Предложенная технология использования гранулированного асфальтовяжущего может быть использована для создания верхнего слоя асфальтобетонного покрытия наиболее подверженного воздействию внешних силовых факторов, а также воздействию климатических условий той или иной природной зоны. При этом предполагается создание верхнего слоя асфальтобетона толщиной 4-5 см, который может быть уложен на слой традиционного асфальтобетона. Использование предложенной технологии может существенно повысить долговечность асфальтобетонного покрытия, что представляет непосредственный интерес для владельцев частных автодорог.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Л.Б. Гезенцвей. Асфальтовый бетон из активированных минеральных материалов. – М.: Изд-во по строительству, 1971. – 255 с.

МОДЕЛЬ СТРУКТУРНОГО ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА ПЕРВОГО РОДА БЛИЗКОГО КО ВТОРОМУ

Косова Е.Н., Лебедев В.И.
Северо-Кавказский государственный технический университет, Ставрополь

Микроскопические методы исследования структурных фазовых переходов (СФП), показали, что мягкая мода прекращает свое смягчение и возникает узкий центральный пик, свидетельствующий о появлении переходной области и появлении ближнего порядка, проявляющегося в кластерах. Поэтому представляется весьма актуальным аналитическое описание СФП с образованием кластеров новой структуры.

Предлагается модель $\{j^3 j^4\}$ описания структурных фазовых переходов первого рода близких ко второму роду с помощью гамильтониана связанных ангармонических осцилляторов:

$$H = \sum_i \{\frac{p_i^2}{2m} + V_1(R_i)\} + \frac{1}{2}\sum_{1\le i<j\le N} V_2(R_i, R_j) \quad (1)$$

в поле несимметричного одночастичного двухъямного потенциала:

$$V_1(R_i) = \frac{A}{2}R_i^2 - \frac{D}{3}R_i^3 + \frac{B}{4}R_i^4 . \quad (2)$$

В зависимости от соотношения параметров данный потенциал может принимать симметричную форму и описывать непрерывный СФП или асимметричный и тогда, описывать СФП первого рода близких ко второму. Парный потенциал с силовыми константанами определяет взаимодействие активных при СФП атомов в соседних ячейках.

Гамильтониан (1) описывает «быстрые» степени свободы, характеризующие движения частиц в фононных модах и «медленные» степени свободы, которые проявляются в кластерах. Для их описания используется формула:

$$l_s \cong 0,\ l_{ms} = [\frac{1}{2} + \frac{1}{2}\sqrt{1 - 4\frac{AB}{D^2}}]\frac{D}{B},$$

где l_i – среднее равновесное положение ячейки, которое при фазовом переходе зависит от температуры и может быть вычислено как для метастабильной фазы в низкотемпературной области, так и в стабильной фазе в высокотемпературной области.

В случае, если энергия вибрационного движения атома меньше энергии одночастичного барьера, имеем низкотемпературную фазы. Атомы активные при фазовом переходе располагаются в более глубоком минимуме. В функции распределения равновесных положений атомов, имеется один острый пик, который указывает, что атомы находятся в низкотемпературной фазе и одинаково смещены в двухямном потенциале.

При увеличении температуры становится возможным заполнение другой ямы, что означает появление кластеров другой фазы в старой фазе и тогда имеем метастабильную фазу. При дальнейшем увеличении температуры энергия атомов увеличивается, и при переходе в критической точке покидают минимум и переходят в стабильную фазу. Функция распределения равновесных положений имеет один пик с центром в нуле и это означает, что частицы в высокотемпературной фазе находятся выше горба двухямного потенциала. При переходе из низкотемпературной фазы в стабильную в критической точке происходит скачек температурной зависимости среднего равновесного положения.

Гамильтониан (1) приближенно можно представить в виде суммы двух эффективных гамильтонианов для нелинейных возбуждений типа доменных стенок $H_к$ и фононов $H_ф$. с коэффициентами перенормировки, учитывающие кинк-фононное взаимодействие. Обоснованием разделения переменных в (1) является большая разница для характерных времен фононных и кинковых возбуждений системы $H = H_0 + H_к + H_ф$.

В модели $\{j^3 j^4\}$ параметром порядка является среднее смещение атома из своего положения в узле решетки. Поведение параметра порядка с изменением температуры имеет характерный вид для фазовых переходов первого рода близких ко второму роду.

В фононном спектре «мягкой» моды метастабильной фазы имеется сдвиг относительно спектра фононов в стабильной фазе за счёт кластеров с различной симметрией, а квадрат её частоты испытывает типичный для СФП первого рода скачёк при температуре СФП.

Аналитический расчет теплоемкости дает типичную для теории Ландау и теории среднего поля картину скачков теплоемкости для разных фаз, и частично учитывает вклад флуктуаций параметра порядка вблизи температуры перехода и дает слабую l - зависимость теплоемкости.

Для описания кинковой подсистемы на основе гамильтониана (1) получено уравнение Эйлера-Лагранжа, которое дает солитоноподобное решение. Наличие отрицательных значений энергии солитонов указывает на энергетическую выгодность системе образовывать солитоны в этой области температур.

Кинковая подсистема является ответственной за сдвиг фононных частот в усредненной решетке с кластерами разной фазы и за квазиупругий центральный пик в законе рассеяния, связанный с рассеянием излучения на стенках кластеров вблизи СФП.

МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУРНЫХ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ В ПЛЁНКАХ

Лебедев В.И., Мизина В.В.
Северо-Кавказский государственный технический университет, Ставрополь

Для исследования различных характеристик плёнок большой интерес представляют данные о динамике адсорбированных атомов. Атомы на поверхности находятся в иной координации, чем в объёме, что приводит к изменению динамических постоянных связей их с соседними атомами, а, следовательно, к изменению амплитуд и изотропности их колебаний.

Адекватное описание поведения адсорбированных атомов достигается не только при учёте влияния латерального взаимодействия частиц на перестройку спектра фононов в плёнке, но и влияния поля подложки. Основой для построения самосогласованной теории может служить метод двухвременных функций Грина, являющийся современным языком изучения коллективных возбуждений в конденсированных системах.

Рассмотрим простейшую модель, в которой пленка представлена в виде динамической двумерной решетки на подложке, испытывающей фазовый переход I рода. Гамильтониан такой модели определим классическим образом:

$$\mathrm{H}=\sum\left\{\frac{p_i^2}{2m}+V_1(R_i)\right\}+\frac{1}{2}\sum V_2(R_i,R_j), \qquad (1)$$

где $V_1(R_i)$ – одночастичный псевдопотенциал с собственной симметрией, описывающий силовое поле подложки, $V_2(R_i,R_j)$ – парный межчастичный потенциал взаимодействия частиц в пленке.

Общий вид потенциалов $V_1(R_i)$ и $V_2(R_i,R_j)$ зависит от характера взаимодействия плёнки с подложкой и латерального взаимодействия в плёнке. Если потенциал $V_1(R_i)$ выбрать в виде:

$$V_1(R_i)=\frac{A}{2}R_i^2-\frac{D}{3}R_i^3+\frac{B}{4}R_i^4, \qquad (2)$$

где A, D, B – положительные зависящие от температуры подложки функции, то получим ангармонический одночастичный псевдопотенциал поля подложки

Аналогично для парного межчастичного потенциала возможно следующее представление:

$$V_2(R_i,R_j)=\frac{a}{2}(R_i-R_j)^2+ \\ +\frac{j}{3}(R_i-R_j)^3+\frac{b}{4}(R_i-R_j)^4, \qquad (3)$$

где α, β, и φ – силовые константы, определяющие взаимодействие соседних частиц пленки.

Соотношения (1), (2), и (3) определяют модель ангармонически связанных осцилляторов – адсорбированных атомов – в ассиметричной потенциальной яме поля подложки – модель {φ3-φ4}. В отличии от симметричной модели гармонически связанных осцилляторов эта модель для случая $d \geq 2$ будет иметь возможность описывать «метастабильные» состояния атомов в локальных минимумах, а значит описывать СФП I рода.

В зависимости от соотношения силовых констант потенциалов $V_1(R_i)$ и $V_2(R_i, R_j)$ возможны различные случаи расположения потенциалов друг относительно друга. Если координаты локальных минимумов совпадают, параметры решетки и пленки соразмерны, происходит фазовый переход в соразмерную фазу. Тогда параметр решётки образующейся на поверхности структуры будет совпадать с параметром решётки подложки. Если же координаты локальных минимумов не совпадают, имеет место фазовый переход в несоразмерную фазу.

Исследование предложенной модели методом функций Грина позволяет проследить влияние поля подложки на различные динамические и термодинамические свойства пленки, проследить особенности структурных фазовых переходов. Увеличение гармонической константы потенциала подложки A приводит к увеличению температуры перехода, однако уменьшает скачок среднего расстояния. Увеличение же ангармонической константы D потенциала подложки, напротив, уменьшает температуру перехода, одновременно увеличивая скачок среднего расстояния.

Получено выражение, определяющее спектр возможных возбуждений в пленке вблизи точки фазового перехода. Наличие поля подложки приводит к сдвигу дисперсионных кривых вдоль оси ω; латеральное взаимодействие между частицами плёнки влияет на быстроту изменения частоты с изменением волнового вектора, а потому увеличение латерального взаимодействия приводит к увеличению щели между фононными спектрами в стабильной и метастабильной фазе.

Скачкообразное изменение среднего расстояния атома плёнки приводит к скачкообразному изменению энергии. При этом величина скачка энергии зависит от ангармонической константы потенциала подложки, тогда как зависимость от гармонической константы выражена слабо. Аналитический расчёт теплоёмкости даёт типичную для теории Ландау картину скачков теплоёмкости для разных фаз.