии НАН Беларуси, г. Минск, Беларусь.*

E-mail: poddubnaya.n@rambler.ru

С момента обнаружения гигантского магнитоэлектрического (МЭ) эффекта в композиционных структурах [1] число публикаций, посвященных аналогичным исследованиям, значительно возросло. Тем не менее, большинство изученных материалов касаются объемных композиционных структур либо монокристаллических образцов. Изучению слоистых МЭ структур посвящен ряд теоретических работ [2, 3]. Практическое исследование свойств слоистых магнитоэлектрических материалов началось сравнительно недавно и проводилось на модельных образцах, выполненных с использованием полимерной связующей компоненты для феррит-пьезоэлектрических композиционных структур. Первые исследования двухфазных металл – пьезоэлектрических материалов представлены в работах [4, 5]. Нынешняя работа являлась продолжением нача-