

Модель электропластичности в аморфных металлических сплавах

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

¹ Федеральный исследовательский центр информационных и вычислительных технологий, 630090 Новосибирск, Россия

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

Поступило в Редакцию 7 октября 2024 г.

В окончательной редакции 1 июля 2025 г.

Принято к публикации 8 июля 2025 г.

На основе первого и второго начал термодинамики показано, что динамика неравновесного структурного перехода первого рода из низкотемпературного упругого (состояния стекла) в высокотемпературное неупругое состояние (состояние переохлажденной жидкости) при прохождении импульса электрического тока описана обобщенным уравнением Ландау–Халатникова для параметра ближнего порядка. Это уравнение описывает структурное превращение, с одной стороны, стимулированное энергетическим воздействием импульса тока, а с другой стороны, протекающее в поле механического напряжения. Предложенная модель неравновесного перехода была использована для формулировки физической картины (в том числе причины, условия, механизма) эффекта электропластической деформации в аморфных металлических сплавах, находящихся под механической нагрузкой, при пропускании импульса электрического тока, анализа экспериментальных результатов, получения оценок физических параметров, приводящих к этому эффекту.

Ключевые слова: аморфные металлические сплавы, электропластическая деформация, математическая модель, импульс электрического тока, неравновесный структурный переход.

DOI: 10.61011/JTF.2025.10.61356.316-24

Введение

В работах [1–4] проведено экспериментальное исследование влияния импульса электрического тока (ИЭТ) на ход зависимостей $\sigma(\varepsilon)$ (σ — механическое напряжение, ε — деформация) в образцах (размерами $80 \times 3.5 \times 0.02$ мм) из аморфных металлических сплавов (АМС) на основе кобальта. Одновременно с одноосным квазистатическим растяжением образцов вдоль длинной стороны (80 мм) в области упругости (интервал изменения механического напряжения $100 \text{ МПа} < \sigma < 1 \text{ ГПа}$, скорость деформации $\sim 4 \cdot 10^{-5} \text{ с}^{-1}$) пропускали импульсы с плотностью тока j в интервале от $1 \cdot 10^8$ до $5 \cdot 10^9 \text{ А/м}^2$. Использовали импульсы длительностью $\tau_1 \sim 2.5 \text{ мс}$ и скважностью ~ 12 с. После серии импульсов с плотностью j , лежащей в интервале от 10^8 до 10^9 А/м^2 , структура упруго деформированных аморфных сплавов остается рентгеноаморфной.

При растяжении образцов из АМС с одновременным пропусканием ИЭТ с плотностью тока $4 \cdot 10^9 > j \geq 5 \cdot 10^8 \text{ А/м}^2$ на диаграммах $\sigma(\varepsilon)$ наблюдался кратковременный (меньше 1 с) сброс механического напряжения, с последующим полным восстановлением хода зависимости $\sigma(\varepsilon)$. Например, при первоначальном механическом напряжении $\sigma \sim 900 \text{ МПа}$, упругой деформации $\varepsilon \sim 0.9\%$ импульс тока с плотностью $j \sim 4 \cdot 10^9 \text{ А/м}^2$, длительностью $\tau_1 \sim 2.5 \text{ мс}$ вызывает кратковременное увеличение комнатной температуры образца на 65 К и наблюдается скачкообразный сброс

механического напряжения $\Delta\sigma \sim 400 \text{ МПа}$, т.е. электропластическая деформация (ЭПД) [1]. Сброс механического напряжения, вызванный прохождением импульса, почти в 1.5 раза больше, чем сброс напряжения при медленном нагреве в печи от комнатной температуры на 65 К, происходящий за счет термического расширения и обычных термоактивируемых процессов, соответствующих такому нагреву. Из-за низкой энергии активации наиболее вероятными термоактивируемыми процессами, протекающими при медленном нагреве в печи на 65 К, являются гомоструктурные термофлуктуации ближнего атомного порядка (БП), однако их концентрация невелика [1–4]. Следовательно, сброс напряжения в образце обусловлен не только термическим расширением и обычными термоактивируемыми процессами, но и иным коллективным механизмом, связанным со структурным превращением и неупругими атомными перестройками (гетероструктурными термофлуктуациями БП), стимулированными ИЭТ [1–4]. С помощью синхротронного источника (*in situ*) экспериментально установлено [5], что в процессе нелинейной упругой деформации одноосное растяжение приводит к изменению БП АМС, которое выражается в малом анизотропном изменении расстояний (на доли процента) между атомами первой координационной сферы.

Деформация АМС в области нелинейной упругости, а тем более в области пластичности, сопровождается выделением, распространением и поглощением тепла [6–8]. В феноменологических теориях динамического по-

ведения сплошных сред существует несколько способов учета диссипативных эффектов, которые сопровождают деформацию. Первый способ — ввести вязкое напряжение, зависящее от скорости деформации [9]. Во втором подходе постулируется существование внутренних динамических переменных состояния (параметров порядка) [10–13], которые влияют на свободную энергию системы. Изменение со временем внутренней переменной состояния описывается дифференциальным уравнением эволюции, в котором появляется механическое напряжение. Описание неупругой деформации в АМС также возможно с помощью теории неравновесных структурных переходов (НСП) в самоорганизующихся системах (синергетики) [14,15].

В работе [16] было построено феноменологическое описание аморфной пластичности, основанное на физических принципах неравновесной термодинамики и молекулярных моделях. Принимая во внимание связь процессов макроскопической деформации с изменением структуры на субнаноструктурном и наноструктурном уровне, в работе [17] сформулирована микроскопическая модель процесса неупругой деформации (псевдоупругой, упругой запаздывающей [13]) в АМС, стимулированного внешним механическим воздействием. В работах [18–20] предложены физические механизмы и математические модели воздействия теплового импульса на НСП первого рода кристаллизации, нанокристаллизации и плавления. Аналитически полученные результаты для НСП первого рода были верифицированы с помощью вычислительного моделирования методом молекулярной динамики [21]. Результаты [18–21] качественно и количественно описывают закономерности НСП в АМС, стимулированных термообработкой.

Классическая концепция о воздействии ИЭТ на ЭПД в металлах содержит три предположения [22]. Во-первых, возможна прямая передача импульсов силы и энергии электронов проводимости дислокациям (электронный ветер). Во-вторых, импульс оказывает электродинамическое воздействие (так называемый пинч и скин-эффект). В-третьих, при прохождении ИЭТ выделяется джоулево тепло, происходит температурное расширение образца.

Поскольку в АМС дислокации отсутствуют, то электронный ветер не может приводить к эффекту ЭПД. Уровень возникающих дополнительных механических напряжений за счет пинча и скин-эффекта значительно ниже предела упругости, и они не могут вызывать эффект ЭПД. Объяснить эффект ЭПД в АМС только температурным расширением образца, происходящим при выделении джоулева тепла, также не удастся. Таким образом, необходимо расширить классическую концепцию о воздействии ИЭТ на ЭПД в АМС.

В отличие от кристаллов аморфная среда обладает особым (не кристаллическим) БП, избыточным свободным объемом (ИСО) и является неоднородной на субнаноструктурном и наноструктурном уровнях [1–8]. Существует много кластеров БП и нанокластеров, обладающих значительным ИСО. Эти кластеры, БП и

нанокластеры, способны испытывать неупругие атомные перестройки (гетероструктурные термофлуктуации БП и среднего порядка) при накачке энергии извне и наложении механической нагрузки [17].

Актуальным является развитие модели [17] для описания эффекта ЭПД при прохождении ИЭТ, поскольку пропускание теплового импульса одновременно с приложением механического напряжения производит уже синергетическое термомеханическое воздействие. В настоящей работе сформулирована физическая картина (в том числе причина, условие, механизм) эффекта ЭПД в АМС при прохождении ИЭТ на основе представлений о НСП в самоорганизующихся системах [10–21], сделаны оценки физических параметров, приводящих к этому эффекту.

1. Модель эффекта ЭПД при прохождении ИЭТ

Если механическое напряжение превышает предел упругости, то на цикле нагрузка–разгрузка кривой $\sigma(\varepsilon)$ возникает петля гистерезиса, следовательно, выделяется тепло и меняется температура образца [6,7]. Поэтому, с одной стороны, при описании процессов неупругой деформации, протекающих с изменением температуры, необходимо использовать термодинамику [23]. Кроме этого, процесс неупругой деформации сопровождается диссипацией энергии, следовательно, становится неравновесным. Поэтому, с другой стороны, при изложении термодинамики [23] следует сохранить общие принципы механики, но дополнительно использовать второй закон неравновесной термодинамики, который для сплошных сред принимает форму неравенства Клаузиуса–Дюгема для скорости производства энтропии [14–16].

Поскольку одноосное квазистатическое растяжение и пропускание тока проводятся вдоль длинной стороны (80 mm) образца, то для простоты его термодинамического анализа используем модель деформируемого стержня из АМС. Первый закон термодинамики такой системы имеет вид [10,11,16]:

$$\dot{U} = -\sigma\dot{\varepsilon} + \dot{Q}, \quad (1)$$

где \dot{U} — скорость изменения удельной внутренней энергии, $-\sigma\dot{\varepsilon}$ — удельная работа, совершаемая над системой в единицу времени, σ — внутреннее напряжение, ε — полная деформация, \dot{Q} — скорость выделения удельной тепловой энергии Джоуля при прохождении ИЭТ. В случае растяжения образца σ — отрицательная величина, а скорость деформации $\dot{\varepsilon}$ — положительная величина, поэтому внутренняя энергия системы увеличивается. Затем постулируем, что энтропия удовлетворяет закону сохранения [10,11,16]:

$$\dot{S} - (\dot{Q}/T) = \Sigma. \quad (2)$$

Здесь \dot{Q}/T — скорость, с которой энтропия увеличивается при выделении тепловой энергии Джоуля, T —

абсолютная температура в энергетических единицах, Σ — скорость производства энтропии внутри системы, например вследствие протекания неравновесного процесса. Второй закон термодинамики гласит, что неотрицательна [14–16]:

$$\Sigma \geq 0. \quad (3)$$

Подставляя \dot{Q} из (1) в (2), получим неравенство

$$T\dot{S} - \dot{U} - \sigma\dot{\varepsilon} = T\Sigma \geq 0, \quad (4)$$

которое удобно переписать, используя свободную энергию $F(T, \varepsilon)$ и разделив полную деформацию на упругую и неупругую компоненты [13,16,17]:

$$F(T, \varepsilon_{el}, \eta) = U(S, \varepsilon_{el}, \eta) - TS, \quad (5)$$

$$\varepsilon = \varepsilon_{el} + \varepsilon_{in} = \varepsilon_{el} + \xi\eta, \quad \varepsilon_{in} = \xi\eta, \quad (6)$$

где ε_{el} — упругая деформация, ε_{in} — неупругая деформация [13,16,17], связанная с внутренней динамической переменной состояния системы η — безразмерным параметром порядка, параметром превращения (доля атомов, испытавших превращение), ξ — коэффициент пропорциональности, равный неупругой деформации насыщения (поскольку число кластеров БП, обладающих ИСО, конечно). Представление полной деформации в виде суммы неупругой и упругой компоненты (6) имеет физическую причину: медленные конфигурационные степени свободы аморфной системы слабо связаны с быстрыми колебательными степенями свободы и, следовательно, эти степени свободы могут быть разделены и описаны разными параметрами.

Затем, выполнив дифференцирование по времени $F(T, \varepsilon_{el}, \eta)$, получим

$$\dot{F}(F, \varepsilon_{el}, \eta) = (\partial F/\partial T)\dot{T} + (\partial F/\partial \varepsilon_{el})\dot{\varepsilon}_{el} + (\partial F/\partial \varepsilon_{in})\dot{\varepsilon}_{in}. \quad (7)$$

Подставляя в (5) соотношение (4) и используя (7), получим

$$[(\partial F/\partial T) + S]\dot{T} + [(\partial F/\partial \varepsilon_{el}) + \sigma]\dot{\varepsilon}_{el} + [(\partial F/\partial \eta) + \xi\sigma]\dot{\eta} = -T\Sigma \leq 0. \quad (8)$$

Поскольку производные по времени от независимых переменных не связаны друг с другом, выражение (8) состоит из трех отдельных независимых неравенств [10,11,16]. Удовлетворив первому неравенству, получим $S = -(\partial F/\partial T)$, которое совпадает с традиционным термодинамическим соотношением в состоянии равновесия. Второе неравенство можно удовлетворить аналогично, полагая $\sigma = -(\partial F/\partial \varepsilon_{el})$, которое является равновесным соотношением между σ и ε_{el} . Мы описываем неупругую деформацию как НСП, поэтому можно удовлетворить неравенству (8) написав диссипативное неравенство для параметра порядка

$$-[(\partial F/\partial \eta) + \xi\sigma]\dot{\eta} \geq 0. \quad (9)$$

Соотношение (9) есть конкретная реализация условия (3) для НСП. Неравенство (9) удовлетворяется, если выполняется соотношение, которое представляет собой обобщенное уравнение Ландау–Халатникова [10,11,14,16,17]:

$$\begin{aligned} \dot{\eta} &= -\frac{1}{\tau_{\eta}E_Q^*} \left[\frac{\partial F}{\partial \eta} + \xi\sigma \right] = -\Gamma \left\{ \frac{1}{E_Q^*} \left[\frac{\partial F}{\partial \eta} + \xi\sigma \right] \right\} \\ &= -\frac{1}{\tau_{\eta}} \left(\frac{\partial \tilde{F}}{\partial \eta} \right), \quad \tilde{F} = \frac{[F(\eta) + \xi\sigma\eta]}{E_Q^*}, \end{aligned} \quad (10)$$

где $\tau_{\eta} = \tau_{\eta}(T)$ — время релаксации НСП, E_Q^* — характерная удельная энергия, $\Gamma = \frac{1}{\tau_{\eta}(T)}$ — обратное время релаксации.

Рассмотрим возможные ограничения, которые вытекают из первого и второго законов термодинамики. Соотношение для скорости изменения внутренней энергии при тепловыделении имеет вид

$$C_V \dot{T} = \dot{Q} + W = \dot{Q} - \left\{ \frac{\partial F}{\partial \eta} + \xi\sigma \right\} \dot{\eta},$$

$$W = -\left\{ \frac{\partial F}{\partial \eta} + \xi\sigma \right\} \dot{\eta} = \Gamma \left\{ \frac{1}{E_Q^*} \left[\frac{\partial F}{\partial \eta} + \xi\sigma \right]^2 \right\}, \quad (11)$$

где C_V — удельная теплоемкость при постоянном объеме, T — абсолютная температура в Кельвинах. По определению скорость диссипации энергии W (11) представляет собой сумму скорости изменения свободной энергии $-\frac{\partial F}{\partial \eta}\dot{\eta}$ при неравновесном процессе и скорости совершения работы неупругой деформации $-\xi\sigma\dot{\eta} = -\sigma\dot{\varepsilon}_{in} > 0$ (поскольку при растяжении образца $\sigma < 0$). Второй закон термодинамики (неравенство Клаузиуса–Дюгема) имеет вид

$$W = -\frac{\partial F}{\partial \eta}\dot{\eta} - \xi\sigma\dot{\eta} \geq 0, \quad (12)$$

т.е. скорость диссипации энергии должна быть не отрицательна. Поэтому протекающий в системе неравновесный процесс сопровождается дополнительным выделением тепла и увеличением температуры.

Для простоты анализа рассмотрим случай $\sigma \rightarrow 0$, тогда $0 \leq \eta \leq 1$. Пусть $F(\eta)$ — монотонно возрастающая функция, обладающая только одним минимумом в точке $\eta_1 = 0$. Из неравенства Клаузиуса–Дюгема $W > 0$ (12) следует, что неравновесный процесс может идти только с $\dot{\eta} < 0$, т.е. неравновесное значение переменной уменьшается со временем и стремится к стационарному равновесному значению $\eta_1 = 0$. Таким образом, в этом случае единственно возможным неравновесным процессом является процесс релаксации переменной η от начального неравновесного значения $\eta(0) > 0$ к равновесному значению $\eta_1 = 0$. Очевидно, что в процессе релаксации свободная энергия системы $F(\eta)$ уменьшается при уменьшении η , поэтому скорость диссипации энергии $W > 0$. Пусть $F(\eta)$ непрерывная нелинейная функция, обладающая минимумом при $\eta_1 = 0$, одним

максимумом при $\eta = \eta_2 < 1$ и еще одним минимумом при $\eta_3 = 1$. На отрезке $0 \leq \eta < \eta_2$ функция $F(\eta)$ является возрастающей, а на отрезке $\eta_2 < \eta \leq 1$ функция является убывающей. Из неравенства Клаузиуса–Дюгема $W > 0$ (12) следует, что на отрезке $0 \leq \eta < \eta_2$ неравновесный процесс может идти только с $\dot{\eta} < 0$, т.е. может происходить только процесс релаксации. Если в результате сильного внешнего воздействия значение переменной η оказалось на отрезке $\eta_2 < \eta < 1$, то неравновесный процесс может идти только с $\dot{\eta} > 0$, т.е. значение переменной η увеличивается со временем и стремится к стационарному значению $\eta_3 = 1$. Таким образом, в этом случае единственно возможным неравновесным процессом является процесс НСП переменной η от начального значения $\eta(0)$ к стационарному значению $\eta_3 = 1$. Очевидно, что в процессе НСП, стимулированного внешним воздействием, свободная энергия системы $F(\eta)$ уменьшается при увеличении η , поэтому скорость диссипации энергии $W > 0$.

Согласно физической кинетике [24], в системе, даже находящейся в состоянии термодинамического равновесия при комнатной температуре, происходят гомоструктурные флуктуации (например, флуктуации плотности). Когда система, находящаяся в стеклообразном состоянии, сильно перегрета выше комнатной температуры за счет выделения джоулева тепла ИЭТ в ней возникают гетероструктурные флуктуации [24]. Рост новой структуры в состоянии переохлажденной жидкости из старой структуры в стеклообразном состоянии возможен только при отклонении от условий термодинамического равновесия, т.е. структура в стеклообразном состоянии должна находиться в неравновесном, метастабильном состоянии, быть перегрета выше температуры стеклования за счет выделения джоулева тепла ИЭТ. Возникновение новой структуры в старой метастабильной структуре осуществляется путем возникновения зародыша. Причем зародыш с размером меньше критического является неустойчивым, рассасывается, а зародыш с размером больше критического является стабильным, растет. Согласно принципам статистической физики [12,24], зародыши новой структуры могут возникать и достигать критического значения в области их неустойчивости с помощью гетероструктурных термофлуктуаций, которые переводят систему в состояние с большей свободной энергией.

Минимальная работа, требуемая для вывода системы из состояния равновесия, равна изменению ее свободной энергии ΔF . Поэтому распределение вероятностей гетероструктурной флуктуации параметра порядка равно [12,24]:

$$d\omega \sim \exp(-\Delta F/kT).$$

Например, при малом отклонении от равновесия

$$\Delta F = \frac{1}{2}(\eta - \eta_1)^2 \frac{\partial^2 F}{\partial \eta^2}. \quad (13)$$

Тогда вероятность флуктуации при температуре, близкой к температуре стеклования T_c , примет вид

$$\omega = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sqrt{\left(\frac{\partial^2 F}{\partial \eta^2}/kT_c\right)} \exp\left[\frac{1}{2}(\eta - \eta_1)^2 \frac{\partial^2 F}{\partial \eta^2}/kT_c\right]. \quad (14)$$

Средний квадрат флуктуации параметра порядка равен

$$\begin{aligned} \langle (\Delta\eta)^2 \rangle &= \int d\eta (\eta - \eta_1)^2 \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sqrt{\left(\frac{\partial^2 F}{\partial \eta^2}/kT_c\right)} \\ &\times \exp\left[-\frac{1}{2}(\eta - \eta_1)^2 \frac{\partial^2 F}{\partial \eta^2}/kT_c\right] = kT_c \left[\frac{\partial^2 F}{\partial \eta^2}\right]^{-1}. \end{aligned} \quad (15)$$

При температуре абсолютной неустойчивости низкотемпературной структуры T_2 , где

$$\left(\frac{\partial F}{\partial \eta}\right)_{\eta=0} = \eta^2(\eta - 1), \quad \left(\frac{\partial^2 F}{\partial \eta^2}\right)_{\eta=0} = 2\eta(\eta - 1) + \eta^2 = 0$$

средний квадрат флуктуации параметра порядка расходится.

Следующим этапом анализа является формулировка вида $F(\eta)$ для НСП. Экспериментально установлено, что после прекращения действия импульса неупругое состояние становится неустойчивым и система релаксирует в упругое состояние [1–4]. Известно, что неравновесный процесс релаксации переменной η к равновесному значению η_1 в ненулевом поле σ описывается уравнением релаксации [12,16,17]:

$$\dot{\eta} = -\frac{1}{\tau_\eta(T)} [\eta - \eta_1] = -\frac{1}{\tau_\eta(T)} \left[\eta + \frac{\xi\sigma}{E_Q^*}\right]. \quad (16)$$

Из (10), (16) следует, что скорость рождения кластеров с ориентированным по полю БП пропорциональна разности вероятности флуктуаций по полю и против поля и, следовательно, при малом поле $\frac{\xi\sigma V_\eta}{k_B T} \ll 1$ пропорциональна фактору Больцмана и σ :

$$\begin{aligned} \frac{1}{\tau_\eta(T)} \eta_1 &= \frac{1}{\tau_\eta} \left[\exp\left\{\frac{-(E_\eta + \xi\sigma V_\eta)}{k_B T}\right\} \right. \\ &\quad \left. - \exp\left\{\frac{-(E_\eta - \xi\sigma V_\eta)}{k_B T}\right\} \right] \\ &= -\frac{2\xi\sigma V_\eta}{k_B T} \frac{1}{\tau_\eta} \exp\left\{\frac{-(E_\eta + \xi\sigma V_\eta)}{k_B T}\right\}, \end{aligned} \quad (17)$$

где $E_\eta + \xi\sigma V_\eta$ — энергия активации гетероструктурной флуктуации в кластере БП собраванием неупругой перестройки атомов по полю, k_B — постоянная Больцмана, V_η — активационный объем флуктуации, в котором протекает кооперативный акт перестройки группы атомов, образующих БП, под совместным действием тепла и механического напряжения. Экспериментальные результаты [1–4] получены в интервале изменения напряжения $100 \text{ МПа} < \sigma < 1 \text{ ГПа}$, т.е. в области упругого поведения образца при отсутствии пропуска импульса

тока. Проведем оценку отношения $\frac{-\xi\sigma V_\eta}{k_B T}$ для характерных параметров $\xi = 0.3$; температура стеклования 700 K ; $k_B T = 0.06\text{ eV}$, $V_\eta = (0.2 \cdot 10^{-9}\text{ m})^3 = 8 \cdot 10^{-30}\text{ m}^3$; получим для $\sigma = 100\text{ МПа}$, $-\xi\sigma V_\eta = 1.5 \cdot 10^{-3}\text{ eV}$, $\frac{-\xi\sigma V_\eta}{k_B T} = 0.025 \ll 1$; для $\sigma = 900\text{ МПа}$, $-\xi\sigma V_\eta = 1.35 \cdot 10^{-2}\text{ eV}$, $\frac{-\xi\sigma V_\eta}{k_B T} = 0.225 \ll 1$. Поэтому условием протекания НСП и возникновения неупругой деформации является достижение критического значения энергии Джоуля импульса тока, а механическое напряжение играет роль слабого ориентирующего поля.

Скорость рождения кластеров ориентированного БП $\frac{1}{\tau_\eta(T)}\eta_1$ содержит энергию активации и подчиняется закону Аррениуса. Поэтому отношение

$$\frac{1}{\tau_\eta(T)} = \frac{1}{\tau_\eta \exp\left\{\frac{E_\eta + \xi\sigma V_\eta}{k_B T}\right\}} = \omega_0 \exp\left\{\frac{-(E_\eta + \xi\sigma V_\eta)}{k_B T}\right\}$$

можно интерпретировать как частоту попыток (флуктуаций), поэтому (11) для процесса релаксации можно записать

$$W = -\left[\frac{\partial F}{\partial \eta} + \xi\sigma\right] \dot{\eta} = \frac{E_Q^*}{\tau_\eta} \left[\eta + \frac{\xi\sigma}{E_Q^*}\right]^2 > 0, \quad \left(\eta + \frac{\xi\sigma}{E_Q^*}\right) > 0. \quad (18)$$

Сформулируем физическую картину ЭПД исходя из экспериментального факта [6], что кристаллический образец обладает существенно меньшим сопротивлением (соответственно меньшим выделением тепла Джоуля), чем такой же образец в аморфном состоянии. Причина этого — неоднородность аморфной среды на субнано- и наноструктурном уровнях. Поэтому в результате неупругого рассеяния электронов проводимости на неоднородностях структуры мгновенное выделение энергии Джоуля будет также неоднородно. Следовательно, существуют области субнано- и наноразмеров, где выделяется энергия больше среднего значения, и области, где выделяется энергия меньше среднего значения. Поэтому в кластере БП и в нанокластере, обладающем ИСО, где мгновенно выделяется энергия больше средней, часть выделившейся энергии Джоуля может превращаться в потенциальную энергию кластера БП или нанокластера, т.е. часть выделившейся энергии Джоуля накапливается в атомной подсистеме (в кластерах БП и в нанокластерах, обладающих ИСО), а при критическом значении энергии Джоуля происходит НСП первого рода из стеклообразного состояния в состояние переохлажденной жидкости и поглощается скрытая энергия превращения. При этом происходит изменение структурного состояния АМС и возникает неупругая деформация. Состояние переохлажденной жидкости (аморфное состояние) является метастабильным состоянием [24], условно устойчивым состоянием, которому соответствует локальный минимум свободной энергии, и оно отделено от глобально устойчивого кристаллического состояния энергетическим барьером.

Дальнейшее рассмотрение основано на кинетической теории НСП [12,16,17,24]. Для описания НСП первого

рода в системе кластеров БП с ИСО из низкотемпературного состояния стекла в высокотемпературное состояние переохлажденной жидкости при прохождении ИЭТ используем безразмерную величину, характеризующую структурное состояние системы, — параметр БП — η [17]. Поскольку НСП происходит в поле механического напряжения, то существует прямая связь между параметром порядка и неупругой деформацией, НСП сопровождается неупругой деформацией. Элементарный объем кластера БП испытывает неупругое перестроение с увеличением высоты в направлении одноосной деформации и с уменьшением ширины и длины в перпендикулярных направлениях. Поэтому в поле механического напряжения можно также говорить о НСП из низкотемпературного упругого механического состояния в высокотемпературное неупругое механическое состояние. Физически параметр порядка η представляет отношение (долю) числа кластеров БП, обладающих ИСО, испытавших разупорядочение и неупругую деформацию, к числу всех кластеров БП, обладающих ИСО. При $\sigma \rightarrow 0$ в низкотемпературном упругом состоянии параметр порядка η стремится к нулю, а в высокотемпературном неупругом состоянии параметр порядка η стремится к единице. Мы предполагаем, что по параметру η низкотемпературное упругое состояние является локально устойчивым, т.е. оно отделено от локально устойчивого высокотемпературного неупругого состояния энергетическим барьером. Низкотемпературная упруго деформированная структура имеет температуру абсолютной неустойчивости T_2 , а высокотемпературная неупруго деформированная структура имеет температуру абсолютной неустойчивости T_1 , между ними находится температура безразличного равновесия структур T_c , т.е. $T_2 > T_c > T_1$.

При прохождении импульса тока НСП в подсистеме кластеров БП, обладающих ИСО, из низкотемпературного упругого в высокотемпературное неупругое состояние описывается обобщенным уравнением Ландау–Халатникова [12,16,17] для параметра порядка η :

$$\begin{aligned} \frac{d\eta}{dt} &= -\frac{1}{\tau_\eta R_Q^*} [(\partial F / \partial \eta) + \xi\sigma] \\ &= -\frac{1}{\tau_\eta} \left[\eta(\eta - \eta_2)(\eta - 1) + \frac{\xi\sigma}{E_Q^*} \right], \\ \eta_2 &= \frac{1}{2} \left[1 - \frac{T_0 - T_c + E_J C_V^{-1}}{(T_c - T_1)} \right], \end{aligned} \quad (19)$$

$$\tau_\eta = \tau_0 \exp\left\{\frac{(E_\eta + \sigma \xi V_\eta)}{k_B T}\right\}, \quad (20)$$

где τ_η — время релаксации НСП, которое связано с частотой термofлуктуаций атомов первой координационной сферы из первоначального БП (упругого деформированного) в новый ориентированный БП, испытавший неупругую деформацию, $(1/\tau_0) = \omega_0 \approx 10^{13}\text{ Hz}$; E_J — удельная энергия Джоуля, выделившаяся при

прохождении импульса тока в подсистеме кластеров БП с ИСО; E_J пропорционально квадрату средней силы тока J^2 , среднему сопротивлению проводника R и времени пропускания ИЭТ τ_1 , т.е. $E_J \sim J^2 \cdot R \cdot \tau_1$.

Проведем оценки критической энергии Джоуля E_J^* и температуры абсолютной неустойчивости T_2 низкотемпературного состояния подсистемы кластеров с БП, обладающих ИСО, относительно НСП. Предположим, что доля кластеров БП, содержащих ИСО, составляет 0.15. Пусть мгновенное выделение тепла Джоуля происходит в основном только в этой подсистеме кластеров БП с ИСО. Поскольку экспериментально обнаружено, что критический средний нагрев образца от комнатной температуры составляет 65 К, то мгновенное увеличение температуры системы кластеров БП с ИСО, равное $E_J^* C_V^{-1}$, составит $E_J^* C_V^{-1} = 65/0.15 = 433$ К. Следовательно, мгновенная температура системы кластеров с ИСО составит $T_* = 300 + 433 = 733$ К и она превышает температуру стеклования АМС. Таким образом, подсистема кластеров БП с ИСО может испытывать структурный переход из низкотемпературного состояния стекла в высокотемпературное состояние переохлажденной жидкости путем выпадения конденсата кластеров с ориентированным БП.

Рассмотрим поведение стационарных состояний (корней уравнения) системы, динамика которой описывается уравнением (19). Нелинейная функция в правой части уравнения (19) при $\sigma \rightarrow 0$ и $(T_c - T_1) = (T_2 - T_c)$ имеет три корня

$$\eta_1 \rightarrow 0, \quad \eta_2 \rightarrow \frac{1}{2} \left[1 - \frac{T_0 - T_c + E_J C_V^{-1}}{(T_c - T_1)} \right], \quad \eta_3 \rightarrow 1,$$

где T_0 — начальная температура образца. При $T_0 = T_1$ и отсутствии импульса энергия $E_J = 0$ и $\eta_2 \rightarrow 1$, поэтому устойчивым является низкотемпературное упругое состояние $\eta_1 \rightarrow 0$, а высокотемпературное неупругое состояние $\eta_3 \rightarrow 1$ является абсолютно неустойчивым. Энергетическое воздействие импульса тока E_J приводит к смещению корня

$$\eta_2 \rightarrow \frac{1}{2} \left[1 - \frac{T_0 - T_c + E_J C_V^{-1}}{(T_c - T_1)} \right]$$

в сторону корня $\eta_1 \rightarrow 0$. При малой энергии импульса тока величина

$$-\frac{T_0 - T_c + E_J C_V^{-1}}{(T_c - T_1)} \leq 1,$$

глобально устойчивым является низкотемпературное упругое состояние среды, а высокотемпературное неупругое состояние среды является локально устойчивым. При большой энергии импульса E_J^c величина $\eta_2 \simeq \frac{1}{2}$, а низкотемпературное упругое и высокотемпературное неупругое состояние среды локально устойчивы, находятся в точке безразличного равновесия

$$\frac{T_0 - T_c + E_J^c C_V^{-1}}{(T_c - T_1)} = 0, \quad E_J^c C_V^{-1} = T_c - T_0.$$

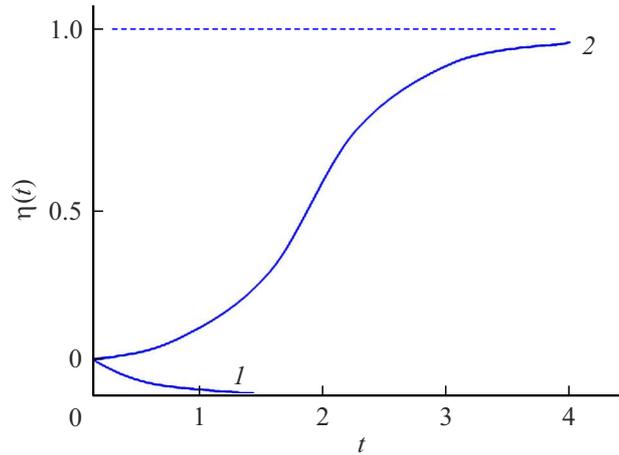


Рис. 1. Зависимость параметра порядка от времени (в единицах времени релаксации) для начальной флуктуации параметра порядка $\eta(0) = 0.1$ и различных энергий импульса тока: 1 — $E_J \cdot C_V^{-1} = T_1 - T_0$, 2 — $E_J \cdot C_V^{-1} = T_2 - T_0$.

При критическом значении энергии E_J^* и достижении температуры абсолютной неустойчивости низкотемпературного упругого состояния $E_J^* C_V^{-1} = T_2 - T_0$, $\eta_2 = 0$ низкотемпературное упругое состояние среды становится абсолютно неустойчивым, а высокотемпературное неупругое состояние среды является глобально устойчивым. Если энергия E_J , выделившаяся при прохождении ИЭТ, достигает значения E_J^* , а время воздействия импульса тока превышает время релаксации НСП τ_η , энергетический барьер, разделяющий упругое и неупругое состояние исчезает, а среда полностью переходит в неупругое состояние. Численные решения уравнения (19) для начальной флуктуации параметра порядка $\eta(0) = 0.1$ и различных энергий импульса тока $E_J \cdot C_V^{-1} = T_1 - T_0$, и $E_J \cdot C_V^{-1} = T_2 - T_0$ представлены на рис. 1.

При приложении одноосной нагрузки к стержню из АМС практически мгновенно возникает упругая деформация $\varepsilon_1(t)$, которая связана с внешним напряжением $f(t)$ законом Гука [23]:

$$\varepsilon_1(t) = (1/\mu)f(t), \quad \frac{d\varepsilon_1(t)}{dt} = (1/\mu) \frac{df(t)}{dt}. \quad (21)$$

Во время действия импульса тока в образце протекает НСП, описываемый параметром порядка $\eta(t)$, возникает неупругая деформация $\varepsilon_2(t)$ [13,16,17]:

$$\varepsilon_2(t) = \xi \eta(t), \quad \frac{d\varepsilon_2(t)}{dt} = \xi \frac{d\eta(t)}{dt}. \quad (22)$$

Полная деформация образца ε может быть представлена в виде суммы упругой и неупругой деформации [16,17]:

$$\varepsilon = \varepsilon_1 + \varepsilon_2, \quad \frac{d\varepsilon(t)}{dt} = \frac{1}{\mu} \frac{df(t)}{dt} + \xi \frac{d\eta(t)}{dt}. \quad (23)$$

В режиме фиксированной полной деформации ($\varepsilon = \text{const}$, $\dot{\varepsilon} = 0$) уравнение (23) редуцируется в

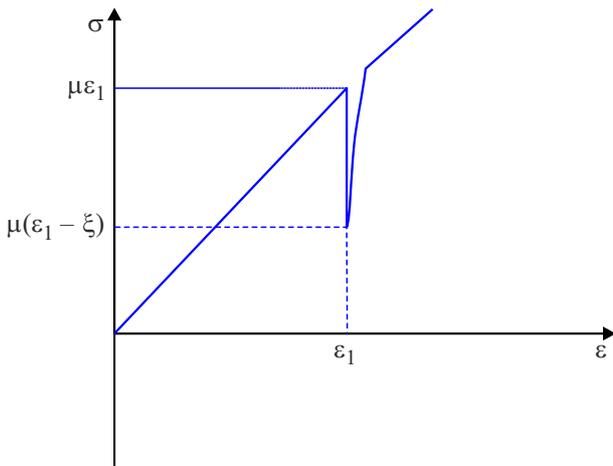


Рис. 2. Зависимость напряжение–деформация при прохождении импульса тока.

уравнение

$$\frac{1}{\mu} \frac{df}{dt} = -\xi \frac{d\eta(t)}{dt}, \quad f = f(\eta), \quad f(0) = \mu\varepsilon_1, \quad \frac{df}{d\eta} = -\xi\mu,$$

$$f(\eta) = f(0) - \xi\mu\eta = \mu(\varepsilon_1 - \xi\eta), \quad (24)$$

$$f(1) = \mu(\varepsilon_1 - \xi). \quad (25)$$

Из (24), (25) видно, что при отсутствии импульса тока и структурного превращения ($\eta = 0$) механическое напряжение увеличивается пропорционально деформации в области $0 < \varepsilon < \varepsilon_1$ (рис. 2). При прохождении импульса тока в точке ε_1 протекает НСП ($\eta = 1$), возникает неупругая деформация $\varepsilon_2(\eta = 1) = \xi$. Поскольку полная деформация фиксирована, возникновение неупругой деформации приводит к уменьшению упругой деформации, вследствие чего происходит сброс механического напряжения на величину $-\xi\mu$ (рис. 2).

После прекращения действия импульса высокотемпературное неупругое состояние становится неустойчивым и релаксирует в устойчивое низкотемпературное упругое состояние согласно уравнению релаксации [11,16,17]:

$$\frac{d\eta}{dt} = -\alpha\eta, \quad \frac{d\eta}{\eta} = -\alpha dt, \quad \eta(t) = \exp(-\alpha t),$$

$$\sigma(\eta(t)) = \mu[\varepsilon_1 - \xi \exp(-\alpha t)], \quad (26)$$

где α — обратное время структурной релаксации напряжений. Неупругая деформация $\xi\eta(t)$ экспоненциально релаксирует к нулю, а напряжение растет, релаксирует к значению (рис. 2).

2. Выводы, обсуждение результатов, оценки и заключение

Из первого и второго начал термодинамики показано, что динамика НСП первого рода из низкотемпературного упругого (состояния стекла) в высокотемпературное

неупругое состояние (состояние переохлажденной жидкости) при прохождении ИЭТ описывается обобщенным уравнением Ландау–Халатникова для параметра БП η . Это уравнение описывает НСП, с одной стороны, стимулированное энергетическим воздействием импульса тока E_J , а с другой стороны, протекающее в поле механического напряжения σ . Поскольку величина ξ и отношение $(\xi\sigma/E_Q^*)$ много меньше единицы, роль слабого механического напряжения σ заключается только в установлении определенной ориентации нового БП.

Предложенная модель НСП была использована для формулировки физической картины ЭПД в АМС, находящихся под механической нагрузкой, при пропускании импульса ИЭТ, анализа экспериментальных результатов [1–4], получения оценок физических параметров эффекта.

Физической причиной ЭПД в АМС являются неоднородность аморфной среды на субнаноструктурном и наноструктурном уровне, а также импульсный характер источника энергии, которые позволяют части энергии ИЭТ накапливаться в виде дополнительной потенциальной энергии атомных кластеров БП и нанокластеров, обладающих ИСО, и при этом происходит изменение структурного состояния среды. Поэтому из-за пространственной неоднородности АМС энергия импульса выделяется неоднородно по объему среды. А из-за импульсного характера источника энергии во время действия ИЭТ температура не успевает выровняться по объему образца, возникает поле градиента температуры. Действительно, энергия импульса выделяется за время $\tau_1 = 2.5 \text{ ms}$, а время температурной релаксации по толщине аморфного образца (с размерами $80 \times 3.5 \times 0.02 \text{ mm}$) l составляет $\tau_T = (l^2/a) \approx 1 \text{ s}$, $l \approx 10^{-3} \text{ m}$, $a \approx 10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}$, поэтому выполняется соотношение $\tau_T \gg \tau_1$.

Следовательно, во время воздействия импульса распределение энергии по объему аморфного образца становится еще более неоднородным и неравновесным, чем было до воздействия импульса. Поэтому области образца (кластеры атомов, обладающие ИСО, повышенной потенциальной энергией), в которых выделилось повышенное количество энергии Джоуля, испытывают неравновесное структурное превращение, неупругую деформацию, т.е. НСП, вынужденное неоднородным и неравновесным распределением энергии в АМС при прохождении ИЭТ, происходит только в части образца, обогащенной энергией, и захватывает только часть всех атомов. Физическим механизмом НСП является конденсация гетероструктурных термофлуктуаций БП атомов, стимулированная совместным действием тепла и механического напряжения. При малой энергии импульса концентрация кластеров, испытавших переход в состояние с ориентированным БП, мала. При увеличении энергии импульса концентрация кластеров с ориентированным БП увеличивается (а расстояние между кластерами уменьшается) и при критическом значении энергии импульса концентрация кластеров с ориентированным БП становится такой, что возникает корреляция

флуктуаций параметра порядка, т.е. достигается радиус корреляции флуктуаций, при котором вероятность одновременного возникновения пары флуктуаций больше, чем произведение вероятностей возникновения двух независимых флуктуаций. При том протекает процесс резкого увеличения концентрации гетероструктурных термофлуктуаций БП атомов (конденсация, выпадение конденсата). Поскольку T_2 это температура абсолютной неустойчивости низкотемпературной структуры, то при мгновенном нагреве до T_2 подсистема кластеров с ИСО получает скрытую энергию НСП первого рода.

При медленном (квазиравновесном) нагреве образца в печи до температуры, превышающей начальную температуру на 65 К [1–4], тепловая энергия равномерно распределяется по объему (поле градиента температур отсутствует), и этой средней удельной энергии уже недостаточно для НСП первого рода в подсистеме кластеров БП, обладающих ИСО, поэтому неупругая деформация не возникает.

Условием реализации ЭПД в АМС является достижение критического значения энергии импульса тока и наложение слабого ориентирующего механического напряжения. Физическим механизмом ЭПД (при достижении критического значения $j \sim 4 \cdot 10^9$ А/м²) является процесс НСП первого рода с возникновением нового ориентированного БП атомов. Этот структурный переход из низкотемпературного упругого состояния в высокотемпературное неупругое состояние является неравновесным, поскольку для его протекания и существования устойчивого неупругого состояния необходимо поступление энергии из внешней среды (выделение энергии импульса).

При пропускании ИЭТ длительностью $\tau_1 \sim 2.5$ мс и плотностью тока $j \sim 5 \cdot 10^8$ А/м² по образцу из АМС выделяется средняя энергия в расчете на один атом $w_a \sim 0.8 \cdot 10^{-4}$ эВ и происходит увеличение средней температуры образца на 10 К [1–4]. Причем в области упругой деформации, например $\varepsilon \sim 10^{-3}$, изменение упругой энергии на один атом равно $\sim 10^{-6}$ эВ, что значительно меньше выделившейся тепловой энергии Джоуля. При низкой энергии ИЭТ только малая доля кластеров БП, обладающих ИСО, испытывает неупругие атомные перестройки, ориентированные в направлении малого механического напряжения, НСП не протекает, поэтому относительный сброс напряжения (за вычетом сброса напряжения из-за температурного расширения и обычных термоактивируемых процессов) мал [1–4].

При достижении критического значения плотности тока $j \sim 4 \cdot 10^9$ А/м² (среднего значения выделившейся энергии на атом $w_a \sim 0.52 \cdot 10^{-3}$ эВ, среднего перегрева образца на 65 К) подсистема кластеров БП (субнанокластеров) с ИСО становится неустойчивой относительно НСП первого рода с возникновением нового БП, характеризуемого разупорядочением атомов и ориентированного в направлении механического напряжения, т.е. неупругой деформацией [17]. В подсистеме субнанокластеров протекает НСП, поэтому относительный

сброс напряжения (за вычетом сброса напряжения из-за температурного расширения и обычных термоактивируемых процессов) велик. Когда действие импульса прекращается, высокотемпературное неупругое состояние становится неустойчивым и подсистема полностью релаксирует в устойчивое низкотемпературное упругое состояние (состояние стекла), поэтому наблюдается полное восстановление первоначального хода кривой $\sigma(\varepsilon)$ [1–4].

При увеличении плотности тока до $j = 5 \cdot 10^9$ А/м² (среднего значения выделившейся энергии на атом $w_a \sim 0.64 \cdot 10^{-3}$ эВ, среднего перегрева образца на 80 К) подсистема нанокластеров с ИСО становится неустойчивой относительно НСП первого рода с возникновением нового среднего порядка в нанокластерах, характеризуемого большим разупорядочением атомов (состояние переохлажденной жидкости) и ориентированного в направлении механического напряжения, т.е. неупругой деформацией [17]. В подсистеме нанокластеров протекает НСП, поэтому относительный сброс напряжения (за вычетом сброса напряжения из-за температурного расширения и обычных термоактивируемых процессов) еще более увеличивается. После прохождения ИЭТ система быстро релаксирует только в части ближнего порядка атомов, время релаксации среднего порядка атомов может быть значительно больше времени проведения эксперимента. Поэтому часть неупругой деформации остается, наблюдается лишь частичное восстановление первоначального хода кривой $\sigma(\varepsilon)$ [1–4]. При еще большей плотности тока начнется нанокристаллизация АМС [19], которая может сопровождаться сдвиговой деформацией на наноструктурном уровне, и которую можно называть пластической деформацией.

Используя экспериментальные данные для сплавов АМС на основе кобальта [1–4] (первоначальное механическое напряжение $f \sim 900$ МПа, упругая деформация $\varepsilon \sim 0.9\%$, импульс тока с плотностью $j \sim 4 \cdot 10^9$ А/м², длительностью $\tau_1 \sim 2.5$ мс вызывает сброс напряжения $\Delta f \sim 400$ МПа), из формулы (25) можно оценить модуль упругости $\mu \sim 100$ ГПа, деформацию термического расширения $\sim 0.66 \cdot 10^{-2}$ и неупругую деформацию насыщения $\xi \sim 0.34 \cdot 10^{-2}$. Из формулы (26) и экспериментальных данных [1–4] (после окончания импульса восстановление сброса механического напряжения происходит за время ~ 20 с) можно оценить время структурной релаксации напряжения $\alpha^{-1} \sim 8$ с. Из формул (19), (20) и экспериментальных данных [1–4] (длительность импульса $\tau_1 \sim 2.5$ мс) можно оценить время релаксации НСП $\tau_\eta < \tau_1 \sim 2.5$ мс.

Таким образом, сформулированная физическая картина (в том числе причина, условие, механизм) эффекта ЭПД при прохождении ИЭТ качественно описывает экспериментальные данные [1–4].

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] С.А. Сидоров, В.А. Федоров, Т.Н. Плужникова и др. Вестник Тамбовского гос. ун-та. Серия: естественные и технические науки, **17** (1), 135 (2012).
- [2] В.А. Федоров, Т.Н. Плужникова, С.А. Сидоров. Известия вуз. Черная металлургия, **12**, 62 (2013).
- [3] V.A. Feodorov, T.N. Plushnikova, S.A. Sidorov, A.V. Yakovlev. Mater. Phys. Mechanics, **20** (1), 67 (2014).
- [4] Д.Ю. Федотов, С.А. Сидоров, В.А. Федоров, Т.Н. Плужникова, А.В. Яковлев. Известия вуз. Черная металлургия, **60** (7), 538 (2017).
- [5] M. Stoica, J. Das, J. Bednarcik, H. Franz, N. Mattern, W.H. Wang, J. Eckert. J. Appl. Phys., **104**, 013522 (2008).
- [6] К. Судзуки, Х. Худзимори, К. Хасимото. *Аморфные металлы* (Металлургия, М., 1987), 328 с.
- [7] А.М. Глезер, Н.А. Шурыгина. *Аморфно-нанокристаллические сплавы* (Физматлит, М., 2013), 452 с.
- [8] Г.Е. Абросимова. УФН, **181** (12), 1265 (2011).
- [9] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. *Теоретическая физика в 10 томах. Т. 6. Гидродинамика* (Физматлит, М., 2001), 736 с.
- [10] B.D. Coleman, M.E. Gurtin. J. Chem. Phys., **47**, 597 (1967).
- [11] J.R. Rice. J. Mech. Phys. Solids, **19**, 433 (1971).
- [12] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. *Статистическая физика* (Наука, М., 1976), ч. I, (т. V), 584 с.
- [13] Г.А. Малыгин. УФН, **171** (2), 187 (2001).
- [14] Г. Хакен. *Синергетика* (Мир, М., 1980), 406 с.
- [15] И. Пригожин, Р. Дефэй. *Химическая термодинамика* (Наука, Новосибирск, 1966), 510 с.
- [16] Bouchbinder Eran, J.S. Langer. Phys. Rev. E, **80**, 031131 (2009).
- [17] Е.Е. Слядников, И.Ю. Турчановский. ЖТФ, **93** (1), 104 (2023). DOI: 10.21883/JTF.2023.01.54069.114-22
- [18] Е.Е. Слядников, Ю.А. Хон, П.П. Каминский, И.Ю. Турчановский. ЖТФ, **88** (3), 374 (2018). DOI: 10.21883/JTF.2018.03.45593.2347
- [19] Е.Е. Слядников, И.Ю. Турчановский. ЖТФ, **90** (7), 1136 (2020). DOI: 10.21883/JTF.2020.07.49448.299-19
- [20] Е.Е. Слядников, Ю.А. Хон, П.П. Каминский, И.Ю. Турчановский. ИФЖ, **93** (2), 403 (2020).
- [21] С.Ю. Коростелев, Е.Е. Слядников, И.Ю. Турчановский. Известия вузов. Физика, **65** (8), 49 (2022).
- [22] О.А. Троицкий. Черная металлургия. Бюллетень научно-технической и экономической информации, **9**, 65 (2018).
- [23] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. *Теория упругости* (Наука, М., 1987), 247 с.
- [24] Я.И. Френкель. *Кинетическая теория жидкостей* (Наука ЛО, Л., 1975), 592 с.