НЕЛИНЕЙНО-ВОЛНОВЫЕ МЕХАНИЗМЫ ФОРМИРОВАНИЯ СТРУКТУРЫ И СВОЙСТВ ТУГОПЛАВКИХ МАТЕРИАЛОВ

Корниенко Н.Е., Григорук В.И., Корниенко А.Н.
Киевский национальный университет, просп. Глушкова 6, nikkorn@mail.univ.kiev.ua

Ключевая роль нелинейных резонансных волновых процессов в формировании структуры и свойств твердых тел связана с коллективными свойствами их колебательных мод и пространственным накоплением их нелинейного взаимодействия. Это ведет к значительным эффектам, в частности, к сильному колебательно-электронному взаимодействию. Известно, что плавление веществ связано с нелинейной генерацией высших колебательных мод, колебательной неустойчивостью веществ и модификацией электронных состояний [1]. Нами установлено, что отношения работы выхода электрона из вещества к энергии ионизации атомов **A/I** для широкого круга веществ линейно зависят от температур плавления $\mathbf{T_m}$ $\mathbf{(A/Ia_i+b_iT_m)}$, что показано на рис.1. Это доказывает существование только трех коллективных механизма образования тугоплавких материалов (ТПМ). Причем для ТПМ реализуются большие изменения электронных состояний.

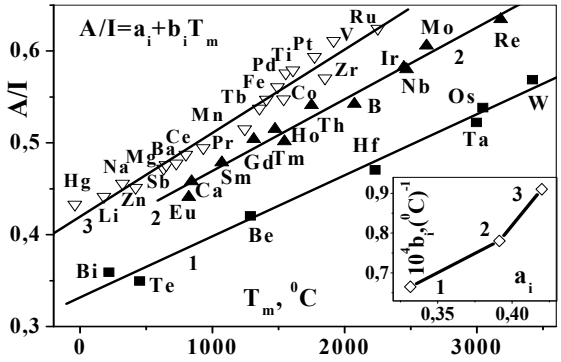

Рис.1. Линейные корреляции отношений **A/I** и температур плавления $\mathbf{T_m}$ атомарных веществ

Дискретное изменение нелинейности твердых тел из атомов одного периода ПС элементов иллюстрируется рис.2. Более быстрый рост теплоты плавления $\mathbf{Q_m}$ при повышении $\mathbf{T_m}$ указывает на большую колебательную нелинейность. Для ТПМ реализуется меньшая нелинейность, что не позволяет эффективно преобразовывать тепловую энергию в высшие колебательные моды. Это и обеспечивает температурную устойчивость ТПМ. Максимальные значения $\mathbf{T_m}$ достигаются для **Cr** и **Mo** с электронными состояниями $\mathbf{nd^5(n+1)s}$, а также **W**. Количественной мерой устойчивости систем химических связей может быть отношение граничной колебательной энергии, равной теплоте плавления в расчете на один атом **Q**, к **A**. Например, для твердых тел из элементов 5-го периода максимум **Q/A**=8,68% достигается для **Mo** (см. рис.3). Очень важно, что поведение модулей Юнга **E** и сдвига **G**, пределов текучести $\boldsymbol{\sigma}_{0,2}$ (остаточная деформация 0,2%) и прочности на разрыв $\boldsymbol{\sigma}_{max}$ хорошо коррелирует с параметром колебательной неустойчивости **Q/A,** что показано на рис.3. Таким образом, даже модули **E**,**G** линейной теории упругости являются существенно нелинейными величинами. Для модулей $\boldsymbol{\sigma}_{0,2}$ и $\boldsymbol{\sigma}_{max}$, а также модуля Пуассона и относительных деформаций **δ,ψ** при разрыве достигаются более развитые стадии нелинейно-волновых процессов.

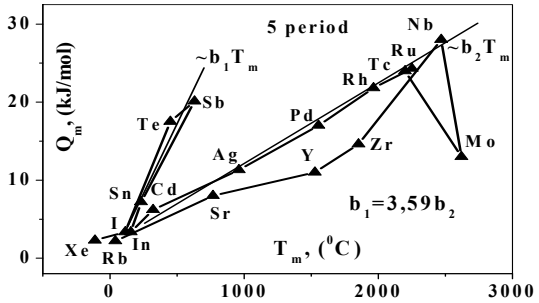

Рис.2 Демонстрация существования высоко- и низко-нелинейных групп конденсированных сред на примере элементов 5-го периода

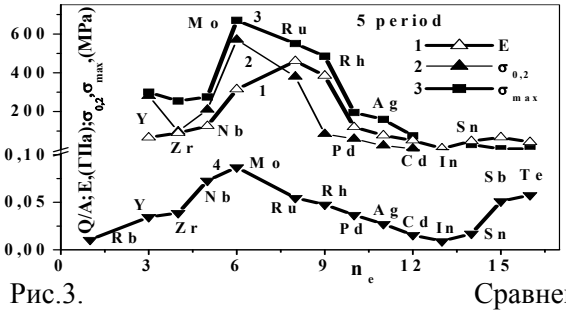

Рис.3. Сравнение зависимостей модулей E (1), $\sigma_{0,2}$(2), σ_{max}(3) и величины Q/A (4) от количест-ва валентных электронов для простых веществ из атомов 5-го периода ПС элементов

1. Корниенко Н.Е., Вестник Киевского унив., сер. физ.-мат. науки, 2004, вип. № 4, с.466-476.