

УДК 621.36.41

Шифр специальности ВАК: 1.2.2

Е.Е. Слядников, И.Ю. Турчановский

Математическая модель неравновесных структурных переходов в аморфных металлических сплавах при термомеханических воздействиях

Актуальность. Выявление физической природы и механизмов изменения внутренней структуры аморфных металлических сплавов при воздействии на них инфразвуком в настоящее время представляет значительный интерес и является актуальным направлением исследований. **Цель исследования.** Формулировка математической модели влияния термомеханического воздействия на неравновесные структурные переходы в аморфных металлических сплавах при воздействии инфразвуком. **Методы.** Для моделирования влияния термомеханического воздействия на структурные переходы использован метод кинетических уравнений для параметра превращения, температуры, механического напряжения. С помощью метода конечных разностей система кинетических уравнений дискретизирована и выполнены численные расчеты модельных задач. **Научная новизна.** В работе представлена новая модель влияния термомеханического воздействия на изменение внутренней структуры аморфных сплавов. **Результаты.** Полученные на основе представленной в работе математической модели результаты расчетов методом конечных разностей позволяют объяснить физические механизмы, а также причины и условия последовательности структурных переходов в рассматриваемой системе. Это, в свою очередь, позволяет объяснить экспериментально полученную закономерность изменения внутренней структуры материала при инфразвуковом воздействии. **Практическая значимость.** Полученные результаты формируют новые представления о физической природе процессов изменения внутренней структуры материалов при термомеханическом воздействии, которые могут быть использованы в электронике, материаловедении для совершенствования известных и создания новых приборов и материалов. Правила изменения состояний клеточного автомата могут быть использованы для развития метода клеточных автоматов на неравновесные структурные переходы в аморфных металлических сплавах.

Ключевые слова: математическая модель, численный расчет, аморфные металлические сплавы, изменения внутренней структуры, инфразвук.

DOI: 10.21293/1818-0442-2026-29-2-85-92

Введение

Современные аморфные материалы являются неоднородными на многих структурных уровнях, начиная с субнаноструктурного уровня и наноструктурного уровня [1–3]. Экспериментально установлено, что физические и механические свойства аморфных материалов зависят и контролируются субнано-, нано- и микроструктурой, формируемой во время протекания сложных неравновесных структурных переходов, стимулированных термомеханическими воздействиями [4–7].

В работах [4–6] образцы аморфной тонкой ленты подвергали 10-минутному воздействию инфразвука, обладающего частотой 20 Гц при амплитуде смещений 1 и 4 мкм в условиях поддержания постоянной температуры $T_0 = 25^\circ\text{C}$. При амплитуде смещения 1 мкм аморфная структура образца практически не изменяется, а при амплитуде смещения 4 мкм в аморфной матрице обнаружены кристаллические кластеры с размерами 3–5 нм [4–6]. Увеличение продолжительности воздействия до 2 ч увеличивает размер кристаллических нанокластеров, а воздействие в течение 4 ч приводит к возникновению микрокристаллической структуры, состоящей из зерен различных кристаллографических ориентаций [7]. Физическая природа и механизмы такого влияния инфразвуковых колебаний на изменение внутренней структуры аморфного металлического сплава (нанокристаллизацию и полимикрокристаллизацию) остаются неясными.

Поэтому для системного развития технологий создания новых аморфных металлических материалов, обладающих уникальными физическими, механическими свойствами и широко применяемых в электронике для создания высокоэффективных трансформаторов, миниатюрных дросселей, датчиков тока, а также легких и ударопрочных корпусов для мобильных устройств, необходимо понимание физики протекающих процессов и математическое моделирование кинетики сложных неравновесных структурных переходов.

В работах [8–10] была высказана гипотеза о физическом механизме нанокристаллизации, сформулированы феноменологическая кинетическая модель, физическая причина и условия неравновесного перехода первого рода в металлической пленке из аморфного состояния в наноструктуру, стимулированного инфразвуком.

Однако феноменологическая модель применима для описания процессов на микроскопическом и миллиметровом структурном уровне. А реальное возникновение нанокристаллов происходит на субнаноструктурном и наноструктурном уровне, поэтому для исследования этого процесса неравновесного перехода первого рода в наносистеме и верификации гипотезы, механизма и модели нанокристаллизации [8–10] необходимо применение теоретических методов исследования и численного моделирования.

Согласно классификации [11], компьютерное моделирование различных процессов в аморфных материалах содержит, в частности, статистические [12], детерминированные [13], кинетические [14] подходы. В этих моделях субнано-, нано- и микро-структура делается дискретной с помощью решетки ячеек, причем границы, разделяющие различные элементы субнано-, нано- и микро-структуры (например, субнанокластеры с кристаллическим ближним порядком, нанокластеры с кристаллическим порядком, микрозерна с кристаллическим порядком), являются резкими, что приводит к существенным вычислительным сложностям.

Для преодоления этих сложностей в данной работе предлагаются математическая и вычислительная модели кинетики сложного неравновесного структурного перехода с образованием новой субнано-, нано- и микро-структуры, стимулированного термомеханическим воздействием. Ключевая особенность модели неравновесных структурных превращений [8–10], описываемых параметрами превращения, состоит в том, что границы различных элементов нано- и микро-структуры (нанокластеров и микрозерен) являются размытыми (диффузными), т.е. гладкими, что приводит к существенному упрощению вычислений.

На основе предложенной вычислительной модели предлагается развить вычислительный метод клеточных автоматов [15] для исследования кинетики сложного неравновесного структурного перехода в аморфных металлических сплавах, стимулированного термомеханическим воздействием. Поскольку вычислительная модель описывает конкретную кинетику неравновесного структурного превращения аморфное – нанокристаллическое – полимикроструктурное состояние, то она позволяет сформулировать конкретные правила к модели клеточных автоматов, описывающей этот сложный процесс на различных пространственно-временных масштабах (субнано, нано, микро).

Математическая модель сложного неравновесного структурного перехода в аморфных металлических сплавах

Характерная особенность аморфных металлических сплавов (АМС), обладающих некристаллическим ближним порядком (БП), – первоначальная неоднородность на субнано-, наноструктурном уровнях. Существуют зоны (субнано- и нанокластеры и т.д.), обладающие избыточным свободным объемом (ИСО). Изначально АМС находятся в неравновесном состоянии. Внешние термомеханические воздействия приводят к изменению как субнано-, нано-структуры, так и формированию микро-структуры. Материалы с новыми субнано-, нано-, и микро-структурами обладают уникальными физическими и механическими свойствами. Какой физический механизм формирования таких структур? Очевидно, что при термомеханическом воздействии в АМС протекают неравновесные структурные переходы (НСП), которые являются универсальным физическим механизмом изменения структуры и свойств материалов.

Неупругая, пластическая деформация АМС на различных стадиях, стимулированная термомеханическим воздействием, представляет собой упорядоченную по времени взаимосвязанную последовательность НСП первого рода [8–10], протекающих в системе зон, обладающих ИСО, на различных пространственно-временных уровнях.

Внесенная в систему энергия (работа внешних сил, переданное из внешней среды тепло) создает неустойчивость первоначального стационарного состояния системы зон с начальным ближним и средним порядком, относительно НСП первого рода в новое стационарное состояние системы зон с новым ближним и средним порядком, ориентированным в направлении механического поля. Новое стационарное состояние может иметь более низкое значение свободной энергии, чем первоначальное состояние, поэтому оно может быть глобально устойчивым. Однако новое стационарное состояние может иметь более высокое значение свободной энергии, быть неравновесным и существовать, пока есть поток энергии в систему из внешней среды. Неравновесный переход зон сопровождается неупругой деформацией зон (возникают зоны неупругой деформации) и поглощением скрытой энергии превращения первого рода. Согласно закону сохранения энергии, работа внешних сил, затраченная на неупругую деформацию зон, идет на увеличение кинетической энергии частиц (увеличение температуры) зон и на увеличение потенциальной энергии взаимодействия частиц (поглощение скрытой энергии превращения) зон. После прекращения внешнего воздействия начинается процесс релаксации системы зон из неравновесного стационарного состояния в состояние статистического равновесия.

При термомеханическом воздействии перестройка атомов БП, сопровождающаяся неупругой деформацией, происходит как путем локальной термической флуктуации, так и путем локальной механической активации. Механизмом НСП первого рода является взаимодействие перестроенных зон, которое возникает, когда их концентрация становится достаточно большой при достижении критического значения плотности энергии термомеханического воздействия. То есть неупругая деформация образца не может быть результатом независимых перестроек зон. Перестройки зон стремятся к корреляции. Когда происходит перестройка зоны в данном месте образца, вероятность следующего события с перестройкой зоны должна быть выше в месте, близком к месту первоначального события. Неупругая деформация образца – кооперативный процесс.

Рассмотрим простую макроскопическую систему – металлический стержень, находящийся в состоянии аморфного стекла, к которому прикладывается одноосное механическое напряжение и подводится (отводится) тепло. Мысленно разобьем макроскопическую систему на наноразмерные подсистемы, содержащие большое количество кластеров БП с ИСО. При НСП первого рода кластер БП с ИСО

испытывает неупругую перестройку, ориентированную в направлении одноосной деформации. Введем безразмерную величину, характеризующую структурное состояние наноразмерной подсистемы, которая называется параметром БП [8–10]. В начальном состоянии стекла величина η равна нулю, а в конечном нанокристаллическом состоянии величина η равна единице.

Начальное и конечное состояния подсистемы являются локально устойчивыми и разделены энергетическим барьером. Подсистема в состоянии аморфного стекла характеризуется температурой перехода первого рода T_c и температурой абсолютной неустойчивости начального состояния T_2 , причем $T_2 > T_c$.

Чтобы начальное состояние, например, при начальной температуре T_0 , стало абсолютно неустойчивым, подсистема должна получить критическое количество тепла, равное $Q_c = C_V(T_2 - T_0)$. При механическом воздействии критическое значение работы внешних сил, связанное с неупругой деформацией, при котором начальное состояние становится

абсолютно неустойчивым, равно $A_c = \int_0^{\xi} \sigma(\varepsilon_{in}) d\varepsilon_{in}$,

ξ – неупругая деформация насыщения. При совместном термомеханическом воздействии на изменение устойчивости начального состояния подсистемы влияет сумма работы внешних сил и количества тепла от

внешнего источника $\int_0^{\varepsilon_{in}} \sigma(\varepsilon_{in}) d\varepsilon_{in} + \int_0^t \dot{Q} dt$.

Для такой простой модели свободной энергии системы F однородное уравнение Ландау–Халатникова для эволюции параметра БП примет вид

$$\frac{d\eta}{dt} = -\frac{1}{\tau_\eta E_Q^*} [(\partial F / \partial \eta) - \xi \sigma], \quad (1)$$

$$\frac{\partial F / \partial \eta}{E_Q^*} = \eta(\eta - \eta_2)(\eta - 1),$$

$$\eta_2 = \frac{1}{2} \left[1 - \frac{\int_0^{\varepsilon_{in}} \sigma(\varepsilon_{in}) d\varepsilon_{in}}{A_c} - \frac{\int_0^t \dot{Q} dt}{Q_c} \right],$$

$$\tau_\eta(T, \sigma) = \tau_0 e^{-(E_\eta - \sigma \xi V_\eta) / kT} + \Theta(\sigma - \sigma_1) \cdot \tau_\sigma, \quad (2)$$

где E_η – энергия активации тепловой флуктуации; σ – абсолютная величина механического напряжения; V_η – активационный объем кластера, испытывающего атомную перестройку; $\tau_0^{-1} = \omega_0 \approx 10^{13}$ Гц, t – время теплового воздействия; $\Theta(\sigma - \sigma_1)$ – тета-функция; σ_1 – предел упругости; τ_σ – характерное время механически активированной перестройки атомов БП; $\tau_\eta(T, \sigma)$ – время релаксации, которое содержит два члена: «термофлуктуационный» и «механически активированный» [8, 9]. Когда плотность энергии

термомеханического воздействия достигает критического значения, начальное состояние становится абсолютно неустойчивым η , происходит конденсация зон деформации с кристаллическим БП, возникает нанокристаллическое состояние.

Однородное уравнение баланса тепла с учетом тепловыделения имеет вид

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

$$W = - \left\{ \frac{\partial F}{\partial \eta} - v \xi \sigma \right\} \dot{\eta} = \Gamma \left\{ \frac{1}{E_Q^*} \left[\frac{\partial F}{\partial \eta} - v \xi \sigma \right]^2 \right\}, \quad (3)$$

где C_V – удельная теплоемкость, T – абсолютная температура; $\dot{Q}$ – мощность внешнего теплового источника. Сумма скорости изменения свободной энергии $-\frac{\partial F}{\partial \eta} \dot{\eta}$ при неравновесном процессе и доли скорости

совершения работы неупругой деформации $v \xi \sigma \dot{\eta} = v \xi \dot{\varepsilon}_{in} > 0$ определяет скорость диссипации энергии W (3). Величина v , изменяющаяся от нуля до единицы, характеризует долю работы неупругой деформации, которая превращается в тепло.

Сумма упругой и неупругой деформации [8–10] формирует полную деформацию одномерного образца ε :

$$\varepsilon = \varepsilon_{el} + \varepsilon_{in} = \varepsilon_{el} + \xi \eta, \quad \frac{d\varepsilon(t)}{dt} = \frac{1}{\mu} \frac{d\sigma(t)}{dt} + \xi \frac{d\eta(t)}{dt}. \quad (4)$$

При $\varepsilon = \text{const}$, $\dot{\varepsilon} = 0$ уравнение (4) редуцируется в уравнение

$$\frac{d\sigma(t)}{dt} = \mu \left[\frac{d\varepsilon(t)}{dt} - \xi \frac{d\eta(t)}{dt} \right], \quad \varepsilon = \text{const},$$

$$\frac{d\sigma(t)}{dt} = -\mu \xi \frac{d\eta(t)}{dt}, \quad \frac{d\sigma(\eta)}{d\eta} = -\mu \xi, \quad (5)$$

$$\sigma(\eta) = \sigma(0) - \xi \mu \eta = \mu(\varepsilon_{el} - \xi \eta) = \mu(\varepsilon_{el} - \varepsilon_{in}), \quad (6)$$

где μ – модуль упругости. Если НСП ($\eta = 0$) отсутствует, механическое напряжение увеличивается пропорционально деформации. При критическом значении термомеханического воздействия в точке ε_1 протекает структурное превращение ($\eta = 1$), возникает неупругая деформация $\varepsilon_2(\eta = 1) = \xi$ и происходит сброс механического напряжения на величину $-\xi \mu$.

При дальнейшем увеличении термомеханического воздействия эволюция структуры системы, испытывающей сложное неравновесное структурное превращение первого рода аморфное состояние – нанокристаллическое состояние – полимикрокристалл, может быть описана следующим образом. Рассмотрим простую макроскопическую систему – металлический стержень, находящийся в нанокристаллическом состоянии, к которому прикладывается одноосное механическое напряжение и подводится (отводится) тепло. Мысленно разобьем макроскопическую систему на микроразмерные подсистемы, содержащие некоторое количество критических кри-

таллических зародышей – критических нанокристаллов. Для описания НСП первого рода в микроразмерной подсистеме из начального состояния с несколькими критическими нанокристаллами в конечное полимикроструктурное (зернистое) состояние при термомеханическом воздействии введем набор параметров порядка $\eta_i(r, t) = \eta_i(r - r_i, t)$, $i = 1, 2, 3, \dots, I$, где I – число параметров порядка, равное числу критических зародышей. Пусть для определенности параметр порядка $\eta_i(r, t)$ описывает i -е кристаллическое зерно с i -й кристаллографической ориентацией. Эта величина может принимать действительные значения из интервала от 0 (нанокристаллическое состояние) до 1 (кристаллическое состояние всего микрозерна). Например, $\eta_1(r - r_1, 0) = 1$ означает, что в начальный момент времени кристаллический зародыш первого зерна в окрестности точки r_1 имеет кристаллографическую ориентацию 1, а $\eta_2(r - r_2, 0) = 1$ означает, что в начальный момент времени кристаллический зародыш второго зерна в окрестности точки r_2 имеет кристаллографическую ориентацию 2. В приграничной области между зерном 1 с ориентацией 1 и зерном 2 с ориентацией 2 соответствующие параметры порядка будут иметь значения между 1 и 0. Тогда функционал полной свободной энергии такой подсистемы, содержащей I зерен, имеет вид

$$F[\eta(r, t)] = \int_V \left\{ f(\eta_1(r, t), \eta_2(r, t), \dots, \eta_I(r, t)) + \sum_{i=1}^I \frac{D_i}{2} \cdot [\nabla \eta_i(r, t)]^2 \right\} dV, \quad (7)$$

где $F[\eta(r, t)]$ – функционал полной свободной энергии подсистемы, содержащей объемную и поверхностную (градиентную) энергию; $f(\eta_1(r, t), \eta_2(r, t), \dots, \eta_I(r, t))$ – плотность объемной свободной энергии подсистемы; D_i – коэффициенты градиентной энергии подсистемы, V – объем подсистемы. Градиентный член имеет физический смысл энергетического штрафа на неоднородности поля параметра превращения, которая возникает на границе зерна. Поверхностная свободная энергия связана с наличием диффузной (размытой) границы зерна.

Релаксационная кинетика параметров порядка, а следовательно, и кинетика миграции межзеренных границ описывается системой уравнений Ландау–Халатникова

$$\frac{\partial \eta_i(r, t)}{\partial t} = -\gamma_i \frac{\delta F[\eta_1(r, t), \eta_2(r, t), \dots]}{\delta \eta_i(r, t)} = -\gamma_i \left\{ \frac{\partial f(\eta_1, \eta_2, \dots)}{\partial \eta_i} - D_i \nabla^2 \eta_i \right\}, \quad i = 1, 2, 3, \dots, I, \quad (8)$$

γ_i – коэффициент релаксации подсистемы, описывающий подвижность границ зерен. Для системы, содержащей I зерен и испытывающей сложное неравновесное структурное превращение первого рода, выберем плотность объемной свободной энергии в виде [8–10]

$$f(\eta_1, \dots, \eta_I) = \sum_{i=1}^I \left[\frac{1}{4} \eta_i^4 - \frac{1}{3} (1 + \eta_i^*) \eta_i^3 + \frac{1}{2} \eta_i^* \eta_i^2 - \frac{\xi \sigma \eta_i}{E_Q^*} \right] + \lambda \sum_{i=1}^I \sum_{j \neq i}^I \eta_i^2 \eta_j^2, \quad (9)$$

где λ – константа ингибирующего взаимодействия различных параметров порядка, η_i^* – параметр неравновесности системы в окрестности точки r_i , E_Q^* – скрытая энергия структурного превращения, причем $\xi \sigma / E_Q^* \ll 1$ [10]. Значения феноменологических параметров и коэффициенты градиента энергии определяют энергию границ зерен (7) и толщину границ. Из (9) видно, что свободная энергия имеет $2I$ потенциальных минимумов, которым соответствуют стационарные состояния зерен. При фиксированных значениях феноменологических параметров можно определить как энергию границы раздела, так и ширину границы, которые регулируются путем изменения коэффициентов градиентной энергии. Чем больше коэффициент градиентной энергии, тем больше ширина границы. Когда коэффициент градиентной энергии стремится к нулю, толщина границы становится бесконечно тонкой. Используя выражения (8), (9) получим соответствующую систему кинетических уравнений Ландау–Халатникова, описывающих сложное неравновесное превращение первого рода:

$$\frac{\partial \eta_i(r, t)}{\partial t} = -\gamma_i \left\{ \eta_i (\eta_i - \eta_i^*) (\eta_i - 1) - \frac{\xi \sigma}{E_Q^*} + 2\lambda \eta_i \sum_{j \neq i}^I \eta_j^2 - D_i \nabla^2 \eta_i \right\}. \quad (10)$$

Для $I = 1$ одно уравнение эволюции описывает кинетику роста и миграции границы одного зерна с образованием монокристалла, когда $I \gg 1$, набор уравнений описывает кинетику роста и движения границ I зерен с образованием полимикроструктурного кристалла.

Численное моделирование НСП первого рода с образованием микроструктуры

Выполним численное моделирование НСП первого рода с образованием полимикроструктурного кристалла, описываемого системой уравнений (10); для набора параметров порядка необходимо сделать ряд шагов:

- определить физически адекватный набор параметров порядка для моделирования сложного неравновесного структурного перехода;
- сформулировать полную свободную энергию системы как функционал набора параметров порядка, которая правильно описывает ее термодинамическое поведение;
- выбрать значения феноменологических коэффициентов, входящих в кинетические уравнения, из экспериментальных данных или фундаментальных расчетов;
- ввести соответствующие начальные и граничные условия для численного решения кинетических уравнений.

Для численного решения системы кинетических уравнений (10) необходимо провести их дискретизацию в пространстве координат и на временной оси. Например, для одномерного образца оператор Лапласа может быть представлен в конечных разностях в виде

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \eta(x) = \frac{1}{(\Delta x)^2} [\eta(x + \Delta x) + \eta(x - \Delta x) - 2\eta(x)], \quad (11)$$

где Δx является длиной ячеек, на которые разбит образец. Для дискретизации времени запишем частную производную по времени в конечных разностях

$$\frac{\partial \eta(t)}{\partial t} = \frac{\eta(t + \Delta t) - \eta(t)}{\Delta t}, \quad (12)$$

где Δt – временной шаг.

Входящие в кинетические уравнения (10) константы γ_i и D_i имеют размерность с^{-1} и м^2 соответственно. Значения этих величин зависят от длины одномерной подсистемы и длины критического зародыша. Выберем длину критического зародыша равной 10 нм, а величину $\sqrt{D_i} = 5$ нм равной половине длины критического зародыша. Размер ячейки Δx не может быть больше длины критического зародыша. Выберем длину ячейки $\Delta x = 10$ нм. Тогда длина подсистемы, разбитой на 50 ячеек, составит $L = 500$ нм.

Уравнения (10) можно сделать безразмерными, введя безразмерное время $\tilde{t} = \gamma_i t / 150$ и безразмерную координату $\tilde{x} = x / L$, а также безразмерный параметр $\tilde{D}_i = D / L^2 = 0,0001$. Для применимости схемы расчета должно выполняться условие $\Delta t / (\Delta x)^2 < 1$.

Для простоты и наглядности все численные результаты были получены для одномерной безразмерной системы уравнений (10), используя схему дискретизации (11), (12) с конкретными значениями феноменологических констант $\gamma_i = 150$ (независимость коэффициента от i – изотропная мобильность границ зерен); $D_i = 0,0001$ (независимость коэффициента от i – изотропная энергия границ зерен); $\lambda = 20$, $\eta_1^* = \eta_2^* = 0,25$, $\sigma_i = 0$. Одномерный образец длиной 1 разбивался на 50 ячеек длиной 0,02. Характерное время релаксации подсистемы $150 / \gamma_i$, выбранное за единицу, разбивалось на 2500 интервалов длиной 0,0004. Начальное условие для параметра порядка 1 выбиралось $\eta_1(x, 0) = 0$, и для параметра порядка 2 выбиралось $\eta_2(x, 0) = 0$. Граничное условие для параметра порядка 1 выбиралось $\eta_1(0, t) = 1$, а для параметра порядка 2 выбиралось $\eta_2(50, t) = 1$.

Выбор таких граничных условий физически означает, что на левой и правой границах образца возникли критические зародыши – нанокристаллы. Для перечисленных выше начальных, граничных условий и феноменологических коэффициентов после 2500 шагов по времени получились профили для параметра порядка 1 (рис. 1, а) и для параметра порядка 2 (см. рис. 1, б).

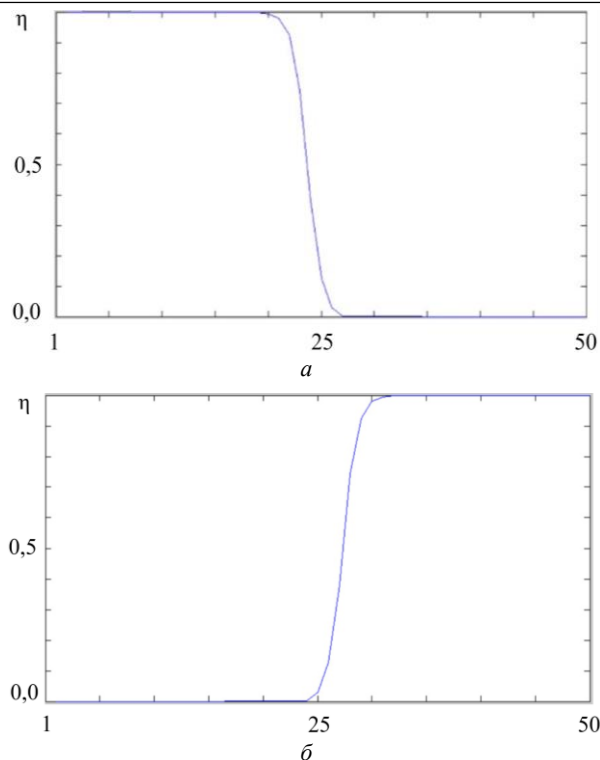


Рис. 1. Зависимость профиля параметра порядка от пространственной координаты, выраженной в ячейках разбиения, после 2500 шагов по времени: а – с ориентацией 1 зерна 1; б – с ориентацией 2 зерна 2

Для визуализации эволюции микроструктуры образца, состоящего из двух зерен с ориентацией 1 и 2, и описываемой двумя параметрами порядка, использовалась функция

$$\Psi(x, t) = \eta_1^2(x, t) + \eta_2^2(x, t). \quad (13)$$

Зависимость этой функции от пространственной координаты после 2500 шагов по времени показана на рис. 2.

Результаты численных расчетов позволяют сделать вывод, что возникшие в аморфной матрице критические нанокристаллы различных кристаллографических ориентаций сначала растут, а когда их границы соприкасаются, рост зерен прекращается и возникает полимикроструктурная структура.

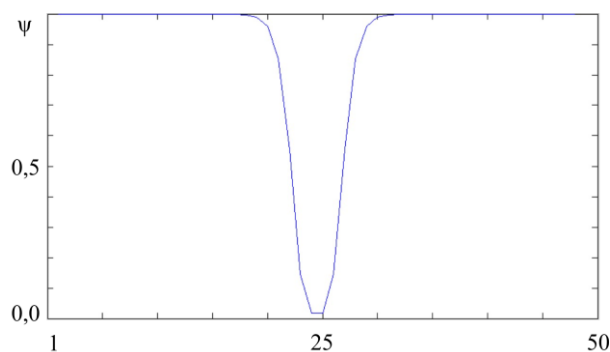


Рис. 2. Микроструктура образца $\Psi(x) = \eta_1^2(x) + \eta_2^2(x)$, состоящего из двух зерен с ориентацией 1 и 2, и описываемая двумя параметрами порядка, после 2500 шагов по времени

Вычислительный алгоритм к модели клеточных автоматов

Результаты дискретизации и численного исследования одномерной системы дифференциальных уравнений для физических переменных (на примере полей параметров порядка, температуры, напряжения), описывающих сложный неравновесный переход первого рода нанокристаллическое состояние – полимикрорекристалл, позволяют сформулировать вычислительный алгоритм к модели клеточных автоматов, описывающей этот сложный процесс на различных пространственно-временных масштабах (субнано, нано, микро):

1. Задать поля температуры $T(t, x)$, параметров порядка $\eta_i(t, x)$, напряжения $\sigma(t)$, в которых координата автомата x меняется дискретно с шагом Δx , а время – с шагом Δt . Автомат, расположенный слева от автомата с координатой x , имеет координату $x - \Delta x$, а автомат, расположенный справа от автомата с координатой x , имеет координату $x + \Delta x$. В отличие от вычислительной модели (10)–(13) в модели клеточных автоматов каждая клетка автомата определяет ячейку пространства, в которой параметр порядка, температура, напряжение меняются дискретно.

2. Кроме полей температуры, параметров порядка, напряжения, в каждой ячейке клеточного автомата необходимо вычислить значения различных видов свободной энергии системы, параметра неравновесности $\eta_i^*(T, \sigma)$.

3. Используя дискретизацию одномерного дифференциального уравнения Ландау–Халатникова, задать правило изменения параметра порядка в клетке автомата со временем

$$\eta_i(x, t + \Delta t) - \eta_i(x, t) = -2\gamma_i \Delta t \left\{ \eta_i(x, t)(\eta_i(x, t) - \eta_i^*) \times \right. \\ \left. \times (\eta_i(x, t) - 1) - \frac{\xi \sigma}{E_Q} + 2\lambda \eta_i(x, t) \sum_{j \neq i} \eta_j^2 - \right. \\ \left. - \frac{D_i}{(\Delta x)^2} [\eta_i(x + \Delta x, t) + \eta_i(x - \Delta x, t) - 2\eta_i(x, t)] \right\}. \quad (14)$$

4. Переход автомата в состояние с новым значением параметра порядка возможен при условиях, если хотя бы один из его соседей уже находится в кристаллическом состоянии, а параметр неравновесности превышает критическое значения.

5. Используя дискретизацию одномерного дифференциального уравнения теплопроводности, задать правило изменения температуры в клетке автомата со временем:

$$T(x, t + \Delta t) - T(x, t) = \\ = \frac{\alpha \cdot \Delta t}{(\Delta x)^2} [T(x + \Delta x, t) + T(x - \Delta x, t) - 2T(x, t)] + \\ + \frac{\tau_\eta Q_T}{\Delta t} [\eta_i(x, t + \Delta t) - \eta_i(x, t)]^2. \quad (15)$$

Здесь α – коэффициент температуропроводности; Q_T – скрытая энергия превращения первого рода на единицу объема, выраженная в единицах температуры; $Q_T = Q/c \cdot \rho$, c – теплоемкость [Дж/кг·К]; ρ – плотность АМС [кг/м³]; Q – скрытая энергия превращения первого рода на единицу объема [Дж/м³].

6. Если задана (фиксирована) полная деформация одномерного образца $\varepsilon = \varepsilon_{упр} + \varepsilon_{неупр}$, то механическое напряжение зависит от времени и вычисляется по формуле

$$\sigma(t) = E \varepsilon_{упр}(t) = E \left[\varepsilon - \frac{\xi}{I} \sum_{i=1}^I \eta_i(t) \right]. \quad (16)$$

Заключение

Сформулирована физико-математическая модель для сложного неравновесного перехода первого рода аморфное состояние – нанокристаллическое состояние – полимикрорекристалл (описываемого с помощью системы уравнений Ландау–Халатникова для набора различных параметров порядка). Основная черта этой модели состоит в учете конечной ширины границы между зернами, энергии межзеренных границ, температуры, механического напряжения, а также учете ингибирующего взаимодействия между соседними параметрами порядка, что приводит к самосогласованной эволюции микроструктуры аморфного сплава без отслеживания движения межзеренных границ. Проведена дискретизация модели и выполнены численные расчеты модельных задач.

В рамках предложенной модели изменение внутренней структуры материала при увеличении времени механического воздействия [5–7] происходит путем реализации упорядоченной последовательности структурных превращений первого рода, протекающих на различных пространственно-временных уровнях.

При малой продолжительности механического воздействия перестройка атомов БП, сопровождающаяся неупругой деформацией, происходит путем локальной механической активации [8–10].

Механизмом НСП первого рода является взаимодействие перестроенных зон, которое возникает, когда их концентрация становится достаточно большой. Если плотность энергии механического воздействия достигает первого критического значения, то происходит конденсация зон деформации с кристаллическим БП, возникает нанокристаллическое состояние.

При продолжении механического воздействия нанокристаллы растут, и некоторые из них достигают размеров критического зародыша. При дальнейшем увеличении длительности механического воздействия, когда плотность энергии механического воздействия достигает второго критического значения, критические нанокристаллы начинают нормальный рост, при этом выделяется скрытая теплота превращения первого рода, которая и обеспечивает самопроизвольное развитие процесса кристаллизации. В результате роста зерен с различной кристаллографической ориентацией формируется полимикрорекристаллическая структура.

Таким образом, предложенная в работе математическая модель качественно описывает закономерное изменение внутренней структуры аморфных сплавов при увеличении длительности механического воздействия, наблюдаемое экспериментально [5–7].

Результаты численного исследования модели кинетики неравновесных переходов первого рода в аморфных металлических сплавах при термомеханических воздействиях позволили сформулировать вычислительный алгоритм к модели клеточных автоматов, описывающей этот сложный процесс на различных пространственно-временных масштабах (субнано, нано, микро).

Сложный неравновесный структурный переход в АМС (как упорядоченная последовательность простых неравновесных переходов на различных пространственно-временных масштабах) может описываться как процесс в связанной системе моделей клеточных автоматов, соответствующих субнано-, нано-, микропространственно-временным масштабам. Ячейки клеточных автоматов имеют размеры субнано-, нано-, микрометров. Универсальными параметрами ячеек, описывающими процессы на различных масштабных уровнях, являются соответствующие параметры порядка (ближнего порядка с ячейкой $0,3 \cdot 10^{-9}$ м, среднего порядка с ячейкой $10 \cdot 10^{-9}$ м, микроскопического порядка с ячейкой $500 \cdot 10^{-9}$ м и т.д.). В качестве правила изменения состояния клетки по параметру порядка разумно использовать дискретизированное уравнение Ландау–Халатникова, в которые входит фундаментальная величина – свободная энергия как функция соответствующих параметров порядка. На каждом структурном уровне свободная энергия включает энергию соответствующих структурных объектов и их взаимодействия. Наличие начальных структурных особенностей для каждого масштабного уровня (кластеры БП с ИСО, критические нанокристаллы, межзеренные границы и т.д.) определяют начальные и граничные условия к уравнениям Ландау–Халатникова.

Работа выполнена в рамках государственного задания Минобрнауки России для Федерального исследовательского центра информационных и вычислительных технологий.

Литература

1. Progress, applications, and challenges of amorphous alloys: A critical review / Z. Feng, H. Geng, Y. Zhuang, P. Li // *Inorganics*. – 2024. – Vol. 12, No. 9. – P. 232.
2. Nanoscale structural heterogeneity and magnetic properties of Fe-based amorphous alloys via Co and Ni additions / Z.Z. Yang, L. Zhu, S.S. Jiang, C. Zhu, Q.H. Xu, Y. Lin, F.G. Chen, Y.G. Wang // *Journal of Alloys and Compounds*. – 2022. – Vol. 904. – 25 May. – P. 164067.
3. Zhang G. Advances in amorphous nanomaterials: Synthesis, characterization and application / G. Zhang, H. Hu, J. Wu // *Materials Today Nano*. – 2025. – December. – Vol. 32. – Article: 100675.
4. Изменение радиуса первой координационной сферы в аморфных сплавах при деформировании / Г.Е. Абросимова, В.В. Астанин, Н.А. Волков, Д.В. Гундеров, Е.Ю. Постнова, А.С. Аронин // *Физика металлов и металловедение*. – 2023. – Т. 124, № 7. – С. 622–634.
5. Influence of low-frequency vibrations on the structure of amorphous Ti40.7Hf9.5Ni44.8Cu5 alloy / S. Belyaev, N. Resnina, V. Rubanik, A. Shelyakov, V. Nipomniashchay, E. Ubyivovk, I. Kasatkin // *Materials letters*. – 2017. – Vol. 209. – P. 231–234.
6. Crystallization of amorphous Ti40.7Hf9.5Ni41.8Cu8 alloy during the low-frequency mechanical vibrations at room

temperature / S. Belyaev, V. Rubanik, N. Resnina, V. Rubanik, E. Ubyivovk, E. Demidova, A. Uzhekina, I. Kasatkin, A. Shelyakov // *Materials Letters*. – 2020. – Vol. 275. – P. 128084–128087.

7. Variation in the of the amorphous NiTi-based alloys during mechanical vibrations / S. Belyaev, V. Rubanik, N. Resnina, V. Rubanik, E. Ubyivovk, E. Demidova, A. Uzhekina, I. Kasatkin, A. Shelyakov // *Journal of Non-Crystalline Solids*. – 2020. – Vol. 542. – P. 120101.

8. Слядников Е.Е. О возможном механизме внешнего инфразвукового механического стимулирования процесса формирования нанокристаллов в аморфной металлической пленке / Е.Е. Слядников, И.Ю. Турчановский // *Журнал технической физики*. – 2021. – Т. 91, № 11. – С. 1662–1673.

9. Слядников Е.Е. Неоднородная пластическая деформация аморфных металлических сплавов под действием квазистатической механической нагрузки / Е.Е. Слядников, И.Ю. Турчановский // *Журнал технической физики*. – 2023. – Т. 93, № 1. – С. 104–116.

10. Слядников Е.Е. Модель электропластичности в аморфных металлических сплавах / Е.Е. Слядников, И.Ю. Турчановский // *Журнал технической физики*. – 2025. – Т. 95, № 10. – С. 2029–2037.

11. Application of Machine Learning in Amorphous Alloys / L. Zhang, H. Zhang, B. Ji, L. Liu, X. Liu, D. Chen // *Materials*. – 2025. – Vol. 18, No. 8. – Art. 1771.

12. On the reliability of using reverse Monte Carlo simulations to construct the atomic structure model of metallic glasses / Ch. Liu, Zh. Zhang, J. Ding, E. Ma // *Scripta Materialia*. – 2023. – Vol. 225. – Art. 115159.

13. Molecular simulation-derived features for machine learning predictions of metal glass forming ability / B.T. Afflerbach, L. Schultz, J.H. Perepezko, P.M. Voyles, I. Szlufarska, D. Morgan // *Computational Materials Science*. – 2021. – Vol. 199. – P. 110728.

14. Модификация кинетической модели Вильсона–Френкеля и атомистическое моделирование скорости плавления/кристаллизации металлов / В.И. Мажукин, А.В. Шапранов, О.Н. Королёва, А.В. Мажукин // *Математическое моделирование*. – 2023. – Т. 35, № 11. – С. 103–121.

15. Zhi Y. Review on Cellular Automata for Microstructure Simulation of Metallic Materials / Y. Zhi, Y. Jiang, D. Ke // *Materials*. – 2024. – Vol. 17(6). – P. 1370.

Слядников Евгений Евгеньевич

Проф. каф. электронных приборов
Томского государственного университета
систем управления и радиоэлектроники (ТУСУР)
Ленина пр-т, 40, г. Томск, Россия, 634050
Тел.: +7 (382-2) 41-38-87
Эл. почта: eeslad1962@gmail.com
Ст. науч. сотр. Томского ф-ла фед. исследовательского центра
информационных и вычислительных технологий (ФИЦ ИВТ)
Академический пр-т, 10/4, г. Томск, Россия, 634055
Тел.: +7 (382-2) 49-17-74
Эл. почта: tomsk@ict.nsc.ru

Турчановский Игорь Юрьевич

Рук-ль Томского ф-ла ФИЦ ИВТ
Академический пр-т, 10/4, г. Томск, Россия, 634055
Тел.: +7 (382-2) 49-17-74
Эл. почта: tomsk@ict.nsc.ru

Поступила в редакцию: 19.05.2026.
Принята к публикации: 22.09.2026.

Slyadnikov E.E., Turchanovsky I.Yu.

Mathematical model of non-equilibrium structural transitions in amorphous metal alloys under thermomechanical loading

Relevance. The identification of the physical nature and mechanisms of internal structural changes in amorphous metal alloys under infrasound exposure is of considerable scientific interest.

Purpose of the study. The aim of this study is to formulate a mathematical model describing the effect of thermomechanical loading on nonequilibrium structural transitions in amorphous metal alloys subjected to infrasound exposure. **Methods.** To simulate the effect of thermomechanical loading on structural transitions, the method of kinetic equations was employed for the transformation parameter, temperature, and mechanical stress. The system of kinetic equations was discretized using the finite difference method, and numerical calculations were performed for benchmark model problems. **Scientific novelty.** This work presents a novel model of the effect of thermomechanical loading on changes in the internal structure of amorphous alloys. **Results.** A mathematical model (a system of kinetic equations) and numerical calculations using the finite difference method reveal the physical mechanisms, causes, and conditions of the sequence of structural transitions and explain the experimentally obtained pattern of changes in the internal structure of a material under infrasound action. Rules for changing the states of a cellular automaton in a cellular automaton model.

Practical significance. The findings contribute new insights into the physical nature of internal structural transformation processes in materials subjected to thermomechanical loading. These results can be used in electronics and materials science to improve existing devices and materials, as well as for the development of novel ones. The state transition rules of the cellular automaton can be extended to the study of nonequilibrium structural transitions in amorphous metallic alloys, thereby advancing the cellular automaton method in this domain.

Keywords: mathematical model, numerical calculation, amorphous metal alloys, internal structural changes, infrasound.

Funding: The research was carried out within the state assignment of Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation for Federal Research Center for Information and Computational Technologies.

DOI: 10.21293/1818-0442-2026-29-2-85-92

References

1. Feng Z., Geng H., Zhuang Y., Li P. Progress, applications, and challenges of amorphous alloys: A critical review. *Inorganics*, 2024, vol. 12, no. 9, pp. 232.
2. Yang Z.Z., Zhu L., Jiang S.S., Zhu C., Xu Q.H., Lin Y., Chen F.G., Wang Y.G. Nanoscale structural heterogeneity and magnetic properties of Fe-based amorphous alloys via Co and Ni additions. *Journal of Alloys and Compounds*, 2022, vol. 904, art. 164067.
3. Zhang G., Hu H., Wu J. Advances in amorphous nanomaterials: Synthesis, characterization and application. *Materials Today Nano*, 2025, vol. 32, art. 100675.
4. Abrosimova G., Gunderov D., Postnova E., Aronin A. Changes in the Structure of Amorphous Alloys under Deformation by High-Pressure Torsion and Multiple Rolling. *Materials*, 2023, vol. 16, no. 3, art. 1321.
5. Belyaev S., Resnina N., Rubanik V., Shelyakov A., Niapomniashchay V., Ubyivovk E., Kasatkin I. Influence of low-frequency vibrations on the structure of amorphous $\text{Ti}_{40}\text{.7Hf}_{9}\text{.5Ni}_{44}\text{.8Cu}_5$ alloy. *Materials letters*, 2017, vol. 209, pp. 231–234.
6. Belyaev S., Rubanik V., Resnina N., Rubanik V., Ubyivovk E., Demidova E., Uzhekina A., Kasatkin I., Shelyakov A.

Crystallization of amorphous $\text{Ti}_{40}\text{.7Hf}_{9}\text{.5Ni}_{44}\text{.8Cu}_5$ alloy during the low-frequency mechanical vibrations at room temperature. *Materials Letters*, 2020, vol. 275, pp. 128084–128087.

7. Belyaev S., Rubanik V., Resnina N., Rubanik V., Ubyivovk E., Demidova E., Uzhekina A., Kasatkin I., Shelyakov A. Variation in the of the amorphous NiTi-based alloys during mechanical vibrations. *Journal of Non-Crystalline Solids*, 2020, vol. 542, art. 120101.

8. Slyadnikov E.E., Turchanovsky, I.Y. [On the Possible Mechanism of External Infrasonic Mechanical Stimulating the Process of Formation of Nanocrystals in an Amorphous Metal Film]. *Zhurnal Tekhnicheskoi Fiziki*, 2021, vol. 91, no. 11, pp. 1662–1673 (in Russ.).

9. Slyadnikov E.E., Turchanovsky I.Y. Non-Homogeneous Plastic Deformation of Amorphous Metallic Alloys under the Action of a Quasi-Static Mechanical Load. *Technical Physics*, 2023, vol. 68, no. 1, pp. 99–110.

10. Slyadnikov E.E., Turchanovsky I.Y. Electroplasticity model for amorphous metal alloys. *Technical Physics*, 2025, vol. 70, no. 10, pp. 1911–1918.

11. Zhang L., Zhang H., Ji B., Liu L., Liu X., Chen D. Application of Machine Learning in Amorphous Alloys. *Materials*, 2025, vol. 18, no. 8, art. 1771.

12. Liu Ch., Zhang Zh., Ding J., Ma E. On the reliability of using reverse Monte Carlo simulations to construct the atomic structure model of metallic glasses. *Scripta Materialia*, 2023, vol. 225, art. 115159.

13. Afflerbach B.T., Schultz L., Perepezko J.H., Voyles P.M., Szufarska I., Morgan D. Molecular simulation-derived features for machine learning predictions of metal glass forming ability. *Computational Materials Science*, 2021, vol. 199, art. 110728.

14. Mazhukin V.I., Shapranov A.V., Koroleva O.N., Mazhukin A.V. Modification of the Wilson–Frankel kinetic model and atomistic simulation of the rate of melting/crystallization of metals. *Math. Models Comput. Simul.*, 2024, vol. 16, pp. 223–234.

15. Zhi Y., Jiang Y., Ke D. Review on Cellular Automata for Microstructure Simulation of Metallic Materials, *Materials*, 2024, vol. 17(6), art. 1370.

Evgeniy E. Slyadnikov

Professor, Department of Electronic Devices,
Tomsk State University of Control Systems
and Radioelectronics (TUSUR)
40, Lenin Ave., Tomsk, Russia, 634050
Phone: +7 (382-2) 41-38-87
Email: eeslad1962@gmail.com
Sr. Researcher, Tomsk branch of the Federal Research Center
for Information and Computing Technologies (FRC ICT)
10/4, Academicheskoy Ave., Tomsk, Russia, 634055
Phone: +7 (382-2) 49-17-74
Email: tomsk@ict.nsc.ru

Igor Yu. Turchanovsky

Head of the Tomsk branch of FRC ICT
10/4, Academicheskoy Ave., Tomsk, Russia, 634055
Phone: +7 (382-2) 49-17-74
Email: tomsk@ict.nsc.ru

Received: 19.05.2026.

Accepted: 22.09.2026.