

**КЫРГЫЗСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ТЕХНИЧЕСКИЙ
УНИВЕРСИТЕТ им. И. РАЗЗАКОВА**

ДИССЕРТАЦИОННЫЙ СОВЕТ Д 01.07.351

На правах рукописи

УДК 539.372;539.374

АМАНБАЕВА ГУЛНАРА МУКТАРОВНА

**МАКРОКИНЕТИКА СВЕРХПЛАСТИЧНОСТИ ПРОМЫШЛЕННЫХ
АЛЮМИНИЕВЫХ СПЛАВОВ**

01.02.04 – механика деформируемого твердого

**ДИССЕРТАЦИЯ НА СОИСКАНИЕ УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ
КАНДИДАТА ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИХ НАУК**

Научный руководитель – доктор физико-математических наук, профессор Рудаев Я.И.

БИШКЕК – 2007

Содержание

Введение	4
1. Фазовые переходы и динамическая сверхпластичность	12
1.1. Термодинамика фазовых переходов.....	12
1.2. Теория фазовых переходов второго рода Ландау	29
1.3. Синергетическое описание неравновесных фазовых переходов и сверхпластичность	44
Выводы	52
2. Математическое моделирование процессов высокотемпературной деформации промышленных алюминиевых сплавов	53
2.1. Основные предпосылки модели.....	53
2.2. Об аналитических условиях перехода алюминиевых сплавов в сверхпластическое состояние при одноосном растяжении	56
2.3. Уравнение состояния	61
2.4. Кинетические уравнения	64
Выводы	69
3. Элементы самоорганизации при динамической сверхпластичности	70
3.1. Некоторые особенности теории фазовых переходов Ландау	70
3.2. О возможностях метода ренормализационной группы Вильсона	73
3.3. Сверхпластичность как размытый фазовый переход	74
3.4. Вероятностная оценка параметра порядка.	76
3.5. Удельная теплоемкость.....	79
3.6. Энтропийная оценка модели	84
Выводы	100
4. Макрокинетика механизмов деформации	101
4.1. К теории стохастических процессов	101
4.2. Марковские процессы. Уравнение Чепмена – Колмогорова (Смолуховского)	103
4.3. Уравнение Фоккера - Планка	105

4.4. Моделирование механизмов деформации при динамической сверхпластичности алюминиевых сплавов.....	109
4.5. Диффузионная оценка процесса деформации.....	123
Выводы	131
Заключение	132
Список литературы.....	134

ВВЕДЕНИЕ

Требование резкого увеличения темпов развития экономики на основе научно-технического прогресса и интенсификации народного хозяйства, повышения его эффективности и качества всех видов выпускаемой продукции ставят задачи создания и внедрения технологических процессов и оборудования, которые в состоянии обеспечить качественный скачок не только уровня конечной продукции, но и способов ее производства. При этом упор на ресурсосберегающие технологии с использованием которых можно достичь значительной экономии материальных, энергетических и трудовых затрат по сравнению с традиционными методами.

Научно-технический прогресс любой отрасли определяется не только технологией производства, но и применяемыми материалами. Важнейшую роль в машиностроении играют металлические материалы, определяющее значение которых сохранится, на наш взгляд, в течение длительного периода времени. Поэтому разработка интенсивных методов металлургического и заготовительного производства позволит наиболее эффективно внедрить ресурсосберегающие процессы, чтобы максимально приблизить используемые в дальнейшем металлургические изделия и заготовки по массе, форме и качеству к готовым деталям узлов и машин. Замена процессов механической обработки на малоотходные и безотходные технологии обработки металлов давлением на базе кузнечно-штамповочного, прессового и прокатного производств может быть основополагающей. Успехи указанных способов металлургического производства, достигнутые в последние годы, опираются, главным образом, на совершенствование традиционных теории и практики обработки металлов давлением, созданием новых видов высокопроизводительного, высокоомощного, универсального технологического оборудования.

Из новейших достижений в изучении поведения металлов и сплавов при деформировании, использующих результаты исследований в металловедении,

физике металлов, механике сплошных сред и обработке давлением, достаточно перспективной считается практическая реализация эффекта сверхпластичности.

Явление сверхпластичности можно считать научной и технологической новинкой лишь по той причине, что в 60-х годах XX в. проблема была сформулирована и начаты систематические исследования не только по выяснению микромеханизмов, но и в области промышленного использования.

Первые исследования, приведшие к введению, ставшего международным, термина сверхпластичность, проведены А.А. Бочваром и З.А. Свидерской в 1945 г. [1]. Естественно, что с расширением и углублением исследований менялись представления об эффектах, объединенных названием сверхпластичность.

В анализе природы и, как следствие, существующих определений понятия сверхпластического течения металлов и сплавов можно выделить два подхода. Первый из них заключается в сопоставлении механизмов деформации с феноменологическими признаками эффекта. Другая концепция состоит в рассмотрении сверхпластичности с термодинамических позиций.

В [2] под сверхпластичностью понимается способность металлических материалов к аномально высокому удлинению. К характерным признакам сверхпластичности относятся: резкое увеличение ресурсов пластичности, заметное снижение усилия деформирования при практическом отсутствии деформационного упрочнения, сильная зависимость напряжения течения от скорости деформации.

Сверхпластичность в [3] рассматривается как особый вид пластичности, расшифровываемый отдельно для микрозеренной (структурой) сверхпластичности и сверхпластичности превращения. Для сверхпластичности микрозеренного типа главным механизмом деформации предполагается зернограницное скольжение, включающее смену соседей зерен.

Механизм сверхпластичности превращения считается надежно не установленным и, следовательно, не может служить отличительным признаком. Поэтому делается совершенно логичный вывод – общее определение

сверхпластичности могут дать только феноменологические признаки, найденные в результате изучения механики деформации. В соответствии с этим, сверхпластичность определяется как способность металлических материалов квазиравномерно деформироваться с высокой скоростной чувствительностью напряжения течения ($m > 0,2...0,3$). Данная формулировка фактически находится в полном соответствии с [4].

В приведенных определениях внимание акцентировано на следствии (большая деформационная способность при низком уровне напряжений), но неизвестной остается причина аномалий.

Более с физической точки зрения обоснованное определение эффекта сверхпластичности приведено в [5]. Под сверхпластичностью понимается состояние материала, при котором возможность деформирования без разрушения резко возрастает с одновременным снижением напряжения течения. Здесь сверхпластичность, в отличие от ранее обсужденных представлений, считается состоянием материала. Другими словами, делается попытка дать сверхпластичности термодинамическое осмысление.

Очень интересно и довольно точное с термодинамических позиций определение сверхпластичности сформулировано в [6]. Сверхпластичность считается особым состоянием материала, способного к большой деформации. Согласно [6] могут быть реализованы следующие виды сверхпластической деформации:

- а) структурная (микррозеренная), проявляющаяся при исходном мелком зерне и в определенных температурно- скоростных условиях;
- б) субкритическая, обусловленная так называемым состоянием предпревращения;
- в) мартенситная, наблюдаемая во время мартенситного превращения;
- г) рекристаллизационная, возникающая в процесс динамической рекристаллизации.

Приведенному определению вполне соответствует гипотеза о физической природе сверхпластичности как о суперпозиции деформации и одного или

нескольких превращений [7]. Другими словами, утверждается, что сверхпластические свойства могут демонстрировать сплавы, для которых в определенных условиях характерно совмещение деформации с формированием мелкозернистой структуры.

Итак, обобщая сказанное, можно утверждать, что использование эффекта сверхпластичности – уникального свойства многих конструкционных металлов и сплавов – создает предпосылки применения технологических режимов обработки с пониженным сопротивлением деформированию, с высоким качеством конечного продукта и, естественно, с меньшими энергозатратами.

Строгую постановку и решение возникающих при этом теоретических и практических проблем нельзя считать окончательно сформулированными. Настоящая работа содержит результаты, позволяющие продвинуться в осмыслении и использовании сверхпластичности ряда промышленных алюминиевых сплавов, структура которых специально не готовится.

Актуальность

Динамическая сверхпластичность в отличие от микрозернистой (структурной) реализуется в металлах и сплавах без специальной подготовки ультрамелкого зерна. Более того, в определенных температурно – скоростных режимах исходная структура (литая или деформированная) измельчением зерна переводится в готовую к сверхпластичности и осуществляется сам эффект. Следовательно, при нагреве и деформации происходит структурный фазовый переход. Для промышленных алюминиевых сплавов таким необратимым переходом является динамическая рекристаллизация, в процессе которой исходное зерно раздробляется, а структура становится равноосной ультрамелкозернистой с дальнейшим переходом к крупнозернистой рекристаллизованной. Модель, сформулированная с позиций механики деформируемого твердого тела, адекватно отражает накопленные экспериментальные данные и описывает закономерности высокотемпературной деформации не только при сверхпластичности, но и в пограничных областях термопластичности и высокотемпературной ползучести.

Естественно оценить модель с точки зрения определения представляющих реальный интерес физических величин, которые можно определить при известном аналитическом выражении плотности термодинамического потенциала. Исследование реакции неравновесной системы на поведение термодинамических функций отклика – удельной теплоемкости и энтропии – позволяет установить особенности развития необратимых размытых фазовых переходов, наблюдаемых в условиях динамической сверхпластичности алюминиевых сплавов. Для моделирования макрокинетики с оценкой вкладов различных форм массопереноса в процесс накопления необратимых деформаций становится необходимым привлечение методов неравновесной механики. Сказанное определяет актуальность исследований, результаты которых изложены в настоящей диссертации

Связь темы диссертации с научными программами.

Работа выполнялась в рамках проекта Министерства образования Кыргызской Республики ОФГН-035 “Разработка и опытное опробование высокоэффективных технологических процессов обработки давлением в режимах сверхпластичности” и Программы “Механика динамической сверхпластичности”, разрабатываемой в Кыргызско – Российском Славянском университете.

Целью работы является разработка модели, описывающей макрокинетику сверхпластической деформации динамического типа с привлечением неравновесной статистической механики.

Научная новизна

1. Сформулировано условие непрерывности функции удельной теплоемкости в термомеханических режимах сверхпластичности.
2. Определен вид функции приращения удельной теплоемкости, пикообразным характером которой в термических режимах сверхпластичности достигается связь эффекта с размытым неравновесным фазовым переходом – динамической рекристаллизацией.

3. Достигнуто соответствие минимума производства энтропии при сверхпластичности формированию упорядоченной ультрамелкозернистой структуры.

4. Предложена на базе стационарного варианта уравнения Фоккера – Планка макрокинетическая модель, пригодная для описания в термических диапазонах сверхпластичности суперпозиции систематического трения и диффузионных процессов, причем в качестве функции распределения вероятности принято приращение удельной теплоемкости.

5. Получено с привлечением макрокинетической модели явное выражение для функции, характеризующей механизм проскальзывания по границам зерен (коэффициент “дрейфа”), превалирующего при сверхпластичности.

6. Предложено вне скоростного диапазона сверхпластичности ответственность за процесс накопления необратимых деформаций возложить на коэффициент диффузии.

Достоверность полученных результатов

Достоверность результатов обеспечена корректным использованием модельных представлений, привлекаемых для описания закономерностей сверхпластического течения, в совокупности с методами неравновесной статистической механики.

Практическая значимость полученных результатов определяется тем, что с позиций неравновесной статистической механики можно исследовать в условиях, далеких от термодинамического равновесия, процесс формирования при сверхпластичности упорядоченной ультрамелкозернистой структуры. Полученные результаты могут быть использованы при постановке и решении задач объемного формоизменения на базе управляемой сверхпластической деформации.

Основные положения диссертации, выносимые на защиту:

– привлечение модели, пригодной для описания закономерностей высокотемпературной деформации промышленных алюминиевых сплавов в

широких скоростных диапазонах, включая сверхпластичность, к оценке вкладов различных форм массопереноса в процесс накопления необратимых деформаций;

- обоснование непрерывности функции удельной теплоемкости;
- вероятностная оценка параметра порядка;
- определение функций приращений удельной теплоемкости и энтропии;
- формулировка макрокинетической модели;
- оценка механизмов деформации в широком диапазоне скоростей в термических условиях сверхпластичности.

Личный вклад соискателя:

- проведено сопоставление подходов к описанию фазовых переходов в равновесных и неравновесных системах;
- осуществлена вероятностная оценка параметра порядка;
- определены термодинамические функции отклика – удельная теплоемкость и энтропия;
- конкретизирована с использованием приращения функции удельной теплоемкости макрокинетическая модель для описания механизмов деформации;
- проинтегрированы дифференциальные уравнения, вытекающие из модели, в результате решения которых установлен вид функций, ответственных за реализацию механизмов зернограницного проскальзывания и диффузионные процессы.

Апробация результатов диссертации

Основные положения диссертационной работы докладывались и обсуждались на IV Международной научной конференции “Прочность и разрушение материалов и конструкций” (г. Оренбург, 15 – 17 февраль 2005г.); Международной научной конференции “Актуальные проблемы механики и машиностроения” (г. Алматы, 17-19 июнь 2005г.); XXXIV Международной летней школе “Advanced Problems in Mechanics” (APM-2006) (г. Санкт – Петербург (Репино), 25 июня – 1 июля 2006г.); Международной научно-

технической конференции “Инновации в образовании, науке и технике” (г. Бишкек, 22-24 июнь 2006г.); на семинарах кафедры механики Кыргызско-Российского Славянского университета (г. Бишкек).

Публикации

Результаты работы опубликованы в девяти научных статьях и тезисах.

Структура и объем диссертации

Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения и списка использованных источников. Общий объем 139 страницы, включая 39 рисунков и 2 таблицы. Библиографический список включает 74 наименования.

Автор считает своим долгом выразить глубокую благодарность научному руководителю д.ф.-м.н., профессору Я.И. Рудаеву за ценные консультации и постоянное внимание к настоящей работе.

I. ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ И ДИНАМИЧЕСКАЯ СВЕРХПЛАСТИЧНОСТЬ

1.1. Термодинамика фазовых переходов

Изучение фазовых переходов позволяет лучше понимать некоторые физические процессы, предшествующие и сопутствующие этим переходам, что очень важно для создания теории деформации твердого тела [8]. Необычное поведение ряда важных физических характеристик (теплоемкости, теплопроводности, диэлектрической и магнитной проницаемости, упругих, оптических и др. свойств) в области фазового перехода успешно используется в различных автоматических устройствах, радиотехнике, лазерных устройствах и т.д. Следовательно, теоретические исследования фазовых переходов в твердом теле представляют интерес в двух аспектах: 1) с точки зрения изучения фундаментальных закономерностей фазовых переходов, 2) с точки зрения создания веществ с заранее заданными оптимальными физически–механическими свойствами, что, безусловно, имеет большое значение для науки и техники [9].

В настоящее время теоретические исследования фазовых переходов проводятся различными методами. Фазовые переходы по своему существу относятся к явлениям, изучаемым нелинейной физикой. Согласно существующей классификации характер четких обратимых фазовых переходов полностью зависит от поведения производных термодинамического потенциала. Это приводит к понятиям фазовых переходов первого и второго родов. Многие экспериментальные данные показывают, что фазовый переход (ФП) первого и фазовый переход второго рода (ФП_I и ФП_{II}) представляют только некоторые предельные, идеализированные переходы. Теперь известно много случаев, когда вариацией внутренних и внешних факторов можно целенаправленно изменить степень принадлежности данного реального ФП к

идеализированным типам ФП и ФПП. Этот вопрос связан с проблемами размытых фазовых переходов (РФП).

Основные различия между четкими ФП и РФП проявляются главным образом, в двух аспектах. Во-первых, многие физические величины, которые согласно термодинамической теории в точке ФП должны стремиться к бесконечности, практически, хотя и достигают достаточно больших значений, все же остаются конечными. Например, температурная зависимость ряда физических величин проходит через максимум или минимум.

Во-вторых, РФП протекает не при одной, строго определенной температуре (температура или точка ФП), а в некотором более или менее выраженном интервале температур (область температур ФП). То же самое относится не только к температуре, но и к другим параметрам системы, позволяющим характеризовать процесс ФП [1].

В связи с этим в последнее время термин ФП часто употребляется не в том строгом смысле, который придается ему классической термодинамикой, где условием проявления ФП является разрыв производной термодинамического потенциала, а в более широком. При этом под ФП следует понимать изменение характера температурной или другой зависимости любого измеряемого свойства, вызываемого конкретными структурными изменениями.

В теории РФП имеется ряд специфических задач по сравнению с теорией четких ФП. К таким, например, относятся: 1) выяснение причин, вызывающих появление РФП, 2) расчет или оценка интервала размытия ФП конкретной физической системы, 3) изучение основных физических характеристик системы. Центральным вопросом теории РФП, несомненно, является выяснение причин их появления. В настоящее время установлено, что основными общими причинами, приводящими к РФП, являются: 1) крупномасштабная неоднородность физической системы, 2) флуктуации (многостадийность) физических величин, характеризующих состояние системы в области ФП, 3) влияние различных внутренних и внешних полей, 4) поверхностные (геометрические) эффекты.

Рассмотрим проявление свойств РФП. Пусть определенную фазу в системе характеризует равновесный параметр порядка η . Согласно методу Ландау, этот параметр отличен от нуля для упорядоченной фазы и равен нулю для неупорядоченной фазы. Температурная зависимость скалярного параметра порядка для четких ФП и ФПП соответственно имеет вид, представленный на рис. 1.1. Как видно, ФП происходит при строго определенной температуре θ_c . Если ввести функцию включения $L(\theta)$, характеризующую фазовое состояние системы, равную относительной доле одной определённой, например, первой фазы в системе, то поведение указанной функции одинаково для ФП и ФПП (рис.1.2). Аналогичным образом можно представить размытые ФП и ФПП (рис.1.3). Размытие этих ФП происходит в некотором интервале температур и для функции включения представлено на рис. 1.4. Как видно из рис. 1.2 и рис. 1.4, представление ФП через функцию включения $L(\theta)$ однотипно для ФП и ФПП. Поэтому это представление называют также приведенным представлением ФП. Таким образом, размытие ФП можно характеризовать приведенным температурным представлением функции включения. Для четких ФП это представление имеет прямоугольный вид (см. рис. 1.2), а РФП характеризуется некоторым «хвостом» вблизи температуры ФП (см. рис. 1.4). В настоящее время температурное представление (обычное для параметра порядка и приведенное для функции включения) является одним из распространенных способов описания РФП.

Другое возможное представление функции $L(t)$, где t – время, является временным. В классической теории ФП смена фаз, происходящая при постепенном изменении параметров, задающих равновесное и стабильное состояние той или другой фазы, происходит практически в момент времени t_c (см. рис. 1.4). В реальных системах смена фаз осуществляется в некотором интервале времени, сравнимом со временем релаксации, что приводит к размытию временного представления $L(t)$.

Наконец, возможен также случай пространственного представления функции включения $L(x,y,z)=L(r)$. Пусть задана произвольная система при

заданной температуре вблизи точки ФП, в которой происходят фазовые флуктуации в виде зародышей. Такую систему можно рассматривать как некоторую матрицу одной фазы, в которой включены области другой фазы. Таким образом, пространственная зависимость – функция включения $L(r)$, отличная от постоянного значения, всегда свидетельствует о некотором размытии ФП.

Другой, более глубокий, анализ взаимосвязи пространственного распределения фаз с характером ФП связан с понятием самой фазы. Как известно, с термодинамической точки зрения фазой называется однородное состояние вещества в случае однородных систем и совокупность гомогенных частей гетерогенной системы, обладающих одинаковым составом и одинаковыми термодинамическими свойствами, не зависящими от массы [10]. Такая совокупность частей обладает одинаковыми физическими и химическими свойствами [11]. В приведенном определении предполагается, что система не находится под действием внешнего поля; при наличии такого поля свойства фазы в разных точках могут быть неодинаковыми. Однако они должны стать одинаковыми, если ввести систему из указанного поля [10]. Сосуществующие фазы отделены друг от друга поверхностями раздела, представляющими собой слой конечной толщины, в которых в направлении от одной фазы к другой изменяется на конечную величину, по крайней мере, один из параметров системы. Поверхность раздела по отношению к граничащим фазам обладает избыточной энергией [11].

В строгом смысле термин фаза применим лишь к соответствующим частям равновесной системы. Попытки применить его к неравновесным системам до сих пор были не вполне удачными [10].

С микроскопической точки зрения данную фазу можно характеризовать, учитывая физическую интерпретацию упорядочения, например, направлением спонтанной поляризации в сегнетоэлектриках или спонтанной намагниченности в ферромагнетиках и т.д. Если рассматривать систему, состоящую из двух доменов с противоположным направлением спонтанной

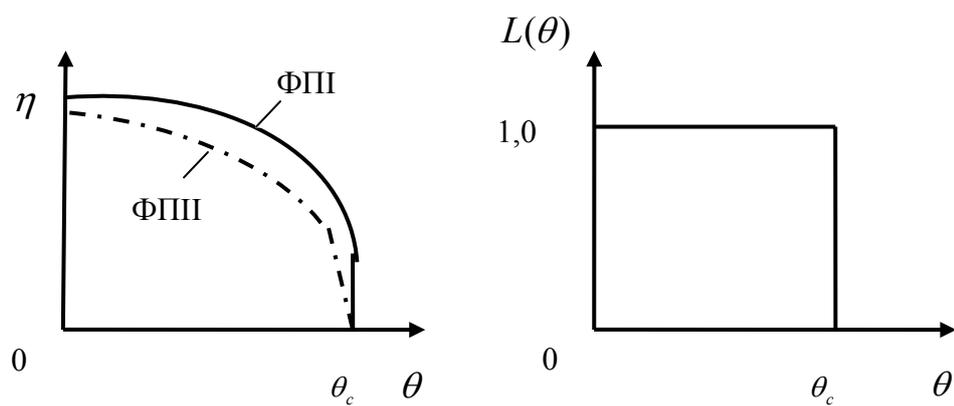


Рис. 1.1. Зависимость параметра порядка η от температуры при четках $\Phi\Pi$ и $\Phi\Pi\Pi$.

Рис. 1.2. Зависимость функции включения $L(\theta)$ от температуры при четках $\Phi\Pi$ и $\Phi\Pi\Pi$.

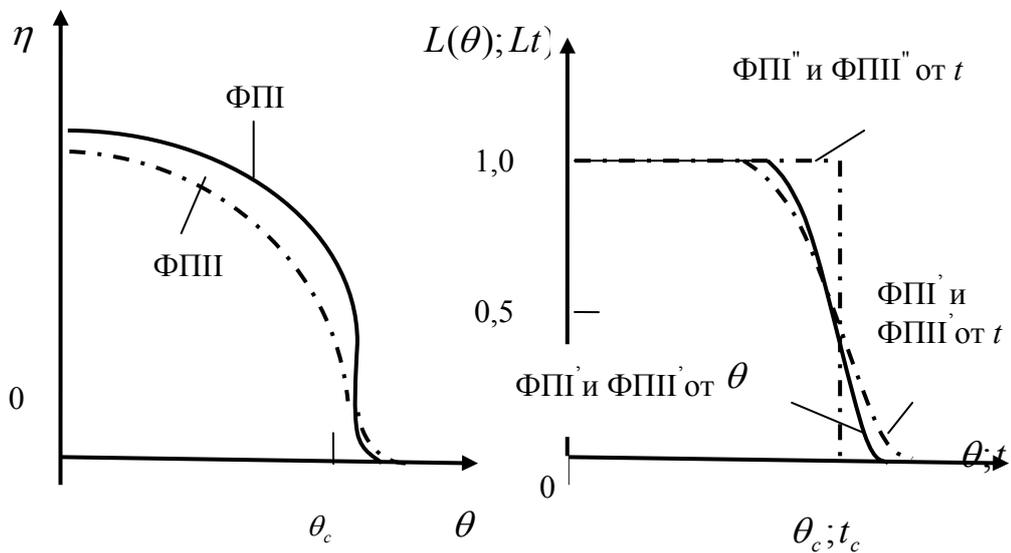


Рис. 1.3. Зависимость параметра порядка η от температуры θ при размытых ФП и ФПШ.

Рис. 1.4. Зависимость функции включения $L(\theta)$ от температуры θ и времени t при размытых (') и четких (") ФП и ФПШ.

поляризации (намагниченности), то параметр порядка становится функцией координат.

Из вышеизложенного следует, что в реальных системах РФП может проявляться в качестве температурного, временного и пространственного РФП. Температурный РФП чаще всего интерпретируется с помощью сосуществования фаз в некотором интервале температур (интервал размытия ФП). Временной РФП определяется эволюцией ФП и также может осуществляться как путем сосуществования фаз, так и с помощью промежуточных фаз (многостадийно). При пространственном РФП смена двух фаз обычно совершается путем промежуточных фаз. Это весьма наглядно можно иллюстрировать случаем ферромагнетиков. Вращение вектора спонтанной намагниченности (параметра порядка) соответствует прохождению совокупности промежуточных фаз, поскольку каждой ориентации намагниченности соответствует своя фаза.

Любой РФП связан с некоторым балансом ряда различных микроскопических механизмов. В случае РФП ярче, чем в четком ФП, проявляется кинетика ФП, поскольку последний растянут или различен в интервале изменения соответствующих параметров. Такой эффект позволяет проследить смену фаз. В области РФП возникают такие физические явления, которые в обычных условиях подавляются другими, более интенсивными эффектами. В процессе РФП проявляется ряд свойств, которые в подходящих условиях могут дать новую информацию о свойствах и структуре системы.

В окрестности РФП вещество находится в особом состоянии, характеризуемом аномальными свойствами некоторых параметров.

Несмотря на расширяющееся практическое применение различных монокристаллов, используемые в технике кристаллические материалы являются, в основном, гетерофазными. Под гетерофазной структурой следует понимать многофазную систему, которая предполагает наличие формы, размера и взаимного расположения отдельных фазовых составляющих, а также строение межфазных границ [12]. В качестве примера гетерофазной структуры

твердых тел можно рассматривать поликристаллы, состоящие из различно ориентированных областей одной и той же фазы, разделенных границами.

Более того, в последние годы явно наметилась тенденция получения искусственных гетерофазных композиций (эптаксиальных систем, композиционных материалов) из весьма совершенных монокристаллов. Управление гетерофазной структурой является одним из наиболее эффективных способов направленного изменения свойств кристаллических материалов.

Межфазная граница обычно является размытой и представляет собой промежуточный слой, в котором степень упорядочения постепенно меняется от значений, отвечающих исходной фазе, до значений, соответствующих образующей фазе. В более общем плане межфазная граница рассматривается как некоторый двумерный дефект в кристалле, движение которого приводит к развитию ФП. Перемещение межфазной границы сопровождается изменением свободной энергии всей системы. Изменение энергии, соответствующее изменению конфигурации границы в данной точке, играет роль локальной силы, действующей на границу. Для исследования кинетики перемещения границы необходимо рассмотреть энергетические барьеры, которые преодолеваются при движении, и которые существенно зависят от соотношения между величинами силы, действующей на нее. При достаточно малых силах движение границы сопровождается увеличением энергии. Соответствующий энергетический барьер преодолевается за счет тепловых флуктуаций, а движение границы имеет термически активируемый характер. Как частный случай межфазных границ можно рассматривать также дислокации – линейные границы областей скольжения в кристалле. Проблема их генерации и движения во многом аналогична проблеме зарождения и роста новой фазы, и между теорией пластической деформации и теорией ФП имеется определенная общность [8].

В настоящее время используют более общую классификацию ФП, основанную на поведении частных производных термодинамических функций

в точке ФП. Такая классификация была предложена П. Эренфестом в 1933 году [13].

В некоторых случаях ФП рассматривается в независимых переменных P и θ , где P – давление, θ – абсолютная температура. В качестве термодинамической функции выбирается термодинамический потенциал $\Phi(\theta, P)$. В зависимости от поведения частных производных все ФП делятся на две группы.

а) Фазовые переходы первого рода характеризуются скачкообразным изменением ряда свойств вещества. Скачкообразно изменяются при переходе через кривую фазового равновесия объем V и энтропия S и, как следствие этого, свободная энергия Гельмгольца F , энтальпия W и теплоемкость C . В то же время, свободная энергия Гиббса Φ (термодинамический потенциал) при фазовом переходе первого рода скачка не испытывает. К фазовым переходам первого рода относятся испарение и конденсация, плавление и кристаллизация, многие переходы из одной кристаллической модификации в другую.

Чтобы понять сущность ФП, рассмотрим физическую интерпретацию условий:

$$\Delta(\theta) = \left(\frac{\partial \Phi_1}{\partial \theta} \right)_c - \left(\frac{\partial \Phi_2}{\partial \theta} \right)_c \neq 0; \quad (1.1)$$

$$\Delta(P) = \left(\frac{\partial \Phi_1}{\partial P} \right)_c - \left(\frac{\partial \Phi_2}{\partial P} \right)_c \neq 0; \quad (1.2)$$

где $\Delta(\theta), \Delta(P)$ – изменения потенциала при постоянном давлении и при постоянной температуре, индекс c означает точку ФП, Φ_1 и Φ_2 – термодинамические потенциалы первой и второй фаз. Фазовые переходы, к которым относятся условия (1.1) и (1.2), называются ФП первого рода (ФП I). Принимая во внимание условия (1.1) и (1.2) и учитывая следующие термодинамические соотношения:

$$\left(\frac{\partial \Phi}{\partial \theta} \right)_p = -S, \quad \left(\frac{\partial \Phi}{\partial P} \right)_\theta = V, \quad (1.3)$$

получаем

$$\Delta(\theta) = S_2 - S_1 = \Delta S \neq 0; \quad (1.4)$$

$$\Delta(P) = V_1 - V_2 = \Delta V \neq 0; \quad (1.5)$$

где индексы 1 и 2 соответствуют первой и второй фазам.

Как видно из (1.4), (1.5), при ФП наблюдается скачкообразное изменение энтропии и объема.

В соответствии со вторым началом термодинамики изменение энтропии системы на величину ΔS связано с температурой ФП. С учетом (1.4) находим:

$$\overline{Q}_c = \theta_c \cdot \Delta(\theta) = \theta_c \cdot \Delta S \quad (1.6)$$

здесь \overline{Q}_c – количество теплоты, θ_c – соответствующая ФП температура.

Понятно, что при ФП выделяется (или поглощается) определенное количество теплоты.

Основное уравнение линейной термодинамики обратимых процессов [6] при этом записано в виде:

$$E = \theta_c \Delta S - P_c \Delta V = \theta_c (S_2 - S_1) + P_c (V_2 - V_1) \neq 0, \quad (1.7)$$

где E – энергия системы.

Из приведенного уравнения с привлечением (1.4), (1.5) следует, что в точке ФП энергия изменяется скачкообразно в полном соответствии с энтропией и объемом.

С помощью (1.4)...(1.7) можно охарактеризовать поведение различных физических величин в точке ФП. Так, изобарическая удельная теплоемкость:

$$C_p = \left(\frac{\partial \overline{Q}_c}{\partial \theta} \right)_p = \theta_c \left(\frac{\partial S}{\partial \theta} \right)_p, \quad (1.8)$$

дает $C_p \rightarrow \infty$ при $\theta = \theta_c$. Подобным же образом в точке ФП к бесконечности стремятся коэффициенты термического расширения $\overline{\alpha}$ и изотермического сжатия $\overline{\beta}$, так как

$$\overline{\alpha} = \frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial \theta} \right)_p, \quad \overline{\beta} = -\frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial p} \right)_\theta. \quad (1.9)$$

Наиболее пригодной для описания ФП является термодинамическая теория. Рассматривая двухфазную однокомпонентную систему и применяя к ней условия равновесия, получаем

$$\frac{dP}{d\theta} = \frac{\Delta S}{\Delta V} = \frac{\overline{Q_c}}{\theta_c \Delta V} \quad (1.10)$$

Установленная зависимость (1.10) связывает наклон кривой фазового равновесия со скачками энтропии и объема данного ФП. Соотношение (1.10) называется уравнением Клапейрона – Клаузиуса и считается основным для всех ФП.

б) При фазовых переходах второго рода скачкообразное изменение объема и энтропии и соответственно энергии и энтальпии не наблюдается. Но теплоемкость и коэффициент теплового расширения в точке перехода изменяются скачкообразно (рис. 1.5). Фазовые переходы второго рода характерны для кристаллов и состоят в изменении при определенной температуре степени симметрии кристалла, т.е. в переходе к более высокой симметрии [14].

Кроме кристаллов фазовый переход второго рода реализуется в жидком гелии вблизи температуры абсолютного нуля. Фазовым переходом второго рода являются также переход железа в парамагнитное состояние в точке Кюри и переход некоторых металлов и сплавов при низких температурах в сверхпроводящее состояние.

Физическую сущность ФП можно описать следующими соотношениями:

$$\Delta(\theta) = \left(\frac{\partial \Phi_1}{\partial \theta} \right)_c - \left(\frac{\partial \Phi_2}{\partial \theta} \right)_c = 0; \quad (1.11)$$

$$\Delta(P) = \left(\frac{\partial \Phi_1}{\partial P} \right)_c - \left(\frac{\partial \Phi_2}{\partial P} \right)_c = 0; \quad (1.12)$$

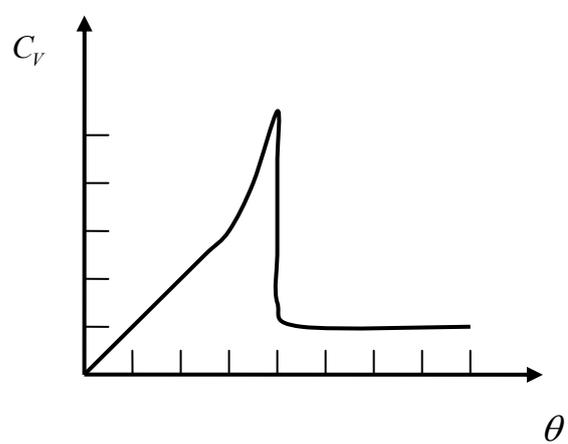


Рис. 1.5. Скачок теплоемкости C_V гелия при фазовом переходе второго рода.

$$\Delta(\theta, \theta) = \left(\frac{\partial^2 \Phi_1}{\partial \theta^2} \right)_c - \left(\frac{\partial^2 \Phi_2}{\partial \theta^2} \right)_c \neq 0; \quad (1.13)$$

$$\Delta(P, P) = \left(\frac{\partial^2 \Phi_1}{\partial P^2} \right)_c - \left(\frac{\partial^2 \Phi_2}{\partial P^2} \right)_c \neq 0; \quad (1.14)$$

$$\Delta(\theta, P) = \left(\frac{\partial^2 \Phi_1}{\partial \theta \partial P} \right)_c - \left(\frac{\partial^2 \Phi_2}{\partial \theta \partial P} \right)_c \neq 0 \quad (1.15)$$

где $\Delta(\theta, \theta)$, $\Delta(P, P)$ и $\Delta(\theta, P)$ – соответствующие скачки вторых производных.

Фазовые переходы в этом случае называются ФП второго рода (ФПШ). При этом в точке перехода первые производные термодинамического потенциала изменяются непрерывно, а вторые – скачкообразно.

Из (1.11) и (1.12) имеем

$$\Delta(\theta) = S_2 - S_1 = \Delta S = 0; \quad (1.16)$$

$$\Delta(P) = V_1 - V_2 = \Delta V = 0. \quad (1.17)$$

Из (1.13) получаем

$$\Delta(\theta, \theta) = \left(\frac{\partial S_2}{\partial \theta} \right)_c - \left(\frac{\partial S_1}{\partial \theta} \right)_c = \frac{\Delta C_p}{\theta_c}, \quad (1.18)$$

где $\Delta C_p = C_{p2} - C_{p1}$ – скачок изобарической теплоемкости в точке ФП Ш.

Подобным же образом из (1.14) и (1.15) находим

$$\Delta(P, P) = \left(\frac{\partial V_1}{\partial P} \right)_c - \left(\frac{\partial V_2}{\partial P} \right)_c = V \cdot \Delta \bar{\beta}; \quad (1.19)$$

$$\Delta(\theta, P) = \left(\frac{\partial V_1}{\partial \theta} \right)_c - \left(\frac{\partial V_2}{\partial \theta} \right)_c = V \cdot \Delta \bar{\alpha}. \quad (1.20)$$

где $\Delta \bar{\beta} = \bar{\beta}_2 - \bar{\beta}_1$, $\Delta \bar{\alpha} = \bar{\alpha}_2 - \bar{\alpha}_1$ – соответственно скачки коэффициентов изотермического сжатия и термического расширения.

Из полученных результатов следует, что при ФПШ непрерывно изменяются объем и энтропия, а скачкообразно – термические коэффициенты

$\bar{\alpha}$ и $\bar{\beta}$, изобарическая теплоемкость C_p . Отсутствие скачка энтропии при ФПП приводит к тому, что при переходе теплота Q_c не выделяется и не поглощается.

Первая термодинамическая теория ФПП была дана П. Эренфестом. Задача, сформулированная в этой теории, состояла в получении соотношений между скачками различных физических величин в точке ФП [14].

Формальное применение уравнения Клапейрона – Клаузиуса к ФПП дает неопределенность вида $0/0$ (поскольку $S_2=S_1$, $V_2=V_1$). Однако можно раскрыть эту неопределенность, применяя правило Лопиталья. Тогда

$$\frac{dP}{d\theta} = \frac{\Delta C_p}{\theta \Delta \left(\frac{\partial V}{\partial \theta} \right)_p}; \quad (1.21)$$

$$\frac{dP}{d\theta} = \frac{-\Delta \left(\frac{\partial V}{\partial \theta} \right)_p}{\Delta \left(\frac{\partial V}{\partial P} \right)_\theta}. \quad (1.22)$$

Соотношения (1.21) и (1.22) связывают скачки физических величин с направлением касательной к кривой фазового равновесия и называются соотношениями Эренфеста.

Исключая из (1.21) и (1.22) производную давления по температуре, получаем формулу

$$\Delta C_p = \theta V \frac{(\Delta \bar{\alpha})^2}{\Delta \bar{\beta}}, \quad (1.23)$$

которую называют уравнением Эренфеста. Зависимость (1.23) часто служит основой для термодинамического анализа ФПП.

С учетом (1.9) уравнение Эренфеста (1.23) принимает следующий вид:

$$\Delta C_p = -\theta \left[\Delta \left(\frac{\partial V}{\partial \theta} \right)_p \right]^2 / \Delta \left(\frac{\partial V}{\partial P} \right)_\theta \quad (1.24)$$

В природе встречаются ситуации, когда вообще трудно сказать, к какому типу относится данный ФП. Существующая классификация в таком случае ФП по Эренфесту [5] слишком упрощенно отражает действительность. Многие

экспериментальные данные заставляют думать, что ФП и ФПП представляют собой лишь некоторые предельные, идеализированные переходы; все же реальные ФП находятся между этими предельными случаями [15].

Первая попытка обобщения классификации ФП была предпринята в работах [16, 17]. Реальные ФП проще всего классифицировать по поведению определенной физической величины, например, теплоемкости. С учетом этого была предложена классификация ФП в твердых телах, согласно которой учитывается поведение теплоемкости ниже точки ФП $\theta < \theta_c$, в самой точке ФП $\theta = \theta_c$ и выше этой точки $\theta > \theta_c$.

Некоторые обобщения классификации ФП можно провести на основе термодинамического потенциала и его производных вблизи точки ФП. Существуют ФП, у которых в точке ФП отмечаются скачки первых и вторых производных термодинамического потенциала по температуре или давлению. Обозначим безразмерные скачки, т.е. отношение соответствующего скачка производной к самой производной, через $\Delta\Phi'$, $\Delta\Phi''$ соответственно. Если $|\Delta\Phi'| \gg |\Delta\Phi''|$, то речь может идти в основном о ФПП, хотя и не чистом. Если же $|\Delta\Phi'| \ll |\Delta\Phi''|$, то имеем такой же ФПП. При $|\Delta\Phi'| > |\Delta\Phi''|$ налицо ФП, близкий к ФП II, и, наоборот, при $|\Delta\Phi'| < |\Delta\Phi''|$ – ФП, близкий к ФП. В частном случае, когда $|\Delta\Phi'| = |\Delta\Phi''|$, вообще нельзя говорить ни о ФП, ни о ФПП. Следовательно, классификация Эренфеста применима только для предельных случаев, когда $\Delta\Phi' \neq 0$ и $\Delta\Phi'' = 0$ (ФП) или $\Delta\Phi' = 0$, $\Delta\Phi'' \neq 0$ (ФПП). Для реальных же ситуаций необходима более широкая классификация, чем только что рассмотренная.

Принципы классификации по Эренфесту можно обобщить, полагая, что точка ФП является своеобразной, особой точкой для термодинамического потенциала, вблизи которой термодинамический потенциал вообще нельзя представить в виде единого разложения по степеням отклонения от значений P_c и θ_c , необходимого для параметров справа и слева от точки ФП. Такое

определение точки ФП применимо как в термодинамике, так и в статистике [18].

Особые точки могут быть разного типа, им соответствуют различные возможные варианты классификации ФП в твердых телах. Отсюда ясно, что схема Эренфеста не является единственной и отнюдь не всегда охватывает все реальные ФП, а соответствует только одному типу поведения производных термодинамического потенциала. Если изменение i -й производной в точке ФП обозначить через $\Delta\Phi^{(i)}(P_c, \theta_c)$, то условия по схеме Эренфеста для ФП n -го порядка записываются в следующем виде:

$$\Delta\Phi^{(i)}(\theta_c, P_c) = \begin{cases} 0 & \text{при } i \neq n; \\ \delta_n & \text{при } i = n, \end{cases} \quad (1.25)$$

где δ_n - соответствующий скачок производной.

В классической схеме классификации ФП характеризуется $\Delta\Phi^1 = \delta_1$ и $\Delta\Phi'' = 0$, а ФП II - $\Delta\Phi' = 0$ и $\Delta\Phi'' = \delta_2$.

Условия (1.25) дают полную совокупность коэффициентов разложения. Если ФП протекает при постоянном давлении, то разложение

$$\Delta\Phi(\theta) = \sum_i \frac{1}{i!} \Delta\Phi^{(i)}(\theta_c) \cdot (\Delta\theta)^i, \quad \Delta\theta = \theta - \theta_c \quad (1.26)$$

служит классификацией по схеме Эренфеста. При ФП n -го порядка получается степенная функция

$$\Delta\Phi(\theta) = \frac{1}{n!} \Delta\Phi^{(n)}(\theta_c) \cdot (\theta - \theta_c)^n,$$

так как все остальные члены суммы равны нулю.

В термодинамической теории любые ФП рассматриваются как точечные явления, протекающие при одной, строго определенной, температуре θ_c . Поэтому в схеме классификации Эренфеста ФП записывается условиями $\Phi(\theta) = \Phi_1(\theta)$ при $\theta < \theta_c$ и $\Phi(\theta) = \Phi_2(\theta) = \Phi_1(\theta) + [\Phi_2(\theta) - \Phi_1(\theta)] = \Phi_1(\theta) + \Delta\Phi(\theta)$ при $\theta > \theta_c$, где Φ_1 и Φ_2 - термодинамические потенциалы первой и второй фаз.

Эти условия можно представить в более компактном виде, если ввести функцию Γ , которая в точке ФП скачкообразно меняется от нуля до единицы:

$$\Gamma(\theta) = \begin{cases} 0 & \theta < \theta_c; \\ 1 & \theta > \theta_c. \end{cases} \quad (1.27)$$

Последнее условие удовлетворяется функциями включения, простейшую из которых можно представить через δ – функцию Дирака:

$$\Gamma(\theta) = \int_0^\theta \delta(\theta - \theta_c) d\theta. \quad (1.28)$$

Следовательно, для четкого ФП получаем

$$\Phi(\theta) = \Phi_1(\theta) + \Delta\Phi(\theta) \cdot \int_0^\theta \delta(\theta - \theta_c) d\theta, \quad (1.29)$$

а для ФП n -го порядка, естественно, будем иметь

$$\Phi(\theta) = \Phi_1(\theta) + \frac{1}{n!} \Delta\Phi^{(n)}(\theta_c) \cdot (\theta - \theta_c)^n \cdot \int_0^\theta \delta(\theta - \theta_c) d\theta. \quad (1.30)$$

Таким образом, в схеме классификации Эренфеста для четких ФП удастся построить термодинамический потенциал для переходов любого порядка (точное решение). Дальнейшие обобщения, выражающиеся (1.27), возможны по двум направлениям. Во – первых, можно рассматривать ФП, у которых имеется определенный спектр скачков δ_i . Тогда вместо (1.30) получаем

$$\begin{aligned} \Phi(\theta) &= \Phi_1(\theta) + \frac{1}{i!} \Delta\Phi^{(i)}(\theta_c) \cdot (\theta - \theta_c)^i \cdot \int_0^\theta \delta(\theta - \theta_c) d\theta = \\ &= \Phi_1(\theta) + \sum_{i=0}^{\infty} \frac{\delta_i}{i!} (\theta - \theta_c)^i \cdot \int_0^\theta \delta(\theta - \theta_c) d\theta \end{aligned} \quad (1.31)$$

Во – вторых, включения можно представить не через δ -функцию, а через другую функцию, соответствующую, например, не скачкообразному переходу между значениями 0 и 1, а плавному изменению. Такое обобщение соответствует РФП. В этом случае

$$\Phi(\theta) = \Phi_1(\theta) + \frac{1}{n!} \Delta\Phi^{(n)} \cdot (\theta - \theta_c)^n \cdot \Gamma(\theta) = \Phi_1 + \Delta\Phi(\theta) \cdot \Gamma(\theta). \quad (1.32)$$

Именно по этому пути идет обобщение термодинамической теории ФП в твердых телах. Основная задача здесь заключается в нахождении явного вида функции включения $\Gamma(\theta)$.

Из (1.32) видно, что функция $\Delta\Phi(\theta) \cdot \Gamma(\theta)$ характеризует связь между термодинамическими потенциалами отдельных фаз.

1.2. Теория фазовых переходов второго рода Ландау

Л.Д. Ландау сформулировал [19] основные принципы феноменологической теории фазовых переходов второго рода, в основе которой лежит идея о спонтанном нарушении симметрии при фазовом переходе. С помощью такого подхода удалось трактовать фазовые переходы различной природы в совершенно различных физических системах с единой точки зрения, охватить их единым математическим аппаратом и показать в определенном смысле универсальность поведения физических систем в окрестности точки $\theta = \theta_c$ (θ_c – критическая температура) фазовых переходов второго рода.

Метод Л.Д. Ландау широко применяется для анализа конкретных фазовых переходов в системах и является основой интерпретации экспериментальных данных о поведении физических характеристик систем вблизи фазового перехода, включая и их поведение при различных внешних воздействиях – давлении, электрическом и магнитном полях, деформации и т.п.

Поведение различных систем вблизи фазовых переходов второго рода может быть понято на основе введенного Ландау [8, 9] понятия параметра порядка η . Параметр η характеризует новое физическое свойство, появляющееся в системе в результате фазового перехода из исходной фазы, в которой оно отсутствовало. В силу непрерывности фазового перехода в самой точке перехода θ_c параметр порядка $\eta = 0$ и монотонно возрастает при удалении от этой точки.

Полная энергия системы представляется в виде суммы членов, описывающих кинетическую и потенциальную энергию. Потенциальная энергия (термодинамический потенциал) Φ является достаточное число раз дифференцируемой функцией от температуры θ , обобщенных сил q и параметра порядка η .

Термодинамический потенциал вследствие малости параметра порядка в окрестности точки фазового перехода может быть разложен по степеням η . Теперь уже хорошо известно [9], что разложение справедливо в окрестности точки θ_c , за исключением узкого интервала вблизи самой точки фазового перехода, в пределах которого велика роль флуктуаций параметра порядка. Предполагая, что процесс имеет место за пределами указанного интервала, запишем разложение в виде:

$$\Phi(\theta, q, \eta) = \Phi_0(\theta, q) + \alpha_1(\theta, q)\eta + \alpha_2(\theta, q)\eta^2 + \alpha_3(\theta, q)\eta^3 + \alpha_4(\theta, q)\eta^4 + \dots, \quad (1.33)$$

где $\Phi_0(\theta, q)$ - значение потенциала в исходной фазе; α_i ($i = 1, \dots, n$) - некоторые параметры системы, зависящие от θ, q .

Равновесное значение параметров порядка определяется из условия минимума потенциала Φ и находится из соотношений

$$\text{а) } \frac{\partial \Phi}{\partial \eta} = 0; \quad \text{б) } \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \eta^2} > 0. \quad (1.34)$$

Если учесть первое уравнение (1.34), то разложение (1.33) не будет содержать линейного по η члена.

Приведем основные аргументы теории Л.Д. Ландау. Для того чтобы в исходной фазе (при $\theta > \theta_c$) равновесное значение $\eta = 0$, необходимо, чтобы $\alpha_2 > 0$. В этом случае заметные изменения в системе отсутствуют. С другой стороны, для появления $\eta \neq 0$ при $\theta < \theta_c$ необходимо, чтобы $\alpha_2 < 0$. Тогда система не остается в состоянии равновесия, и ее положение становится неустойчивым. Следовательно, в самой точке перехода $\alpha_2 = 0$ (рис.1.6).

Рассмотрим вначале случай, когда коэффициент α_3 тождественно равен нулю. Для таких фазовых переходов условие устойчивости (вторая формула (1.34)) в самой точке перехода дает

$$\alpha_4 > 0 . \quad (1.35)$$

Будем предполагать, что в окрестности перехода коэффициент α_4 при всех θ положителен, а α_2 меняет знак. В этих условиях становится термодинамически выгодным появление конечного значения параметра порядка η . Действительно, первое уравнение (1.34) можно записать в виде

$$\eta(\alpha_2 + 2\alpha_4\eta^2) = 0 , \quad (1.36)$$

отсюда следует, что оно имеет два вещественных решения:

$$\begin{aligned} \eta = 0 & \quad \text{для} \quad \theta > \theta_c \quad \text{и} \\ \eta = (-\alpha_2 / 2\alpha_4)^{1/2} \sim (\theta_c - \theta)^{1/2} & \quad \text{для} \quad \theta < \theta_c \end{aligned} \quad (1.37)$$

Таким образом, температура $\theta = \theta_c$ является точкой ветвления решения уравнения (1.36) для равновесного значения параметра порядка. Имея в виду зависимость величин α_2 и α_4 от θ и q , будем называть это уравнение уравнением состояния.

Описанная ситуация иллюстрируется также на рис. 1.7, где возникновение конечных значений параметров порядка при $\theta < \theta_c$ описывается появлением минимумов в термодинамическом потенциале.

Из простых аргументов Ландау вытекает фундаментальный результат (1.37) о температурной зависимости параметра порядка (рис. 1.7) вблизи фазового перехода второго рода. Подчеркнем, что этот результат относится к случаю, когда в разложении термодинамического потенциала по степеням параметра порядка не содержится кубического члена по η . Фазовый переход второго рода имеет место в системах, где коэффициент α_3 при кубическом члене тождественно равен нулю. Однако, если учесть зависимость всех

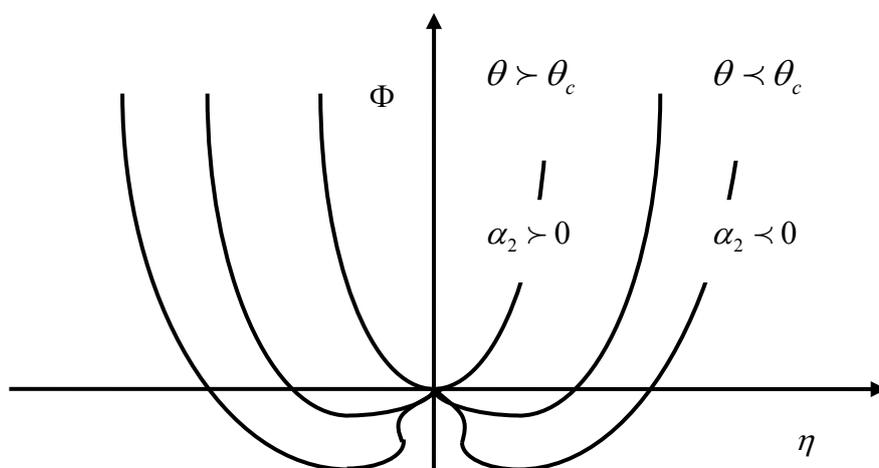


Рис. 1.6. Термодинамический потенциал в окрестности фазового перехода второго рода.

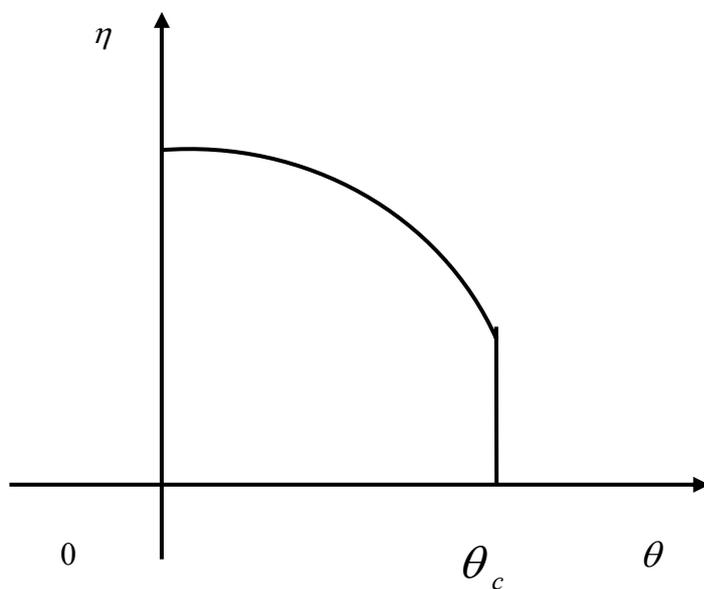


Рис. 1.7. Температурная зависимость параметра порядка в термодинамической теории фазовых переходов второго рода.

коэффициентов разложения термодинамического потенциала не только от температуры, но и от обобщенных сил (внешнее поле), то может оказаться, что в некоторой точке (θ_c, q_c) коэффициенты α_2 и α_3 одновременно обращаются в нуль. В такой точке, определяющейся из системы двух уравнений

$$\alpha_2(\theta_c, q_c) = a, \quad \alpha_3(\theta_c, q_c) = 0. \quad (1.38)$$

Однако это будет изолированная точка на фазовой диаграмме на плоскости (θ, q) , тогда как для системы, где $\alpha_3 \equiv 0$, имеется линия фазовых переходов $\theta_c = \theta_c(q)$, определяемая из одного уравнения

$$\alpha_2(\theta_c, q) = 0. \quad (1.39)$$

Если имеется несколько обобщенных сил q , то следует говорить не о линии фазовых переходов, а о некоторой поверхности в пространстве температур θ и всех обобщенных сил q . Тогда вместо изолированной точки из уравнений (1.38) можно определять некоторую линию или поверхность меньшей размерности.

В заключение этого элементарного термодинамического анализа определим область устойчивости упорядоченной и неупорядоченной фаз в пространстве параметров потенциала $\alpha_2, \alpha_3, \alpha_4$. Конкретно укажем области устойчивости на плоскости α_2, α_4 при фиксированных значениях α_3 . Так, при $\alpha_3=0$ на основании сказанного выше имеем простейшую фазовую диаграмму, изображенную на рис. 1.8. При наличии кубического члена в Φ описанная выше ситуация иллюстрируется на рис. 1.9. Сплошная линия отвечает фазовым переходам первого рода.

Устойчивыми являются состояния с $\eta \neq 0$, отвечающие области, лежащей ниже штрихпунктирной кривой. С другой стороны, из условия (1.34 б) также следует, что область устойчивости фазы с $\eta = 0$ определяется неравенствами $\alpha_2 > 0$ и $\alpha_4 > 0$. Следовательно, области устойчивости фаз с $\eta = 0$ и $\eta \neq 0$ перекрываются на части плоскости, ограниченной штрихпунктирной кривой и осью абсцисс. Перекрывающаяся область соответствует метастабильным

состояниям, и кривая фазового перехода первого рода проходит внутри этой области. При $\alpha_3 \rightarrow 0$ рис. 1.9 трансформируется в рис. 1.8.

Проведенный анализ относится к фазовому переходу, характеризующемуся однокомпонентным параметром порядка. В общем случае параметр порядка является многокомпонентной величиной $\eta = \{\eta_1, \eta_2, \dots\}$, и для анализа фазового перехода необходимо вести разложение термодинамического потенциала по степеням всех его компонент. При построении формы потенциала главную роль играют соображения симметрии.

Л.Д. Ландау впервые обратил внимание на тот факт, что при всяком фазовом переходе второго рода происходит изменение симметрии системы.

Изменение симметрии системы осуществляется посредством смещения атомов, а при фазовом переходе второго рода может быть связано и с изменением упорядоченности кристалла.

Поясним сказанное примером. Вполне упорядоченный сплав $CuZn$ имеет кубическую решетку с атомами Zn , расположенными, скажем в вершинах, и атомами Cu – в центрах кубических ячеек (рис. 1.10 а), решетка Бравэ – простая кубическая. При разупорядочении (при повышении температуры) атомы Cu и Zn меняются местами, т.е. для всех узлов появляются отличные от нуля вероятности нахождения атомов обоого рода. До тех пор, пока вероятности нахождения атома Cu (или Zn) в вершинах и центрах ячеек неодинаковы (не вполне упорядоченный кристалл), эти узлы остаются неэквивалентными и симметрия решетки прежней. Но как только эти вероятности сравниваются, все узлы становятся эквивалентными, и симметрия кристалла повышается – появляется новый трансляционный период (из вершины в центр ячейки), а кристалл приобретает объемноцентрированную кубическую решетку Бравэ (рис. 1.10 б).

Этот пример характерен тем, что никакого скачка в изменение состояния системы не происходит. Расположение атомов в кристалле меняется непрерывным образом. Однако уже сколь угодно малое смещение атомов от их

первоначального симметричного расположения достаточно для того, чтобы симметрия решетки сразу изменилась. Осуществляемый таким способом переход одной кристаллической модификации в другую называется фазовым переходом второго рода.

Выше говорилось лишь о переходах между различными кристаллическими модификациями. Но фазовые переходы второго рода не обязательно должны быть связаны именно с изменением симметрии расположения атомов в решетке. Путем перехода второго рода может осуществляться также взаимное превращение двух фаз, отличающихся каким – либо иным свойством симметрии. Таковы точки Кюри ферромагнитных или антиферромагнитных веществ; в этом случае имеет место изменение симметрии расположения элементарных магнитных моментов в теле. Фазовыми переходами второго рода, как уже отмечалось, являются также переход металла в сверхпроводящее состояние и переход жидкого гелия в сверхтекучее состояние. В обоих этих случаях состояние тела меняется непрерывным образом, но в точке перехода тело приобретает качественно новое свойство.

Пусть исходная (более симметричная) фаза характеризуется группой симметрии G_0 , оставляющей инвариантной микроскопическую функцию плотности $\rho(\alpha_2)$ системы. Эта функция может быть скалярной, векторной, тензорной и т.д. функцией в зависимости от физического содержания величины, меняющейся при фазовом переходе.

Поскольку при фазовых переходах второго рода состояние меняется непрерывно, то симметрия новой фазы может снизиться только за счет потери части элементов симметрии и будет описываться группой G , являющейся подгруппой исходной группы G_0 , что математически может быть записано в виде:

$$G \subset G_0$$

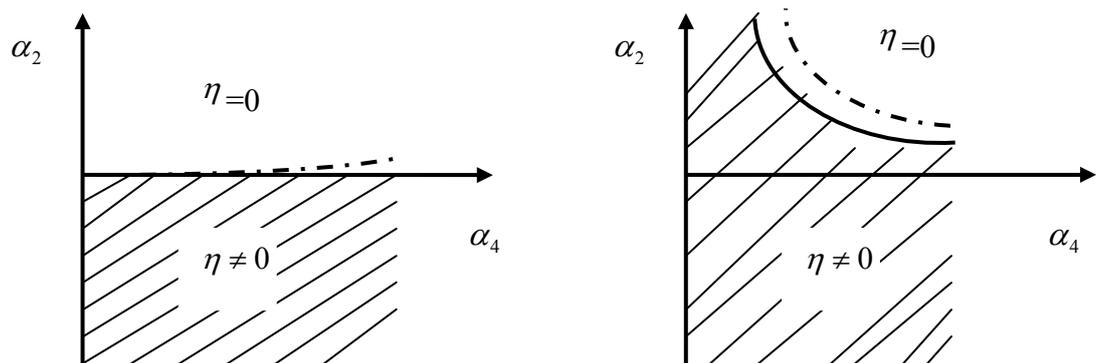


Рис. 1.8. Фазовая диаграмма в отсутствии кубического члена в разложении термодинамического потенциала. Штриховая кривая – фазовый переход второго рода.

Рис. 1.9. Фазовая диаграмма при наличии кубического члена в разложении термодинамического потенциала. Сплошная кривая – фазовый переход первого рода; штрихпунктир – граница устойчивости фаз.

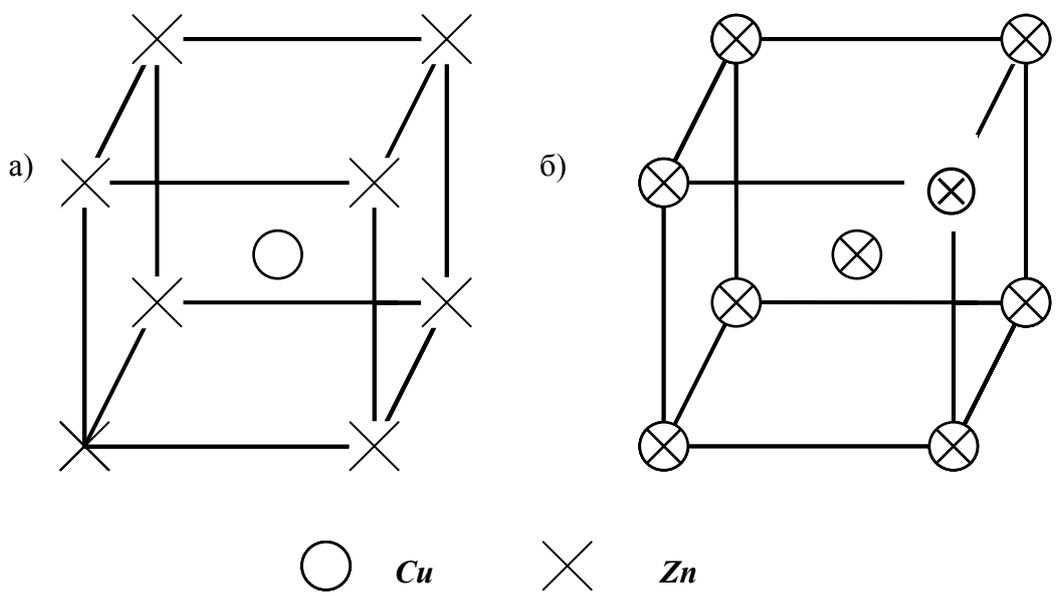


Рис. 1.10. а) решетка Бравэ – простая кубическая ,

б) объемноцентрированная кубическая решетка Бравэ.

Будем называть каждую низкосимметричную фазу диссимметричной и описывать функцией плотности $\rho(\alpha_2) = \rho_0(\alpha_2) + \delta\rho(\alpha_2)$. В основе метода анализа изменений симметрии при фазовом переходе второго рода, предложенном Ландау, лежит разложение функции плотности $\rho(\alpha_2)$ или $\delta\rho(\alpha_2)$ по полному набору функций $\varphi_i^n(\alpha_2)$, преобразующихся по неприводимым представлениям (НП) исходной группы G_0 , а сами эти функции являются базисом этих представлений. Таким образом, можно написать:

$$\delta\rho(\alpha_2) = \sum_n \sum_i \eta_i^{(n)} \varphi_i^{(n)}(\alpha_2), \quad (1.41)$$

где n есть номер неприводимого представления; i – номер функции в ее базисе; $\eta_i^{(n)}$ – коэффициент разложения, не зависящий от координат, но изменяющийся с температурой; функции φ_i преобразуются друг через друга при всех преобразованиях группы G_0 .

В симметричной фазе (как правило, при $\theta > \theta_c$) все $\eta_i^{(n)} = 0$, но при $\theta < \theta_c$ по крайней мере некоторые из этих коэффициентов должны быть отличны от нуля. В силу непрерывности изменения функции плотности в точке фазового перехода при $\theta \rightarrow \theta_c$, $\eta_i^{(n)} \rightarrow 0$, и в окрестности θ_c коэффициенты $\eta_i^{(n)}$ могут считаться малыми.

Таким образом, в разложении термодинамического потенциала Φ в окрестности θ_c в ряд по степеням $\eta_i^{(n)}$ достаточно ограничиться первыми членами разложения. Это разложение начинается с квадратичных по коэффициентам $\eta_i^{(n)}$ членов и может быть записано в виде:

$$\Phi = \Phi_0 + \sum_n \alpha_2^{(n)} \sum_i (\eta_i^{(n)})^2 + \dots \quad (1.42)$$

Из условия минимума Φ следует, что линейные члены в этом разложении выпадают. Структура квадратичных членов определяется тем фактом, что для каждого неприводимого представления (НП), по которому преобразуются

величины. $\eta_i^{(n)}$, под действием элементов группы G_0 существует только один инвариант второго порядка $\sum_i (\eta_i^{(n)})^2$. Более высокие члены разложения (кубические, четверные и т.д.) представляют инвариантные полиномы соответствующего порядка, которые могут быть найдены для заданной группы G_0 по известным математическим рецептам.

Общая схема Ландау позволяет находить все допустимые диссимметричные фазы, которые могут возникнуть из данной фазы путем фазового перехода второго рода. Соответствующий анализ сводится к построению разложения термодинамического потенциала по степеням параметра порядка, преобразующегося по некоторому НП группы G_0 , и последующей минимизации потенциала.

Развитие теории Ландау проходило в двух направлениях – в развитии физической картины фазовых переходов и математических методов теории.

Любой фазовый переход в кристалле сопровождается появлением в точке фазового перехода θ_c целого набора физических величин, отсутствующих в исходной фазе. Эти величины можно разделить на две основные группы: на микроскопические и макроскопические параметры. Примерами микроскопических параметров могут служить атомные смещения или атомные спины, возникающие в точке фазового перехода θ_c , а также изменения вероятности нахождения атома данного сорта в данном узле.

Кроме перечисленных параметров, целый ряд важных физических свойств кристалла описывается макроскопическими переменными, к которым относятся компоненты вектора поляризации или намагниченности кристалла, компоненты тензора деформации и т.д. Измерение этих величин определяет всю важность изучения поведения макроскопических переменных в окрестности фазового перехода. В последние годы широко обсуждаются и исследуются экспериментально макроскопические свойства, описываемые тензорами высших рангов.

При построении термодинамического потенциала Φ , описывающего влияние внешнего поля q на фазовый переход, следует различать две ситуации. Первая возникает, когда роль параметра порядка играет макроскопическая величина (например, поляризация, намагниченность, деформация). В этом случае учет внешнего поля сводится либо к добавлению к термодинамическому потенциалу члена ηq , где q – сопряженное ей поле (уравнение состояния тогда имеет обычный вид $\partial\Phi/\partial\eta=0$), либо потенциал остается неизменным, а уравнение состояния принимает вид $q = \partial\Phi/\partial\eta$.

Фазовая диаграмма для модели η^4 . На простых моделях с однокомпонентным параметром порядка проиллюстрируем основные принципы построения фазовых диаграмм в переменных θ , q . Начнем с потенциала вида:

$$\Phi = \alpha_2 \eta^2 + \alpha_4 \eta^4 - q\eta. \quad (1.43)$$

Связь параметра порядка η с полем q описывается уравнением состояния:

$$2\eta\alpha_2 + 4\eta^3\alpha_4 = q. \quad (1.44)$$

Функция $\eta(q)$ для разных значений $\alpha_2 = \alpha_{2_0}'(\theta - \theta_c)$ изображена на рис. 1.11. Анализ уравнения состояния (1.44) позволяет построить график зависимости параметров η от температуры θ (коэффициента α_2) при разных значениях поля q (рис. 1.12). Участки 3 – 4 и 7 – 6 кривой $\eta(q)$ на рис. 1.11 отвечают метастабильным состояниям. Участки 4 – 5 и 5 – 6 отвечают нестабильным состояниям с отрицательными значениями второй производной $\left(\frac{\partial^2\Phi}{\partial\eta^2} < 0\right)$ или с отрицательной обратной восприимчивостью χ^{-1} , поскольку имеет место соотношение

$$\chi^{-1} = (\partial q / \partial \eta)_r = (\partial^2 \Phi / \partial \eta^2)_r, \quad (1.45)$$

Символ r указывает, что соответствующая величина берется при $q=0$.

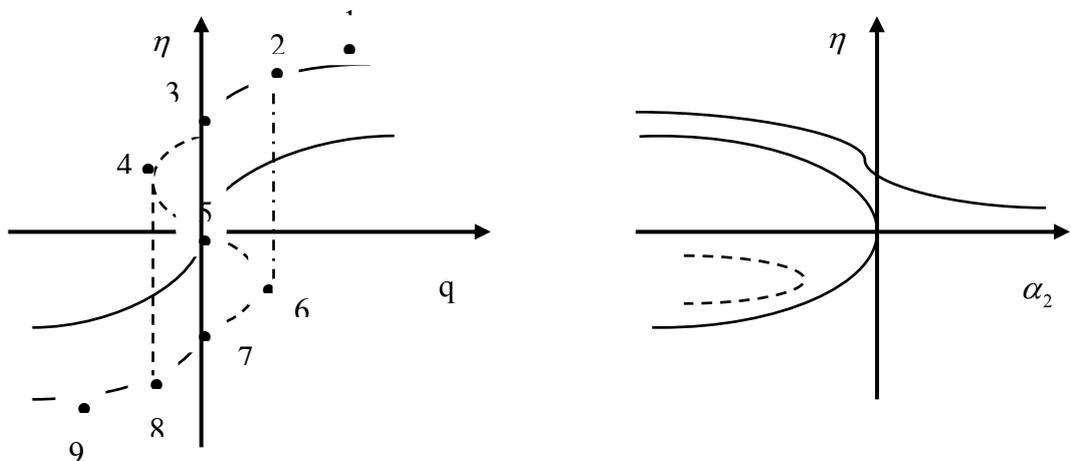


Рис. 1.11. Полевая зависимость параметра η при $\theta > \theta_c$ и $\theta < \theta_c$ для потенциала (1.43). Сплошные линии – устойчивые состояния системы, штриховые линии – неустойчивые состояния.

Рис. 1.12. Зависимость параметра порядка η от температуры $\alpha_2 = \alpha_{2_0}' (\theta - \theta_c)$ при $q > 0$. Сплошные линии – устойчивые состояния системы, штриховая линия – неустойчивые состояния.

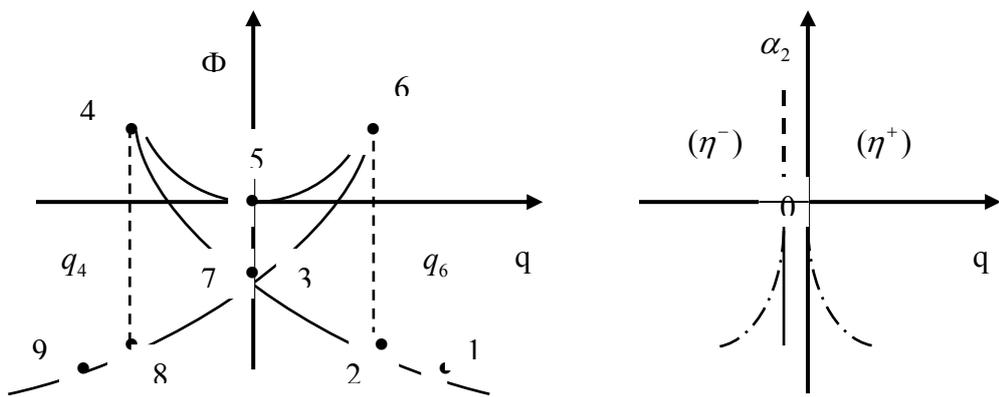


Рис. 1.13. Зависимость минимизированного потенциала Φ от поля q при $\theta < \theta_c$.

Рис. 1.14. Фазовая диаграмма для системы с потенциалом (1.43). Штриховая линия – фазовые переходы второго рода, сплошная линия – фазовые переходы первого рода, штрихпунктир – граница устойчивости фаз (η^+) и (η^-) .

Анализ кривых $\eta(q)$, приведенных на рис. 1.11, позволяет построить зависимость потенциала Φ от поля q при $\theta < \theta_c$, которая представлена на рис. 1.13.

Из графиков $\eta(q)$ и $\Phi(q)$ видно, что при изменении поля q параметр порядка η и энергия системы должны испытывать скачки между состояниями, отвечающими точкам 4 – 8 и 2 – 6. На эксперименте должна наблюдаться петля гистерезиса 2 – 3 – 4 – 8 – 7 – 6. Коэрцитивное поле равно $(1/2)(q_6 - q_4)$.

Анализируя графики $\eta(q)$ (рис. 1.10) и $\Phi(q)$ (рис. 1.13), можно построить фазовую диаграмму, которая изображена на рис. 1.14. Как видно из рис. 1.14, в точке 0 меняется род фазового перехода (трикритическая точка).

1.3. Синергетическое описание неравновесных фазовых переходов и сверхпластичность

За последние десятилетия достигнуты значительные успехи в познании природы прочности металлов и сплавов и в установлении новых эффектов механического поведения их на основе подходов механики, физики прочности и материаловедения. Дальнейшее продвижение в решение проблемы прочности материалов связано с описанием фундаментальных связей между микро – и макропараметрами на основе междисциплинарного подхода к изучению проблемы с учетом развивающегося в настоящее время нового научного направления – синергетики [20...25].

Синергетика изучает процессы самоорганизации, развития, устойчивости и распада структур самой различной природы. Общность заключается в том, что биологическим, химическим, физическим, социальным, экономическим процессам свойственны неравновесные фазовые переходы, отвечающие особой точке (точке бифуркации), при достижении которой скачкообразно изменяются свойства, обусловленные самоорганизацией диссипативных структур.

Движущей силой процесса является стремление открытых систем (вдали от равновесия) к снижению производства энтропии. Явления самоорганизации диссипативных структур свойственны системам, находящимся вдали от равновесия. В [22, 23, 26, 27] развит термодинамический подход к явлению самоорганизации диссипативных структур, формирующихся в процессе обмена системы энергией и веществом с окружающей средой. Синергетика рассматривает кинетику (динамику) энтропии, которая является функцией состояния материала, эволюционирующей во времени. В [28] делается вывод, в соответствие которому к анализу синергетических систем применима триада – изменчивость, наследственность, отбор.

Подход к изучению эволюции систем в форме деформируемого тела как синергетической системы, основанный на выявлении неравновесных фазовых переходов, позволят совершить прорыв в области механики и физики материалов с созданием новых технологий и получении металлов и сплавов с особыми свойствами.

Обратимся теперь к условиям проявления сверхпластичности динамического типа и их связи с синергетикой.

Начиная с классической работы К. Пирсона [29], металлургические исследования сверхпластичности концентрируются вокруг механизма зернограницного скольжения. Более того, как утверждается в [30], зернограницное скольжение сопровождается сменой соседей зерен. Наличие ультрамелкого зерна является необходимым, но недостаточным условием развития эффекта. К мелкозернистости следует добавить требование равноосности и несклонности к росту зерна при нагреве и деформации [31]. Важным структурным элементом считаются также границы зерен [32].

При динамической сверхпластичности, как известно [33], формирование мелкого зерна происходит в процессе нагрева и деформации. Размер зерна при этом оказывается функцией не только термомеханических параметров, но и координат точек деформируемого образца. Поэтому при анализе на макроуровне эффектов, характеризующих сверхпластичность, неизбежно

приходится обращаться к принципу локального равновесия, принятого в термодинамике необратимых процессов [34]. Указанным принципом утверждается, что макроскопически малые системы приходят в равновесное состояние раньше, чем устанавливается равновесие между этими малыми частями. Следовательно, при нагреве и деформации образец материала должен рассматриваться как сложная система [25], в каждом элементе которой имеют место известные процессы – диффузионный массоперенос, движения различного вида дислокаций, зернограничное скольжение. При сверхпластичности добавляется и становится преобладающей смена соседей зерен с последующими аккомодационными процессами. Реализация сверхпластичности не происходит во всем объеме механически и термически однородно деформируемого тела одновременно. Поэтому естественно считать, что наступлению сверхпластичности предшествует метастабильное состояние, связанное со становлением принципиально нового механизма – зернограничного проскальзывания. Если учесть, что указанный механизм зарождается в уже диссипативной структуре, то при анализе природы сверхпластичности эффективным инструментом оказывается использование представлений о неравновесных фазовых переходах.

В соответствии с принципом локального равновесия состояние открытой неравновесной системы, к которой сводятся образцы деформируемого материала, характеризуется локальными термодинамическими потенциалами, которые зависят от времени через характеристические термодинамические параметры, причем для всех потенциалов выполняются уравнения классической термодинамики. Это утверждение не противоречит положениям рациональной термодинамики [35].

Укажем, что возникновение в условиях неравновесных фазовых переходов новых структур не накладывается извне. Процессы, приводящие к их возникновению, называются самоорганизацией [21, 22, 24, 26].

Из сказанного становится очевидным, что неравновесные открытые системы могут анализироваться как термодинамически самоорганизованные

структуры, в которых локализован квазиравновесный термодинамический процесс [36]. Кинетика таких структур рассматривается как переход через ряд термодинамически квазиравновесных состояний, а зависимость системы от времени описывается через параметры состояния.

Самоорганизация может быть вызвана различными способами [20, 21]. Но в конкретных случаях одновременного нагрева и статического нагружения металлических материалов можно считать, что реализуется медленное изменение воздействия окружающей среды, при котором открытая диссипативная система переходит в новое состояние. В [20, 21] такой способ относится к самоорганизации через изменение управляющих параметров. Взаимодействие элементов открытой системы неизбежно переносится на внешние макроэффекты, порождаемые структурными изменениями. Указанные эффекты названы синергетическими. Основной особенностью синергетических эффектов следует считать упорядоченность, целенаправленность поведения открытой системы при относительной хаотичности поведения отдельных составляющих.

Важно отметить следующие принципиальные моменты, связанные с термодинамическим подходом [21]. Равновесная термодинамика, как известно, применима к системам, находящимся в тепловом равновесии. Линейная термодинамика необратимых процессов действует вблизи теплового равновесия. Синергетические системы находятся вдали от теплового равновесия. Хотя термодинамическое понятие параметра порядка используется в синергетике, однако указанные параметры имеют несколько другую природу, чем в термодинамике. Неравновесные фазовые переходы, естественно, более разнообразны, чем фазовые переходы равновесных и линейно неравновесных систем.

В синергетике первостепенное значение придается понятию управления. При этом изменение управляющих параметров производится более или менее произвольным образом. Как следствие, изучается самоорганизация системы, то

есть различные состояния, в которые она переходит при изменении управляющих параметров.

В связи со сказанным становится очевидным, что гипотеза о физической природе сверхпластичности, сформулированная в [37] имеет синергетическую природу. В соответствие указанной гипотезе сверхпластичность трактуется как суперпозиция деформаций и одного или нескольких превращений. В таком случае естественно предположить существование критических температурных точек, ограничивающих при наложении деформаций термический диапазон сверхпластичности. В указанном диапазоне материалы, имеющие полиморфные превращения, в определенном интервале скоростей деформаций проявляют сверхпластические свойства, объясняемые состоянием превращения [38].

В сплавах с исходным ультрамелкозернистым строением на зернограничное проскальзывание со сменой соседей зерен реагирует сильное изменение термодинамических функций отклика. Так, эксперименты, осуществленные на мелкозернистом сплаве $Zn - 22\%Al$ показали резкий скачок удельной теплоемкости C_p в термическом диапазоне сверхпластичности [39]. Кроме того, для упомянутого сплава показано [40], что сверхпластичности соответствует неравновесное структурное состояние, наблюдаемое в процессе эвтектоидного превращения.

В деформированных алюминиевых [41, 42] и медных [43] сплавах без предварительной подготовки структуры отмечается неустойчивость напряжения течения по отношению к параметрам, ответственным за процесс, - температуре и скорости деформации. Последнее свидетельствует о сильном изменении термодинамических величин, обусловленном в алюминиевых сплавах процессом динамической рекристаллизации [38, 44].

Следует отметить, что происходящие при динамической рекристаллизации структурные изменения заключаются [44] в возникновении равноосной микроструктуры с очень мелким зерном, примерно совпадающим по размерам с субзернами. Иными словами, создается структурная ситуация, способствующая реализации механизма зернограничного проскальзывания и,

как следствие, проявлению сверхпластических свойств. Указанная ситуация является промежуточным структурным состоянием между исходным деформированным и крупнозернистым рекристаллизованным. Следовательно, наличие нагрева и деформации в определенном сочетании при неизменном химическом составе меняет структурное состояние материала. По существу, деформированные алюминиевые сплавы проходят ряд структурных состояний, кардинально меняющих свойства системы, - деформированное, метастабильное – переходное к мелкозернистому, мелкозернистое, метастабильное – переходное к крупнозернистому рекристаллизованному, рекристаллизованное.

Для большинства промышленных титановых сплавов сверхпластичность проявляется в области полиморфных превращений [45] или обусловлена динамической рекристаллизацией [46].

Вывод из приведенных рассуждений однозначен – природа сверхпластической деформации связана с температурно – скоростными режимами структурной неустойчивости деформируемого материала [47]. К этому же сводится и концепция «оптимизации гетерогенности» [48].

Таким образом, можно утверждать [36], что сверхпластичность следует отнести к совершаемым при нагреве и деформации размытым [49] фазовым переходам, обусловленным структурными изменениями различной природы. Общим оказывается наличие неравновесных фазовых переходов, отвечающих особым точкам (точками бифуркации), при достижении которых скачкообразно изменяются состояния, обусловленные, как ясно из выше изложенного, самоорганизацией диссипативных структур.

Очевидно, что математическая модель, описывающая закономерности высокотемпературной деформации в широком скоростном диапазоне, должна отражать кинетику процесса. Поэтому вполне логичным представляется деформируемый материал отождествлять с автономной динамической системой, подчиняющейся эволюционному уравнению [50]

$$\frac{d\eta}{dt} = F(\eta, \beta), \quad (1.82)$$

где $F(\eta, \beta)$ – силовой фактор; β – определяет семейство управляющих параметров; η – обобщенная координата (параметр порядка), ответственная за положение системы в пространстве термических и кинематических переменных.

Известно, что флуктуирующие силы могут вывести динамическую систему из аттрактивного состояния, соответствующего минимуму термодинамического потенциала. Но второе начало термодинамики вынудит систему вернуться в первоначальный минимум. Это означает, что существование термодинамического потенциала делает систему нечувствительной к структурной изменчивости. Следовательно, подход, основанный на методах линейной необратимой термодинамики, оказывается неприемлемым для анализа сильно неравновесных систем, к которым, естественно, относится материал, определенным этапом деформирования которого является сверхпластичность.

Одним из вариантов выхода из такой ситуации видится существенное упрощение уравнения (1.82). Указанное упрощение достигается в случае, если внешние силы принять консервативными, а ответственность за флуктуации возложить на управляющие параметры. Тогда вместо (1.82) можем записать

$$\frac{d\eta}{dt} = -\frac{\partial\Phi(\eta, \beta)}{\partial\eta} = F(\eta, \beta). \quad (1.83)$$

Здесь $\Phi(\eta, \beta)$ – «потенциальная» функция, а материал рассматривается как градиентная динамическая система.

Вдали от равновесия градиентная динамическая система эволюционирует к некоторому стационарному состоянию, устанавливаемому из условия

$$\frac{\partial\Phi(\eta, \beta)}{\partial\eta} = 0. \quad (1.84)$$

В стационарных условиях смена состояний осуществляется за счет изменения управляющего параметра. Математически подобные смены описывает элементарная теория катастроф.

Выводы

1. Рассмотрен термодинамический подход к анализу обратимых фазовых переходов. Обсуждена разница между четким и размытым фазовыми переходами.

2. Изложена теория фазовых переходов Л. Д. Ландау. Показано, что параметр порядка характеризует новое физическое свойство, которое появляется в термодинамической системе после фазового перехода.

3. В рамках синергетического подхода к проблеме моделирования закономерностей температурно-скоростной деформации показана иерархичность в смене состояний, одним из этапов которой является сверхпластичность.

2. МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНОЙ ДЕФОРМАЦИИ ПРОМЫШЛЕННЫХ АЛЮМИНИЕВЫХ СПЛАВОВ

2.1. Основные предпосылки модели

Формулировке математической модели процессов высокотемпературной деформации промышленных алюминиевых сплавов предшествовали результаты исследований сверхпластической деформации следующих материалов – деформированные сплавы АМг5, 1561 (АМг61), Д18Т, В48, В95, АК4, АК6, АК8 и литой сплав 1561 (АМг61) с исходной неподготовленной структурой [33].

Экспериментальное изучение закономерностей деформации при растяжении в широких температурно-скоростных диапазонах показало принципиальное отличие условий реализации сверхпластичности динамического типа от микрочеренной. Указанная особенность заключается в том, что при динамической сверхпластичности происходит замена исходного материала другим, готовым к сверхпластичности. Все это имеет место в процессе нагрева и деформации и для промышленных алюминиевых сплавов реализуется при динамической рекристаллизации [6, 44], в ходе которой исходная литая или деформированная структура превращается в равноосную мелкозернистую. Последняя сохраняется в сплавах после снятия термомеханического воздействия из-за практического отсутствия собирательной рекристаллизации. При этом улучшаются структурные и механические показатели, и практически исчезает исходная деформационная анизотропия [33]. Другими словами, при динамической сверхпластичности осуществляется структурный фазовый переход. Таким образом, находит подтверждение гипотеза о физической природе сверхпластичности как о суперпозиции деформации и одного или нескольких структурных превращений [37].

Кроме того, формирование мелкозернистой структуры позволяет прогнозировать возникновение структурной ситуации, способствующей реализации механизма зернограничного проскальзывания. Последней отвечает экспериментально установленная [33] неустойчивость напряжения течения по отношению к скорости деформации (рис. 2.1) и температуре. В исследованных алюминиевых сплавах определены скоростные диапазоны, в которых изотермы «напряжение – скорость деформации» отклоняются от монотонного характера с появлением точек бифуркации. Ниспадающие ветви диаграмм принимаются соответствующими проявлению сверхпластических свойств. Характерные признаки сверхпластичности – низкий уровень напряжений, высокая деформационная способность при растяжении – отмечаются в упомянутых диапазонах.

Одной из особенностей, присущих алюминиевым сплавам, является структурное упрочнение [51], осуществление которого имеет место при температурах нагрева ниже температуры рекристаллизации. Этим объясняется установленная экспериментально слабая зависимость напряжения от степени деформации. В режимах сверхпластичности поведение материалов близко к идеально пластическому, причем сверхпластичность наступает при малых степенях деформации. Тем самым подтверждается независимость от степени деформации термостабильности горячедеформированных алюминиевых сплавов.

Математическая модель однородной осевой высокотемпературной деформации, включая сверхпластичность, основана на следующих положениях.

1. Сверхпластичность имеет место в определенных термомеханических условиях, в которых возможна и превалирует реализация механизма зернограничного проскальзывания. Последнее облегчается формированием ультрамелкозернистой структуры в процессе нагрева и деформации и связано со структурным превращением – динамической рекристаллизацией. Так создается структурная ситуация, способствующая осуществлению зернограничного проскальзывания и, следовательно, проявлению

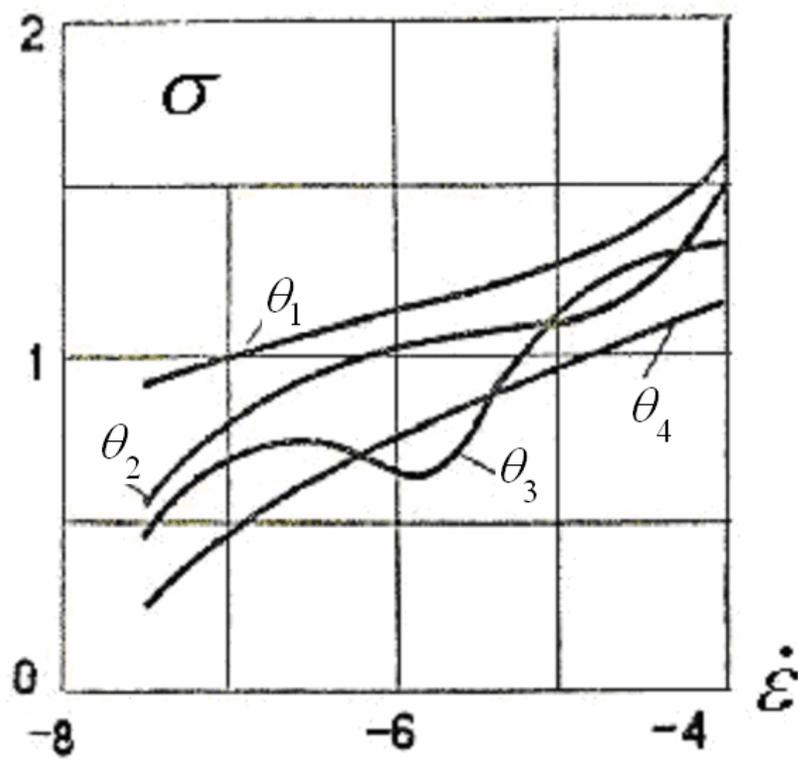


Рис. 2.1. Зависимости «напряжение – скорость деформации» образцов сплава АМг5 для различных температур при растяжении.

сверхпластических свойств. Указанное состояние является промежуточным между деформированным и крупнозернистым рекристаллизованным.

2. Сверхпластичность определена как явление, происходящее в условиях неравновесной (возбужденной) динамической структуры с возникновением аморфного состояния границ [52], стимулирующего зернограничное проскальзывание. Макропроявление структурной неравновесности заключается в возникновении неоднозначности напряжения по отношению к скорости деформации и температуре и, естественно, в появлении «особых» точек, соответствующих границам устойчивости. Подобное характерно для многомерных структурных фазовых переходов [53].

3. Структурные изменения в процессе динамической рекристаллизации носят необратимый характер. В связи с этим при моделировании динамической сверхпластичности совершенно понятным и приемлемым оказалось использование подхода на основе теории неравновесных фазовых переходов с привлечением математической теории катастроф.

4. При исследовании эффекта сверхпластичности очевидна важность определения диапазонов проявления эффекта. Поэтому определяющие соотношения должны быть пригодны не только для анализа процессов сверхпластической деформации и пограничных областей высокотемпературной ползучести и термопластичности, но и удовлетворять аналитическим условиям перехода материала в сверхпластическое состояние.

2.2. Об аналитических условиях перехода алюминиевых сплавов в сверхпластическое состояние при одноосном растяжении

Для одноосной ситуации уравнение состояния принимаем в форме

$$\sigma = \sigma(\theta, \dot{\varepsilon}, \bar{\varepsilon}), \quad (2.1)$$

где σ – действительное напряжение; θ – абсолютная температура; $\bar{\varepsilon}$ – степень деформации; $\dot{\varepsilon}$ – скорость деформации.

Предполагается, что при переходе к сверхпластичности задачи определения механических и температурных величин с достаточной для практики точностью не связаны между собой. Это положение рассматривается как проявление принципа детерминизма [54]. При таком подходе температурный диапазон сверхпластичности считается ограниченным семейством изотерм «напряжение – скорость деформации», отвечающим области неустойчивости. Немонотонный процесс наблюдается в интервале $\theta \in]\theta_c^H, \theta_c^G[$, причем θ_c^H, θ_c^G названы [33] соответственно нижней и верхней критическими температурами.

Качественная картина, отражающая накопленные экспериментальные результаты, схематично изображена на рис. 2.2. При этом изотермы $\sigma - \dot{\varepsilon}$ описываются гладкими функциями с точками перегиба, в которых имеют место равенства

$$\left. \frac{\partial^2 \sigma}{\partial \dot{\varepsilon}^2} \right|_{\dot{\varepsilon} = \dot{\varepsilon}^*} = 0. \quad (2.2)$$

Здесь скорости деформации $\dot{\varepsilon}^* = \dot{\varepsilon}^*(\theta)$ ставится в соответствие напряжение $\sigma^* = \sigma^*(\theta)$ (рис. 2.2).

Уравнение состояния (2.1) при критических температурах удовлетворяет условиям

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial \sigma}{\partial \dot{\varepsilon}} \right|_{\theta_c^H, \dot{\varepsilon}_c^H} &= 0; & \left. \frac{\partial^2 \sigma}{\partial \dot{\varepsilon}^2} \right|_{\theta_c^H, \dot{\varepsilon}_c^H} &= 0; \\ \left. \frac{\partial \sigma}{\partial \dot{\varepsilon}} \right|_{\theta_c^G, \dot{\varepsilon}_c^G} &= 0; & \left. \frac{\partial^2 \sigma}{\partial \dot{\varepsilon}^2} \right|_{\theta_c^G, \dot{\varepsilon}_c^G} &= 0, \end{aligned} \quad (2.3)$$

где $\dot{\varepsilon}_c^H, \dot{\varepsilon}_c^G$ – абсциссы точек перегиба изотерм $\sigma - \dot{\varepsilon}$ соответственно при θ_c^H, θ_c^G .

Скоростной диапазон структурных превращений при конкретных температурах $\theta \in]\theta_c^H, \theta_c^G[$ определен в соответствии с принципом Максвелла [50]. Установлено, что фазовые переходы имеют место при пересечении кривой

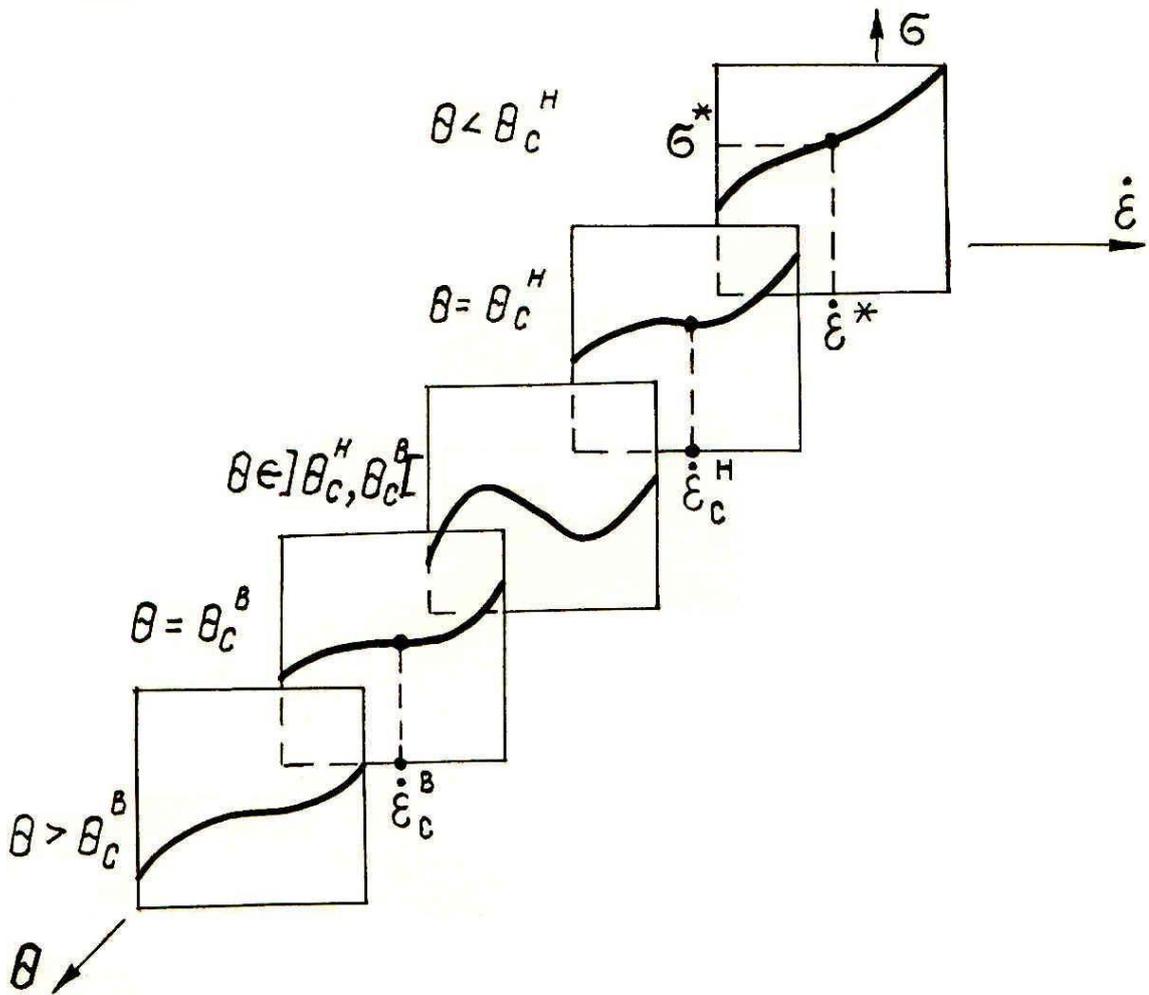


Рис. 2.2. Качественное представление экспериментальных зависимостей «напряжение – скорость деформации» в различных температурных диапазонах.

равновесия компоненты максвелловского множества (рис. 2.3). График зависимости «напряжение – скорость деформации», представленный на рис. 2.3, можно рассматривать как фрагмент фазовой диаграммы при $\theta \in]\theta_c^n, \theta_c^6[$. При этом восходящие ветви участка немонотонности (1-2-3-4-5) считаются соответствующими измельчению исходной деформированной (1-2) и формированию крупнозернистой рекристаллизованной (4-5) структур. Между ними лежит зона (2-3-4) неустойчивости, отвечающая проявлению сверхпластических свойств. Скоростной интервал сверхпластичности заключен между точками бифуркации (2-4), в которых имеют место равенства

$$\left. \frac{\partial \sigma}{\partial \dot{\varepsilon}} \right|_{\dot{\varepsilon} = \dot{\varepsilon}^n} = 0, \quad \left. \frac{\partial \sigma}{\partial \dot{\varepsilon}} \right|_{\dot{\varepsilon} = \dot{\varepsilon}^n} = 0. \quad (2.4)$$

Здесь $\dot{\varepsilon}_c^n$, $\dot{\varepsilon}_c^n$ – скорости деформаций, ограничивающие диапазоны проявления сверхпластических свойств.

Аналитически принцип Максвелла для определения скоростных диапазонов структурных превращений представлен в виде интеграла

$$\int_{\dot{\varepsilon}_c^n}^{\dot{\varepsilon}_c^n} \left(\frac{\partial \sigma}{\partial \dot{\varepsilon}} \right)_{\theta} \dot{\varepsilon} d \dot{\varepsilon} = 0, \quad (2.5)$$

причем $\dot{\varepsilon}_c^n$, $\dot{\varepsilon}_c^n$ – скорости деформаций, определяющие диапазон структурных превращений.

Принято, согласно [55], что структурная термостабильность горячедеформированных алюминиевых сплавов не зависит от степени деформации, а обусловлена лишь скоростными ограничениями. В связи с этим сделано предположение о существовании деформационных условий, при которых при неизменной температуре и скорости деформации размеры и форма измельченных зерен сохраняют стабильность. Следовательно, справедливо равенство

$$\frac{\partial \sigma}{\partial \dot{\varepsilon}} = 0. \quad (2.6)$$

Итак, переход промышленных алюминиевых сплавов в

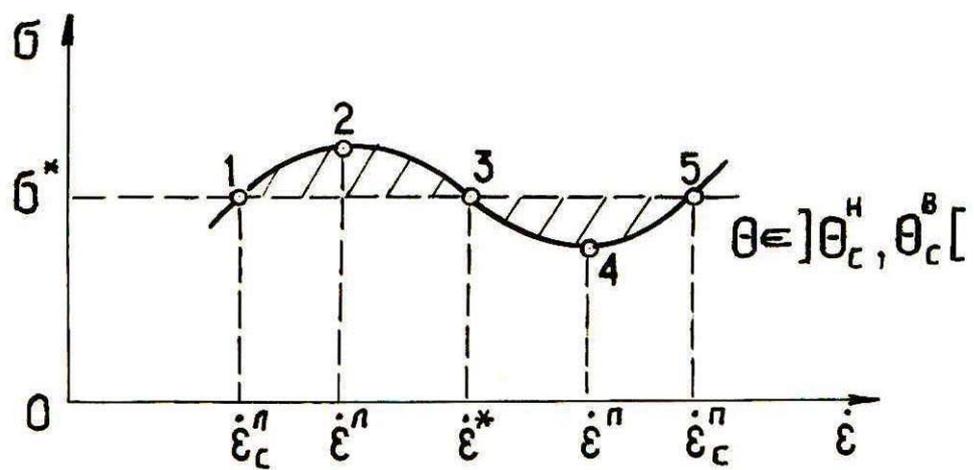


Рис. 2.3. К условиям перехода материала в сверхпластическое состояние.

сверхпластическое состояние связан с наличием факторов температуры, скорости и степени деформации, связанными между собой соотношениями (2.3)...(2.5). При этом начальным пунктом является установление экспериментальным путем температурных критических точек θ_c^H, θ_c^S ниже и выше которых структурные превращения не могут быть осуществлены. В дополнение к этому требуется выполнение условия (2.6). Скоростной интервал сверхпластичности $\dot{\varepsilon} \in]\dot{\varepsilon}^H, \dot{\varepsilon}^S[$ не отождествляется со скоростным диапазоном развития структурных превращений. При скоростях деформаций ниже $\dot{\varepsilon}_c^H$ процесс осуществляется при исходной деформированной (литой) структуре, а при $\dot{\varepsilon} > \dot{\varepsilon}_c^S$ имеет место уже сформировавшаяся крупнозернистая рекристаллизованная структура.

2.3. Уравнение состояния

Из условия качественной идентичности экспериментальным данным «потенциальная» функция выбрана в форме катастрофы сборки с учетом влияния внешнего поля

$$\Phi(\eta, \beta, q) = \frac{1}{4} m_0 \eta^4 + \frac{1}{2} \beta(\xi) \eta^2 - q \eta. \quad (2.7)$$

Здесь положено

$$q = \frac{\sigma}{\sigma^*} - 1; \quad \eta = \frac{\varepsilon}{\dot{\varepsilon}^*} - 1; \quad \xi = \frac{\theta - \theta_c^H}{\theta_c^S - \theta_c^H}; \quad (2.8)$$

$m_0 - const$, $\beta = \beta(\xi)$ – функция температуры.

Стандартной редукцией (2.8) вводится связь описания процесса деформации с теорией катастроф, причем β, q определяют семейство управляющих параметров, а η принадлежит роль параметра порядка. Поскольку $\eta = \eta(\dot{\varepsilon}, \theta)$, то, параметр порядка рассматривается как коллективная мода.

Согласно (2.8), величины $\sigma^* = \sigma^*(\theta)$, $\dot{\varepsilon}^* = \dot{\varepsilon}^*(\theta)$, отвечающие точкам

перегиба изотерм «напряжение – скорость деформации» (рис. 2.2), рассматриваются как альтернативные внутренние параметры состояния, ответственные за термическую историю.

Отмечено, что

$$\dot{\varepsilon}_c^H = \dot{\varepsilon}^*(\theta_c^H), \quad \dot{\varepsilon}_c^{\theta} = \dot{\varepsilon}^*(\theta_c^{\theta}). \quad (2.9)$$

Уравнение состояния получено минимизацией (2.7) в следующем виде:

$$q = m_0 \eta^3 + \beta(\xi)\eta. \quad (2.10)$$

В рамках представлений о функции (2.7) как о морсовской [50] утверждается, что при $\beta > 0$ ($\xi \notin]0,1[$) изменений структурного характера в деформируемом материале не происходит. Условие $\beta < 0$ ($\xi \in]0,1[$) соответствует структурно неустойчивому состоянию среды. Переходным процессам отвечает равенство $\beta = 0$.

Качественная картина, отражающая влияние знака управляющего параметра β на характер кривых $q - \eta$, представлена на рис. 2.4.

Значения параметров порядка $\eta_{1,2}$ и скоростей деформаций, ограничивающих при $\xi \in]0,1[$ область структурных изменений, определяются из условия (2.5), которое заменой (2.8) трансформируется в равенство $q = 0$. С учетом (2.8), (2.10) получены выражения

$$\eta_{1,2} = \pm(-\beta/m_0)^{1/2}; \quad \dot{\varepsilon}_c^{\eta,n} = \dot{\varepsilon}^*[1 \pm (-\beta/m_0)^{1/2}]. \quad (2.11)$$

Ограничения по параметрам порядка $\eta'_{1,2}$ и скоростям деформации на диапазон проявления сверхпластических свойств найдены из условия $dq/d\eta=0$ и имеют вид

$$\eta'_{1,2} = \pm(-\beta/3m_0)^{1/2}; \quad \dot{\varepsilon}_c^{\eta,n} = \dot{\varepsilon}^*[1 \pm (-\beta/3m_0)^{1/2}]. \quad (2.12)$$

Показано, что алюминиевые сплавы переходят из исходного состояния в рекристаллизованное через сильные структурные флуктуации, ответственность за реализацию которых возложена на параметр β . Соотношение (2.12) удовлетворяет условиям (2.3).

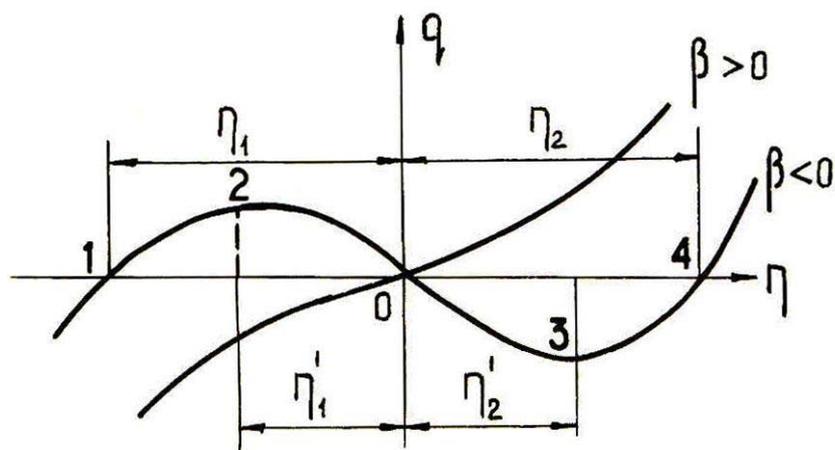


Рис. 2.4. Влияние знака управляющего параметра β на характер кривых.

2.4. Кинетические уравнения

Управляющий параметр β введен не зависящим от скорости деформации. Поэтому соответствующее эволюционное уравнение предложено в форме

$$\frac{d\beta}{dt} = \dot{\xi} f(\beta, q), \quad (2.13)$$

где $\dot{\xi} = d\xi/dt$ – скорость возрастания нормированной температуры.

Функция $f(\beta, q)$, входящая в (2.13), характеризует чувствительность материала к структурным превращениям. При этом вне интервала указанных превращений ($\xi \notin]0,1[$) величина $f(\beta, q)$ меняется слабо и резко возрастает при $\xi \in]0,1[$: $f(\beta, q)|_{\xi < 1/2} < 0$; $f(\beta, q)|_{\xi = 1/2} = 0$; $f(\beta, q)|_{\xi > 1/2} > 0$. Значение $\xi = 1/2$ соответствует середине температурного интервала сверхпластичности. Кроме этого, при $\xi \notin]0,1[$ имеем $f'_t(\beta, q) < 0$ и $f'_t(\beta, q) > 0$ при $\xi \in]0,1[$. В критических точках $f'_t(\beta, q) = 0$.

Альтернативные внутренние параметры состояния σ^* , $\dot{\epsilon}^*$ зависят от температуры, т.е. чувствительны к происходящим структурным изменениям. В связи с этим предложено следить за их эволюцией посредством параметра β .

Далее принимается, что при некотором значении $\beta = s$ внутренний параметр $\sigma^* = \sigma^*(s)$ и изменению β на величину $d\beta$ параметр σ^* откликается изменением на величину, пропорциональную σ^* . Поэтому можно записать

$$d\sigma^* = \sigma^* K(\beta - s) d\beta \quad (2.14)$$

Здесь $K(\beta - s)$ – ядро, существенно зависящее от температуры.

Решение уравнения (2.14) найдено в виде

$$\ln \frac{\sigma^*}{\sigma^*(s)} = \int_s^\beta K(\beta - s) d\beta \quad (2.15)$$

Для ядра $K(\beta - s)$ выбрана экспоненциальная зависимость

$K(\beta - s) = A_0 \exp(\beta - s)$, наилучшим образом описывающая кривые $\sigma^* - \xi$.
Тогда из (2.15) следует

$$\ln \frac{\sigma^*}{\sigma^*(s)} = A_0 [\exp(\beta - s) - 1], \quad (2.16)$$

где A_0 – постоянная материала.

Дифференцированием (2.16) по времени для параметра σ^* получено следующее кинетическое уравнение:

$$\frac{d \ln \sigma^*}{dt} = A_0 \frac{d\beta}{dt} \exp(\beta - s). \quad (2.17)$$

Соотношение (2.17) удовлетворяет условию $d \ln \sigma^* / dt = 0$ при $\xi = 1/2$.

Связь между параметрами σ^* и $\dot{\varepsilon}^*$ представлена так:

$$\frac{d \ln \sigma^*}{d \ln \dot{\varepsilon}^*} = \lambda^*(\xi) \quad (2.18)$$

Для установления вида функции $\lambda^*(\xi)$ используется условие (2.6), которое при достаточно медленном процессе ($d\eta = -(1 + \eta)d \ln \dot{\varepsilon}^*$) преобразуется к линейному дифференциальному уравнению

$$\frac{d\beta}{d\eta} + \left(\frac{1}{\eta} - \frac{1 - \lambda^*}{\lambda^*} \right) \frac{\beta}{1 + \eta} = \frac{1 + m_0 \eta^3}{\lambda^* \eta (1 + \eta)} - 3m_0 \eta. \quad (2.19)$$

Интеграл уравнения (2.19) при условии $q|_{\eta=0} = 0$ имеет вид

$$\beta = \frac{(1 + \eta)^{1/\lambda^*}}{\eta} [1 - (1 + \eta)^{-1/\lambda^*} (1 + m_0 \eta^3)]. \quad (2.20)$$

Из (2.20) получено выражение для λ^* :

$$\lambda^* = \frac{\ln(1 + \eta)}{\ln(1 + m_0 \eta^3 + \beta \eta)}; \quad (2.21)$$

Полагая далее $\eta = 0$, находим

$$\lambda^* = \beta^{-1}. \quad (2.22)$$

Кинетическое уравнение для параметра $\dot{\varepsilon}^*$ записано в виде

$$\frac{d \ln \dot{\varepsilon}^*}{d t} = A_0 \beta \frac{d \beta}{d t} \exp(\beta - s). \quad (2.23)$$

Итак, предложена модель [33, 56, 57] связи между напряжениями, температурой и кинематическими переменными, включая диапазоны сверхпластичности, для случая простого растяжения. При этом уравнение состояния записано в конечной форме (2.10), (2.8) и дополнено кинетическими уравнениями для управляющего параметра (2.13) и внутренних параметров состояния (2.17), (2.23). Указанные соотношения пригодны для математического описания конкретных закономерностей деформирования при наличии явного выражения функции чувствительности материала к структурным превращениям, требования к которой сформулированы выше. В качестве варианта функции $f(\beta, q)$ предложено выражение вида

$$f(\beta, q) = q_0 (1 - \beta)^{-\alpha} \frac{\xi - 1/2}{1 + m^2 (\xi - 1/2)^2}, \quad (2.24)$$

где q_0, α, m – постоянные.

Выполнение условий $\beta|_{\xi=0} = 0$; $f'_t(\beta, q)|_{\xi=0} = 0$ приводит к равенству

$$\frac{m^2}{4} = \frac{\alpha q_0}{4} + 1. \quad (2.25)$$

Для $\mu = m^2/4 = 1 + \alpha q_0/4$, получено физическое представление (2.24) в форме

$$f(\beta, q) = \frac{4}{\alpha} \frac{\mu - 1}{\mu + 1} \left[\Gamma(\xi) - \frac{1}{2} \right]. \quad (2.26)$$

Здесь введено обозначение

$$\Gamma(\xi) = (1 - \beta)^{-\alpha} \frac{1 + \mu}{2} \frac{2\xi - 1}{1 + \mu(2\xi - 1)^2} + \frac{1}{2}. \quad (2.27)$$

Функцию $\Gamma(\xi)$ при $\beta < 0$ ($\xi \in]0, 1[$) предложено рассматривать как степень полноты фазового перехода, причем очевидно, что $\Gamma(0) = 0$; $\Gamma(1) = 1$.

Подстановка (2.26) в (2.13) с последующим интегрированием позволила

записать уравнение для $\beta = \beta(\xi)$:

$$(1 - \beta)^{1+\alpha} = 1 - \frac{1 + \alpha}{2\alpha} \frac{\mu - 1}{\mu} \ln \frac{1 + \mu(2\xi - 1)^2}{1 + \mu} \quad (2.28)$$

На основании (2.27) установлено, что скорость развития фазового перехода по температуре равна

$$\Gamma'(\xi) = \frac{(1 + \mu)(1 - \beta)^{-\alpha}}{\left[1 + \mu(2\xi - 1)^2\right]^2} \left[1 - \mu(2\xi - 1)^2 + (1 - \beta)^{-\alpha-1} \times \right. \\ \left. \times (\mu - 1)(2\xi - 1)^2\right] \quad (2.29)$$

Легко видеть, что $\Gamma'(0) = \Gamma'(1) = 1$, а при $\xi = 1/2$ функция (2.29) принимает максимум

$$\max \Gamma' = \Gamma'(1/2) = (\mu + 1)(1 - \beta^*)^{-\alpha}, \quad (2.30)$$

причем для определения β^* имеется уравнение

$$(1 - \beta^*)^{-\alpha} = 1 - \frac{1 + \alpha}{2\alpha} \frac{\mu - 1}{\mu} \ln \frac{1}{1 + \mu}. \quad (2.31)$$

Уравнение состояния (2.10), (2.8) включает в себя управляющий и внутренние параметры, существенным образом связанные с функцией чувствительности среды к структурным превращениям. Укажем, что модель содержит четыре материальных константы – m_0 , A_0 , α , μ .

Числовые значения материальных констант приведены в табл. 2.1.

Отмечено, что в качестве функций чувствительности среды к структурным превращениям могут быть предложены и другие аналитические выражения, не совпадающие с (2.26), (2.27), в том числе кусочные функции.

Постоянные модели высокотемпературной деформации
промышленных алюминиевых сплавов

Марка сплава	Состояние	Вид деформации	Значения констант			
			m_0	α	μ	A_0
АМг5	Деформир.	Растяж.	0,3333	0,54	1,08	-0,8434
		Сжатие	0,3333	0,54	1,08	-0,8434
Д18Т	Деформир.	Растяж.	0,3965	0,5	1,2	-1,0987
		Сжатие	0,3965	0,5	1,2	-1,0987
1561	Деформир.	Растяж.	0,3717	0,6	1,2	-2,8445
1561	Литое	Сжатие	0,3497	0,65	1,07	-1,394
В95	Деформир.	Сжатие	0,49	0,3	1,5	-1,5759
В48	Деформир.	Сжатие	0,4482	0,41	1,32	-1,3623
АК4	Деформир.	Растяж.	0,2428	0,4	1,33	-1,2622
		Сжатие	0,2428	0,4	1,33	-1,2622
АК6	Деформир.	Растяж.	0,2846	0,45	1,1	-1,3922
		Сжатие	0,2732	0,43	1,09	-1,3318
АК8	Деформир.	Сжатие	0,2846	0,45	1,1	-1,3922

Выводы

1. Предложено макрокинетический анализ теплофизических и деформационных эффектов в режимах сверхпластичности и пограничных областях термопластичности и высокотемпературной ползучести алюминиевых сплавов осуществлять с привлечением модели, пригодной для описания указанных процессов.

2. В качестве энергетической функции состояния выбран потенциал катастрофы сборки. Уравнение состояния получено минимизацией потенциала по параметру порядка и дополнено кинетическими уравнениями для управляющего параметра и внутренних параметров состояния.

III. ЭЛЕМЕНТЫ САМООРГАНИЗАЦИИ ПРИ ДИНАМИЧЕСКОЙ СВЕРХПЛАСТИЧНОСТИ

В предыдущем разделе сформулирована модель, описывающая поведение промышленных алюминиевых сплавов как в условиях сверхпластичности, так и в пограничных областях термопластичности и высокотемпературной ползучести.

Установлено, что динамическая сверхпластичность реализуется в условиях неравновесного фазового перехода (динамической рекристаллизации), размытого по температурам и скоростям деформации. Естественным представляется оценить установленные зависимости с точки зрения определения представляющих интерес физических величин и получения дополнительной информации. Поэтому логичным можно считать изучения аналогий между фазовыми переходами, происходящими в условиях теплового равновесия и далеких от теплового равновесия. В связи с этим проследим за поведением функций отклика, которые сравнительно легко определяются при известном аналитическом выражении плотности потенциала, - удельной теплоемкости и энтропии.

3.1. Некоторые особенности теории фазовых переходов Ландау

Введем в рассмотрение свободную энергию F , зависящую от температуры, силовых и кинематических характеристик [20]. Ответственность за текущее состояние возложим, как и выше, на параметр порядка η . Полагаем, что F равняется минимальному значению свободной энергии при фиксированном значении η . Разлагая F в ряд по степеням η , можем записать

$$F(\eta, \theta) = F(0, \theta) + F'(0, \theta)\eta + \dots + \frac{1}{4!} F^{IV}(0, \theta)\eta^4 + \dots \quad (3.1)$$

Здесь, как и выше, θ – абсолютная температура.

Для случая симметрии по отношению к инверсии будем иметь [50].

$$F' = F''' = 0 \quad (3.2)$$

Обсудим эту ситуацию. Запишем F в виде

$$F(\eta, \theta) = F(0, \theta) + \frac{\beta}{2} \eta^2 + \frac{1}{4} m_0 \eta^4, \quad (3.3)$$

где $m_0 - \text{const}$, а оценка влияния коэффициента β будет обсуждена ниже.

Для установления соответствия результатов раздела II с теорией фазовых переходов Ландау отождествим (3.3) с потенциалом катастрофы сборки (2.7).

Из термодинамики известно [58], что кинетическая энергия f есть распределение вероятностей, если свободную энергию F рассматривать как функцию параметра порядка η , причем

$$f = N \exp\left(-\frac{F}{k\theta}\right), \quad (3.4)$$

где k – постоянная Больцмана, N – нормирующий множитель.

Отсюда следует, что наиболее вероятное значение параметра порядка определяется требованием $F = F_{\min}$. Очевидно, что минимум (3.3) внешне не будет отличаться от минимума плотности потенциала катастрофы сборки (2.7).

Исследуем положение упомянутого минимума как функции параметра β . В теории фазовых переходов Ландау β задается в виде

$$\beta = \bar{\beta}(\theta - \theta_c); \quad (\bar{\beta} > 0) \quad (3.5)$$

Представление (3.5) означает, что при достижении критической температуры $\theta = \theta_c$ величина β меняет знак. Иными словами, следует различать две области: $\theta < \theta_c$ (упорядоченное состояние, $\beta > 0$), $\theta > \theta_c$ (неупорядоченное состояние, $\beta < 0$).

Для упорядоченного состояния минимум F (или Φ) лежит в точке $\eta = 0$. Энтропия S связана со свободной энергией формулой [58]

$$S = -\frac{\partial F(0, \theta)}{\partial \theta}. \quad (3.6)$$

Вторая производная от F по температуре дает удельную теплоемкость

$$C = \theta \left(\frac{\partial S}{\partial \theta} \right). \quad (3.7)$$

Теперь с учетом (3.3) вычислим функцию энтропии. Имеем

$$S = -\frac{\partial F(0, \theta)}{\partial \theta} - \frac{1}{2} \eta^2 \frac{\partial \beta}{\partial \theta}. \quad (3.8)$$

При условии (3.5) выражение (3.8) переписывается так

$$S = -\frac{\partial F(0, \theta)}{\partial \theta} - \frac{\bar{\beta}}{2} \eta^2. \quad (3.9)$$

Удельная теплоемкость определяется формулой

$$C = -\theta \frac{\partial^2 F(0, \theta)}{\partial \theta^2}. \quad (3.10)$$

Для неупорядоченного состояния имеется другое равновесное значение, отвечающее минимуму свободной энергии (3.3). Приравняв нулю производную (3.3) по параметру порядка, получим

$$\eta = \pm \left(-\frac{\beta}{m_0} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (3.11)$$

Для этого состояния функция энтропии с учетом (3.5) будет равна

$$S = -\frac{\partial F(0, \theta)}{\partial \theta} + \frac{\bar{\beta}^2}{2m_0} (\theta - \theta_c). \quad (3.12)$$

Удельная теплоемкость при известной функции энтропии (3.12) определяется выражением

$$C = \theta \left(-\frac{\partial^2 F(0, \theta)}{\partial \theta^2} + \frac{\bar{\beta}^2}{2m_0} \right). \quad (3.13)$$

Сопоставим при температуре $\theta = \theta_c$ значения энтропии (3.6) и (3.12). Легко видеть, что эти величины совпадают. Для теплоемкостей при этом имеем

$$C|_{\theta_c-0} = -\theta \frac{\partial^2 F}{\partial \theta^2}; \quad C|_{\theta_c+0} = \theta \left(-\frac{\partial^2 F}{\partial \theta^2} + \frac{\bar{\beta}^2}{2m_0} \right). \quad (3.14)$$

Таким образом, при $\theta = \theta_c$ функция удельной теплоемкости претерпевает разрыв непрерывности. Описанное явление называется фазовым переходом второго рода – разрыв получает вторая производная от свободной энергии. Поскольку энтропия есть непрерывная функция, то фазовый переход принято считать непрерывным.

Из сказанного можно заключить, что теория Ландау описывает фазовые переходы в равновесных системах неадекватно. В точке фазового перехода удельная теплоемкость и, по-видимому, другие физические величины имеют особенности, описываемые критическими показателями. Экспериментальные измеренные значения в общем случае не согласуются с предсказаниями теории Ландау [19, 49]. Главное здесь кроется в неадекватном учете флуктуаций.

3.2. О возможностях метода ренормализационной группы Вильсона

Учет флуктуаций для равновесных систем можно производить с привлечением ренормализационной группы Вильсона. Идея ренормализационной группы и ε -разложения создает основу для более аккуратного рассмотрения явлений, нежели теория Ландау. Последнюю можно считать начальным шагом в описании эффектов, которые имеют место в критической точке, а метод ренормализационной группы и ε -разложения – следующим [59].

Основная идея метода ренормализационной группы состоит [59] в том, что вероятность (3.4) интегрируется по коротковолновым флуктуациям, а это дает эффективный гамильтониан для длинноволновых флуктуаций. Постулируется, что в области меньшей корреляционной длины происходит лишь мультипликативная перенормировка температуры и кинематических переменных. Многократное “огрубление” позволяет изучить поведение термодинамических величин и корреляционных функций при фазовых переходах. Корреляционная длина устанавливается по ведущей сингулярности $f(\eta)$ (3.4).

Исходным пунктом является некоторый «затравочный» гамильтониан (гамильтониан Гинзбурга – Ландау), дающий распределение вероятностей. Интегрируется быстро флуктуирующий компонент поля $f = f\left(\frac{F}{k\theta}\right)$, а медленно флуктуирующие переменные остаются непроинтегрированными.

Такой подход можно считать реализацией идеи о возникновении синергетического эффективного взаимодействия.

Мерой взаимодействия, следуя [59], будем считать квадрат параметра порядка η^2 . Среднее значение от η^2 равняется

$$\langle \eta^2 \rangle = \frac{\int \eta^2 f\left(\frac{F}{k\theta}\right) d\eta}{\int f\left(\frac{F}{k\theta}\right) d\eta}, \quad (3.15)$$

причем η^2 принимается за эффективный радиус корреляции.

В [59] предложено «сократить» количество переменных, переходя от $\frac{F}{k\theta}$ к потенциалу Ландау Φ , полагая, что

$$\Phi = -\frac{F}{k\theta}, \quad (3.16)$$

где F , как и выше, – свободная энергия Гельмгольца; k – постоянная Больцмана; θ – абсолютная температура.

С учетом (3.16) зависимость (3.4) перепишется так

$$f = N \exp(-\Phi), \quad (3.17)$$

где N – нормирующий множитель, а $\frac{F}{k\theta} \rightarrow \Phi$ определяется как ренормализационная группа.

3.3. Сверхпластичность как размытый фазовый переход

Перейдем к анализу неравновесной системы, принятой для моделирования деформационного поведения материала, одним из этапов в иерархии состояний которого является сверхпластичность.

Акцентируем внимание на реакции неравновесной системы на поведение функции отклика, аналогичные разрывам теплоемкости и непрерывности энтропии, следующим из теории фазовых переходов Ландау.

Легко видеть, что потенциал катастрофы сборки, принятый в качестве энергетической функции состояния (2.7), и термодинамический потенциал Ландау с учетом влияния внешнего поля имеют одинаковое написание, которое приведем снова

$$\Phi(\eta, \beta) = \frac{1}{4} m_0 \eta^4 + \frac{1}{2} \beta \eta^2 - q \eta. \quad (3.18)$$

В модели (2.8), (2.10) управляющий параметр β принят как эволюционный, для которого записано соответствующее кинетическое уравнение (2.26). Аналогичный параметр (3.5) в теории Ландау принят меняющимся скачкообразно.

По существу в самой модели (2.8), (2.10) априорно введено условие непрерывности. И, действительно, удельная теплоемкость не может быть разрывной функцией из физических соображений.

Отметим, что прямые данные об изменении теплоемкости в зависимости от термомеханических переменных являются достаточно редким результатом. Это, по – видимому, объясняется техническими трудностями проведения прецизионных теплофизических измерений в механических экспериментах. Исключение составляют опыты [39], проведенные на сплаве *Zn-22%Al*. Результаты указанных опытов приведены на рис. 3.1, который заимствован из [39].

Из графиков, представленных на рис. 3.1 видно, что оптимальная температура сверхпластичности соответствует максимуму удельной теплоемкости. Непрерывность функции удельной теплоемкости подтверждает связь сверхпластичности с многостадийным размытым фазовым переходом [49].

Как известно [18], наложение внешней силы приводит к расширению области фазового перехода и последний становится размытым; вместо дискретной точки появляется некоторый температурный интервал, в котором происходит фазовый переход. Соответственно можно ожидать, что при деформировании рассматриваемого сплава при температуре около θ_c этот

сплав не выходит из области фазового превращения. Другими словами, во время сверхпластической деформации металл претерпевает фазовое превращение.

Исследование функций энтропии и удельной теплоемкости позволяет рассматривать процесс деформации с позиций самоорганизации диссипативных структур возрастающей сложности в неравновесных открытых системах [36].

3.4. Вероятностная оценка параметра порядка

Пусть плотность термодинамического потенциала выражается через свободную энергию формулой (3.16). С учетом этого среднеквадратичное отклонение параметра порядка (3.15) будет определяться так

$$\langle \eta^2 \rangle = \frac{\int \eta^2 \exp(-\Phi) d\eta}{\int \exp(-\Phi) d\eta}. \quad (3.19)$$

Заменим термодинамический потенциал потенциалом катастрофы сборки (3.18). Очевидно, что для квадрата параметра порядка будем иметь

$$\eta^2 = 2 \frac{\partial \Phi}{\partial \beta}. \quad (3.20)$$

Подставим (3.20) в (3.19) и получим

$$\langle \eta^2 \rangle = 2 \frac{\int \frac{\partial \Phi}{\partial \beta} \exp(-\Phi) d\eta}{\int \exp(-\Phi) d\eta}. \quad (3.21)$$

Покажем, что выражение (3.21) аналогично следующему

$$\frac{1}{2} \langle \eta^2 \rangle = - \frac{\partial}{\partial \beta} \ln \int \exp(-\Phi) d\eta. \quad (3.22)$$

Действительно, для правой части (3.22) можем записать

$$- \frac{\partial}{\partial \beta} \ln \int \exp(-\Phi) d\eta = - \frac{\frac{\partial}{\partial \beta} \int \exp(-\Phi) d\eta}{\int \exp(-\Phi) d\eta} = \frac{\int \frac{\partial \Phi}{\partial \beta} \exp(-\Phi) d\eta}{\int \exp(-\Phi) d\eta}.$$

Для вычисления интеграла (3.22) полагаем, что подынтегральная функция имеет максимум при любом значении параметра порядка, принадлежащего

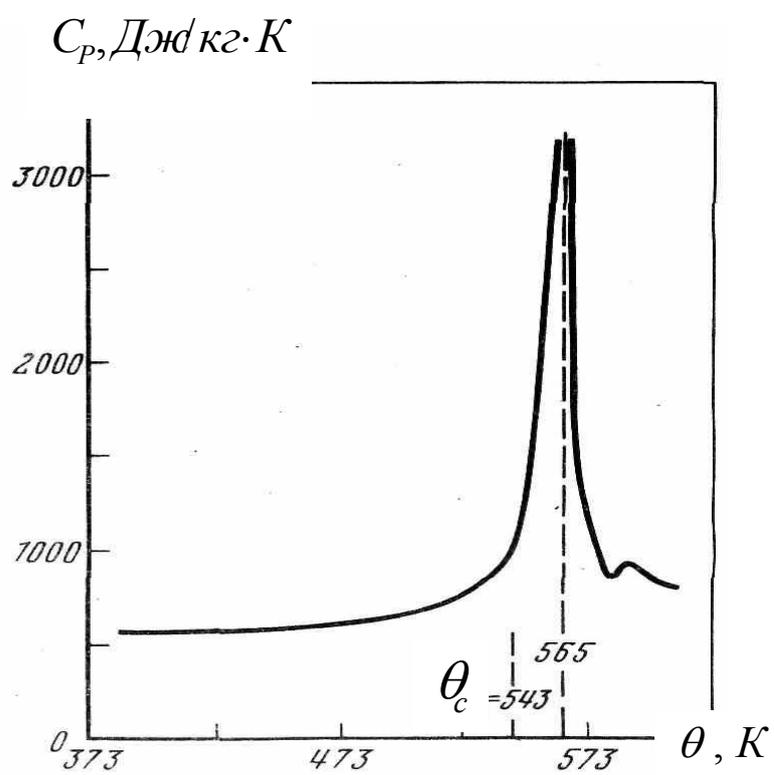


Рис. 3.1. Температурная зависимость удельной теплоемкости сплава $Zn-22\%Al$.

диапазону сверхпластичности. Пусть при этом занято одно значение $\eta = \bar{\eta}$. Это допущение позволяет учесть обстоятельство, называемое при фазовом переходе второго рода нарушением симметрии [19].

Вводим разложение для минимального значения Φ , ограничиваясь только квадратичными членами,

$$\Phi = \Phi(\bar{\eta}) + \frac{1}{2}\Phi''(\eta)(\eta - \bar{\eta})^2. \quad (3.23)$$

Подставляем (3.23) в интеграл (3.22). Имеем

$$\frac{1}{2}\langle \eta^2 \rangle = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln \left\{ \int \exp \left[-\Phi(\bar{\eta}) - \frac{1}{2}\Phi''(\eta)(\eta - \bar{\eta})^2 \right] d\eta \right\}. \quad (3.24)$$

Поскольку $\bar{\eta}$ как максимальное значение из диапазона сверхпластичности принимается постоянным, последний интеграл переписывается так

$$\frac{1}{2}\langle \eta^2 \rangle = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln \left\{ \exp(-\Phi(\bar{\eta})) \int \exp \left[\left(-\frac{1}{2}\Phi''(\eta) \right) (\eta - \bar{\eta})^2 \right] d\eta \right\}. \quad (3.25)$$

Далее получаем

$$\frac{1}{2}\langle \eta^2 \rangle = \frac{\partial \Phi(\bar{\eta})}{\partial \beta} - \frac{\partial}{\partial \beta} \ln \int \exp \left[\left(-\frac{1}{2}\Phi''(\eta) \right) (\eta - \bar{\eta})^2 \right] d\eta. \quad (3.26)$$

Интеграл в (3.26) вычислим в пределах от нуля до бесконечности, поскольку реализуется случайный процесс. В соответствии с [33] вычисление дает

$$\int_0^{\infty} \exp \left[\left(-\frac{1}{2}\Phi''(\eta) \right) (\eta - \bar{\eta})^2 \right] d\eta = \left(\frac{\pi}{2\Phi''(\bar{\eta})} \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (3.27)$$

Теперь вместо (3.26) может записать

$$\frac{1}{2}\langle \eta^2 \rangle = \frac{\partial \Phi(\bar{\eta})}{\partial \beta} - \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \beta} \ln \left[\frac{\pi}{2\Phi''(\bar{\eta})} \right] \quad (3.28)$$

Полагаем в (3.18) $\eta = \bar{\eta}$ и вычисляем

$$\frac{\partial \Phi(\bar{\eta})}{\partial \beta} = \bar{\eta}^2; \quad (3.29)$$

$$\frac{\partial^2 \Phi(\bar{\eta})}{\partial \bar{\eta}^2} = 3m_0 \bar{\eta}^2 + \beta. \quad (3.30)$$

Обратимся к второму слагаемому (3.28). Из него получаем

$$\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \beta} \ln \left[\frac{\pi}{2\Phi''(\bar{\eta})} \right] = \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \beta} \left(\ln \frac{\pi}{2} - \ln \Phi''(\bar{\eta}) \right) = -\frac{1}{2} \frac{\frac{\partial}{\partial \beta} \Phi''(\bar{\eta})}{\Phi''(\bar{\eta})}. \quad (3.31)$$

Величина $\Phi''(\bar{\eta})$ уже найдена – (3.30). Числитель (3.31) будет равен

$$\frac{\partial}{\partial \beta} \Phi''(\bar{\eta}) = 1. \quad (3.32)$$

Таким образом, окончательно для среднеквадратичного отклонения параметра порядка будет иметь

$$\langle \eta^2 \rangle = \bar{\eta}^2 + \frac{1}{3m_0 \bar{\eta}^2 + \beta}. \quad (3.33)$$

Полученный результат означает, что диапазон параметра порядка по температурам в условиях сверхпластичности ограничен значениями $\eta = \bar{\eta}$ и равняется

$$\bar{\eta} = \pm \left(\frac{\beta}{3m_0} \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (3.34)$$

Последнее соответствует модельным представлениям, изложенным в разделе II, причем разрывы отвечают точкам бифуркации, при переходе через которые свойства среды кардинально меняются.

3.5. Удельная теплоемкость

При определении удельной теплоемкости в рамках соотношений (2.7)...(2.31) следует учесть зависимость параметров порядка как от кинематических переменных, так и от температуры. Кроме этого, в процедуру описания закономерностей входит непрерывность управляющего параметра β (2.20) и внутренних параметров состояния σ^* (2.17), $\dot{\varepsilon}^*$ (2.23). Иными словами, для функций отклика априорно, как указывалось выше, заложена

непрерывность.

Удельную теплоемкость будем определять по известной формуле (3.14), которую перепишем еще раз

$$\Delta C = -\theta \left(\frac{\partial^2 F}{\partial \theta^2} \right), \quad (3.35)$$

где F , – как и выше, свободная энергия.

Полагаем далее, что плотность потенциала можно [59] через свободную энергию можно выразить как $\Phi = F/k\theta$ (3.16), где k – постоянная Больцмана.

С учетом этого формула (3.35) будет иметь следующий вид:

$$\Delta C = -k\theta \left[2 \frac{\partial \Phi}{\partial \theta} + \theta \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \theta^2} \right]. \quad (3.36)$$

Вычислим первое слагаемое, входящее в зависимость (3.36). Имеем

$$2 \frac{\partial \Phi}{\partial \theta} = 2 \frac{\partial \Phi}{\partial \xi} \cdot \frac{d\theta}{d\xi}, \quad (3.37)$$

где ξ – приведенная температура (2.8), причем

$$\frac{d\xi}{d\theta} = \frac{1}{\Delta\theta_c}; \quad (3.38)$$

$\Delta\theta_c = \theta_c^s - \theta_c^n$ – температурный диапазон сверхпластичности.

Теперь получаем

$$2 \frac{\partial \Phi}{\partial \theta} = \frac{2}{\Delta\theta_c} \left(\frac{1}{2} \eta^2 \frac{d\beta}{d\xi} - \eta \frac{dq}{d\xi} \right). \quad (3.39)$$

Величиной $\frac{d\beta}{d\xi}$ определяется кинетика управляющего параметра β .

Производную $\frac{dq}{d\xi}$ находим при условии постоянства напряжения, при

котором и определяется удельная теплоемкость. Следуя первой формуле (2.8), можем записать

$$\left. \frac{dq}{d\xi} \right|_{\sigma \sim const} = -\frac{\sigma}{\sigma^{*2}} \frac{d\sigma^*}{d\xi} = -\frac{\sigma}{\sigma^*} \frac{d \ln \sigma^*}{d\xi}. \quad (3.40)$$

Учитывая первую формулу (2.8), получим

$$\left. \frac{dq}{d\xi} \right|_{\sigma \sim \text{const}} = -(1+q) \frac{d \ln \sigma^*}{d\xi} \quad (3.41)$$

Теперь слагаемое $2 \frac{\partial \Phi}{\partial \theta}$ принимает вид

$$2 \frac{\partial \Phi}{\partial \theta} = \frac{2}{\Delta \theta_c} \left[\frac{1}{2} \eta^2 \frac{d\beta}{d\xi} + (1+q)\eta \frac{d \ln \sigma^*}{d\xi} \right]. \quad (3.42)$$

После подстановки в (3.42) уравнения состояния (2.10) получаем

$$2 \frac{\partial \Phi}{\partial \theta} = \frac{1}{\Delta \theta_c} \left[\eta^2 \frac{d\beta}{d\xi} + 2\eta \frac{d \ln \sigma^*}{d\xi} + 2m_0 \eta^4 \frac{d \ln \sigma^*}{d\xi} + 2\beta \eta^2 \frac{d \ln \sigma^*}{d\xi} \right]. \quad (3.43)$$

Второе слагаемое, входящее в формулу для удельной теплоемкости, будет представляться в форме

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \theta^2} = \frac{1}{\Delta \theta_c^2} & \left[-\eta \beta \frac{d\beta}{d\xi} \frac{d \ln \sigma^*}{d\xi} - \eta^2 \beta \frac{d\beta}{d\xi} \frac{d \ln \sigma^*}{d\xi} + \frac{1}{2} \eta^2 \frac{d^2 \beta}{d\xi^2} - \beta \left(\frac{d \ln \sigma^*}{d\xi} \right)^2 - \right. \\ & - 4m_0 \eta^3 \beta \left(\frac{d \ln \sigma^*}{d\xi} \right)^2 - 2\eta \beta^2 \left(\frac{d \ln \sigma^*}{d\xi} \right)^2 - \eta \beta \left(\frac{d \ln \sigma^*}{d\xi} \right)^2 - 4m_0 \eta^4 \beta \left(\frac{d \ln \sigma^*}{d\xi} \right)^2 - \\ & \left. - 2\eta^2 \beta^2 \left(\frac{d \ln \sigma^*}{d\xi} \right)^2 + \eta \frac{d^2 \ln \sigma^*}{d\xi^2} + m_0 \eta^4 \frac{d^2 \ln \sigma^*}{d\xi^2} + \beta \eta^2 \frac{d^2 \ln \sigma^*}{d\xi^2} + \eta^2 \frac{d\beta}{d\xi} \frac{d \ln \sigma^*}{d\xi} \right] \quad (3.44) \end{aligned}$$

Подставляя (3.43), (3.44) в (3.36) и располагая по степеням параметра порядка, для удельной теплоемкости получаем выражение

$$\frac{\Delta C(\xi)}{k} = a_0(\xi) + a_1(\xi)\eta + a_2(\xi)\eta^2 + a_3(\xi)\eta^3 + a_4(\xi)\eta^4. \quad (3.45)$$

Здесь

$$a_0(\xi) = (\xi + \nu)^2 \beta \left(\frac{d \ln \sigma^*}{d\xi} \right)^2; \quad (3.46)$$

$$a_1(\xi) = -2(\xi + \nu) \frac{d \ln \sigma^*}{d\xi} + (\xi + \nu)^2 \left[\beta \frac{d\beta}{d\xi} \frac{d \ln \sigma^*}{d\xi} + 2\beta^2 \left(\frac{d \ln \sigma^*}{d\xi} \right)^2 + \beta \left(\frac{d \ln \sigma^*}{d\xi} \right)^2 - \frac{d^2 \ln \sigma^*}{d\xi^2} \right]; \quad (3.47)$$

$$a_2(\xi) = -(\xi + \nu) \left[\frac{d\beta}{d\xi} + 2\beta \frac{d \ln \sigma^*}{d\xi} \right] - (\xi + \nu)^2 \left[-\beta \frac{d\beta}{d\xi} \frac{d \ln \sigma^*}{d\xi} + \frac{1}{2} \frac{d^2 \beta}{d\xi^2} - 2\beta^2 \left(\frac{d \ln \sigma^*}{d\xi} \right)^2 + \right.$$

$$+ \beta \left[\frac{d^2 \ln \sigma^*}{d\xi^2} + \frac{d\beta}{d\xi} \frac{d \ln \sigma^*}{d\xi} \right]; \quad (3.48)$$

$$a_3(\xi) = (\xi + \nu)^2 4m_0 \beta \left(\frac{d \ln \sigma^*}{d\xi} \right)^2 \quad (3.49)$$

$$a_4(\xi) = -2(\xi + \nu)m_0 \frac{d \ln \sigma^*}{d\xi} + (\xi + \nu)^2 4m_0 \beta \left(\frac{d \ln \sigma^*}{d\xi} \right)^2 - (\xi + \nu)^2 m_0 \frac{d^2 \ln \sigma^*}{d\xi^2} \quad (3.50)$$

Приведем формулы для определения составляющих, входящих в (3.46)...(3.50) и являющихся функциями только температуры. Для $\frac{d\beta}{d\xi}$ в

соответствие (2.13), (2.26), (2.27) будем иметь

$$\frac{d\beta}{d\xi} = \frac{2}{\alpha} (\mu - 1)(1 - \beta)^{-\alpha} \frac{2\xi - 1}{1 + \mu(2\xi - 1)^2}; \quad (3.51)$$

где α, μ - постоянные материала [33].

Следовательно,

$$\frac{d^2 \beta}{d\xi^2} = \frac{4}{\alpha} \frac{(1 - \beta)^{-\alpha}}{[1 + \mu(2\xi - 1)^2]^2} \left[1 - \mu(2\xi - 1)^2 + (1 - \beta)^{-\alpha-1} (\mu - 1)(2\xi - 1)^2 \right]. \quad (3.52)$$

Величина β получается интегрированием эволюционного уравнения (3.51) и представляется выражением

$$(1 - \beta)^{-\alpha} = 1 - \frac{1 + \alpha}{2\alpha} \frac{\mu - 1}{\mu} \ln \frac{1 + \mu(2\xi - 1)^2}{1 + \mu}; \quad (3.53)$$

Кинетическое уравнение для внутреннего параметра состояния σ^* (2.17) дает

$$\frac{d \ln \sigma^*}{d\xi} = A_0 \exp \beta \frac{d\beta}{d\xi}; \quad (3.54)$$

и далее

$$\frac{d^2 \ln \sigma^*}{d\xi^2} = A_0 \exp \beta \left[\left(\frac{d\beta}{d\xi} \right)^2 + \frac{d^2 \beta}{d\xi^2} \right]. \quad (3.55)$$

Здесь величина $s = 0$, поскольку вычисления производятся только для диапазона сверхпластичности; A_0 - постоянная материала.

Оценим вклад каждого слагаемого, представленного в правой части формулы (3.45). При этом, поскольку речь идет только о диапазоне сверхпластичности, то полагаем $\eta = \bar{\eta}$ (3.34). На рис. 3.2...3.6 приведены графики зависимостей $a_i(\xi)\bar{\eta}^i$ от нормированной температуры ξ .

Конкретные вычисления выполнены для алюминиевого сплава АМг5 в исходном деформированном состоянии. Параметры материала заимствованы из табл. 2.1: $\alpha = 0,54$; $\mu = 1,08$; $A = -0,8434$. Укажем также, что $\theta_c^s = 783K$; $\theta_c^u = 743K$.

Графики, представленные на рис. 3.2...3.6, сведены к единому масштабу и показаны на рис. 3.7. Очевидно, что слагаемые $a_0(\xi)$; $a_3(\xi)\eta^3$; $a_4(\xi)\eta^4$ можно принять несущественными, практически не влияющими на величину удельной теплоемкости [60,61]. В связи со сказанным уравнение (3.45) можно записать в форме

$$\frac{\Delta C1(\xi)}{k} = a_1(\xi)\eta + a_2(\xi)\eta^2. \quad (3.56)$$

На рис. 3.8...3.11, приведены графики изменения приращения удельной теплоемкости в зависимости от приведенной температуры, построенный на основании соотношений (3.45), (3.56) в условиях сверхпластичности ($\xi \in]1,0[$). Параметры материала взяты для сплава АМг5 в деформированном состоянии.

Как видно из графика, приращение удельной теплоемкости переходит через максимум в середине температурного интервала сверхпластичности. Качественная картина поведения функции $\Delta C/k \sim \xi$ и $\Delta C1/k \sim \xi$ не изменится и для других исследованных материалов, постоянные параметры которых приведены в табл. 2.1. Следовательно, полученный результат находится в соответствии с данными экспериментов, изложенных в [39].

Оценка погрешности вычисления удельной теплоемкости для некоторых сплавов приведены в табл. 3.1 и относятся к середине температурного диапазона сверхпластичности ($\xi = 0.5$).

Оценка погрешности вычисления удельной теплоемкости сверхпластических промышленных алюминиевых сплавов

Марка сплава	АМг5	Д18Т	1561	АК6
$\delta, \%$	4,202	19,237	10,735	7,9181

Из табл. 3.1 видно, что наибольшая сравнительная погрешность вычисленных по формулам (3.45) и (3.56) значений удельной теплоемкости приходится на сплав Д18Т. Здесь следует обратить внимание на интересную «особенность» в поведении сплава Д18Т при температуре $\xi = 0.5$, обусловленную следующим. Известно, что существенный вклад в сверхпластическое течение вносит эффект проскальзывания по границам зерен, сопровождаемый процессами внутризеренной деформации, необходимыми для сохранения сплошности материала и предотвращающими значительную накапливаемость повреждений. У сплава Д18Т в процессе нагрева и деформации измельчение зерна (от 30...300 до 2...5 мкм) происходит более резко по сравнению с остальными исследованными материалами [62]. Середина температурного диапазона $\xi = 0.5$, в свою очередь, отвечает формированию наиболее оптимальной структуры, где отмеченное расхождение наиболее влияет на результат.

3.6 Энтропийная оценка модели

Обратимся теперь к изучению поведения производства энтропии в кинематических и термических условиях сверхпластичности.

Исследование функции энтропии позволяет рассмотреть процесс деформации с позиций самоорганизации диссипативных структур в неравновесных открытых системах [63].

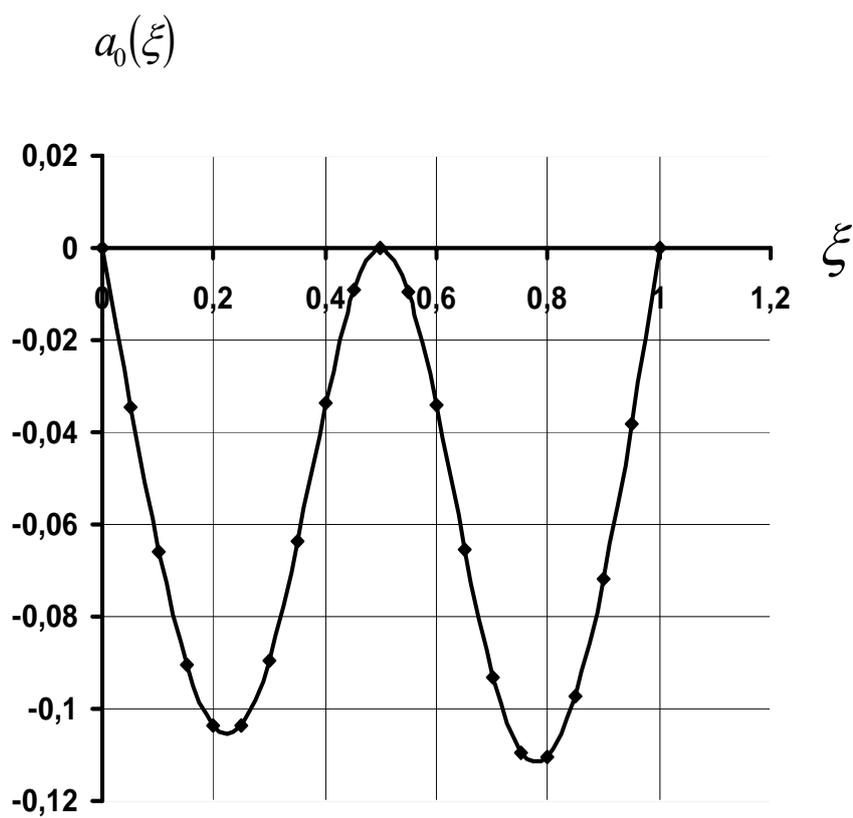


Рис. 3.2. График зависимости слагаемых $a_0(\xi)$ от нормированной температуры ξ из диапазона сверхпластичности при растяжении сплава АМг5.

$$a_1(\xi)\eta$$

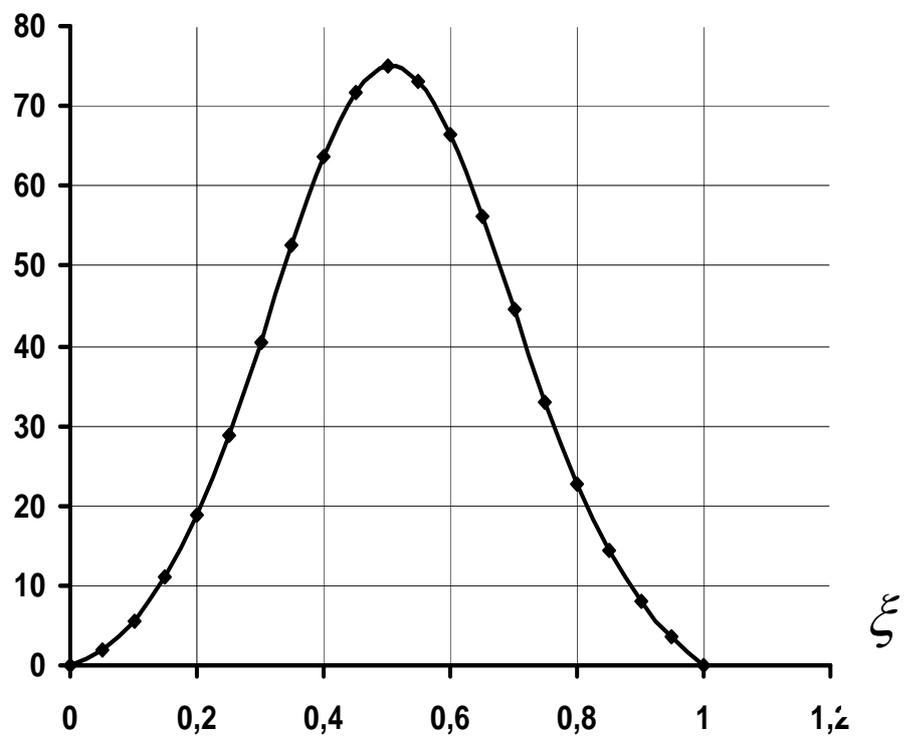


Рис. 3.3. График зависимости слагаемых $a_1(\xi)\eta$ от нормированной температуры ξ из диапазона сверхпластичности при растяжении сплава АМг5.

$$a_2(\xi)\eta^2$$

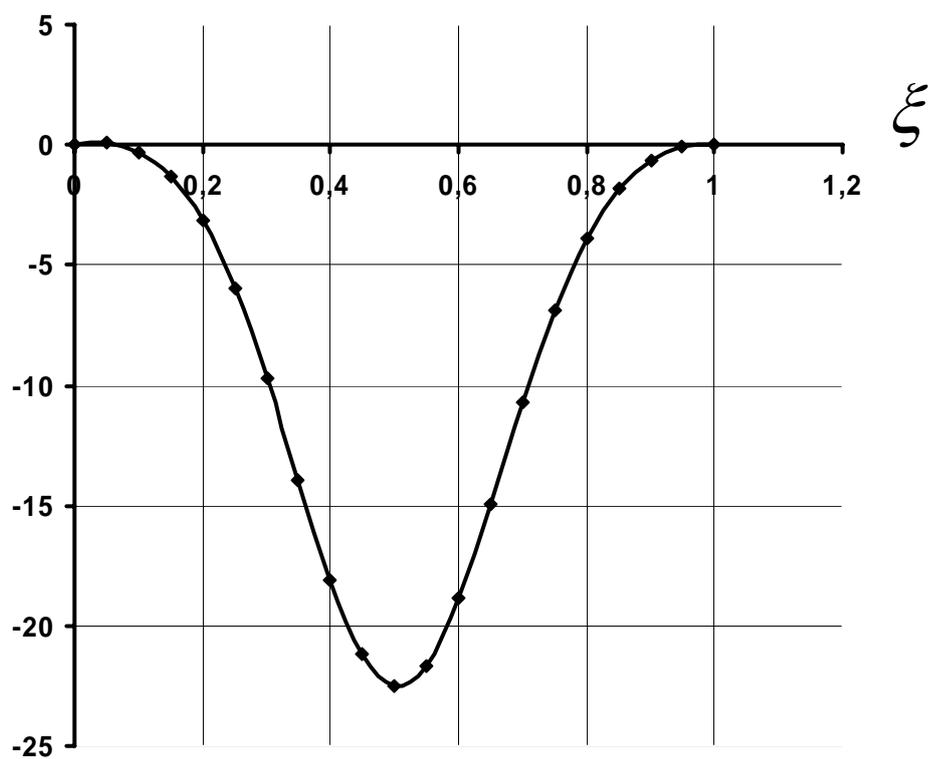


Рис. 3.4. График зависимости слагаемых $a_2(\xi)\eta^2$ от нормированной температуры ξ из диапазона сверхпластичности при растяжении сплава АМг5.

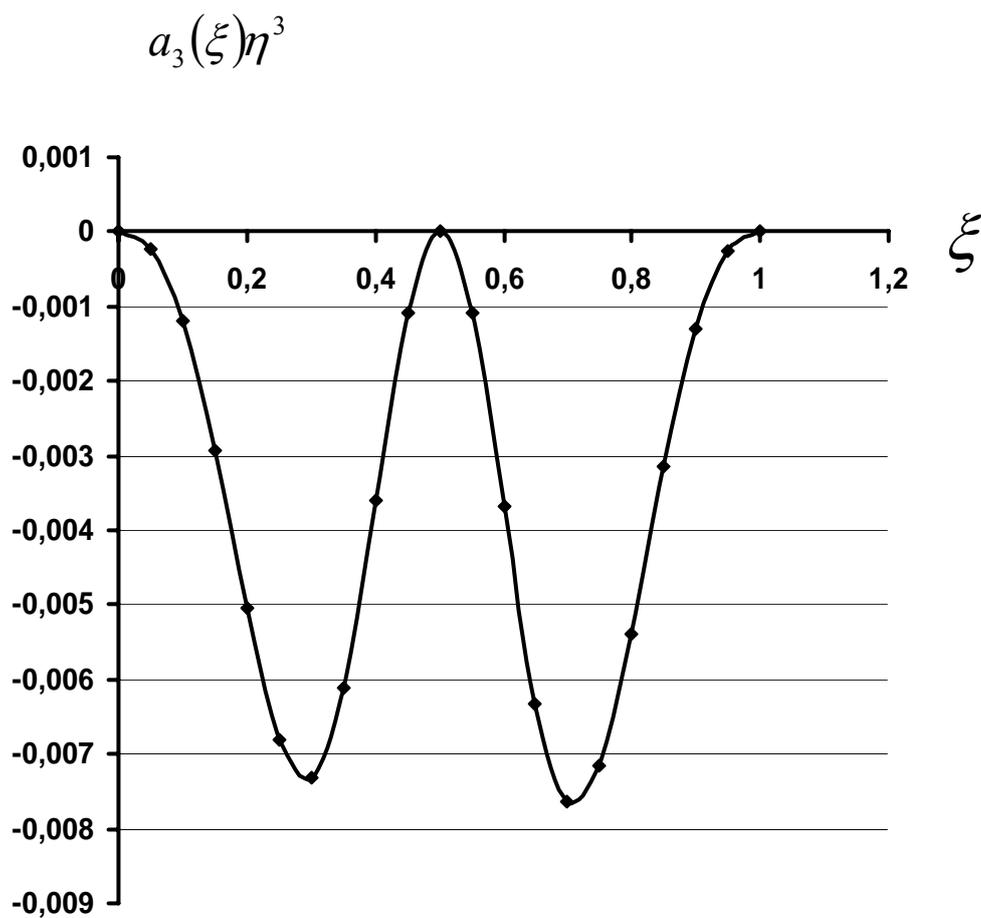


Рис. 3.5. График зависимости слагаемых $a_3(\xi)\eta^3$ от нормированной температуры ξ из диапазона сверхпластичности при растяжении сплава АМг5.

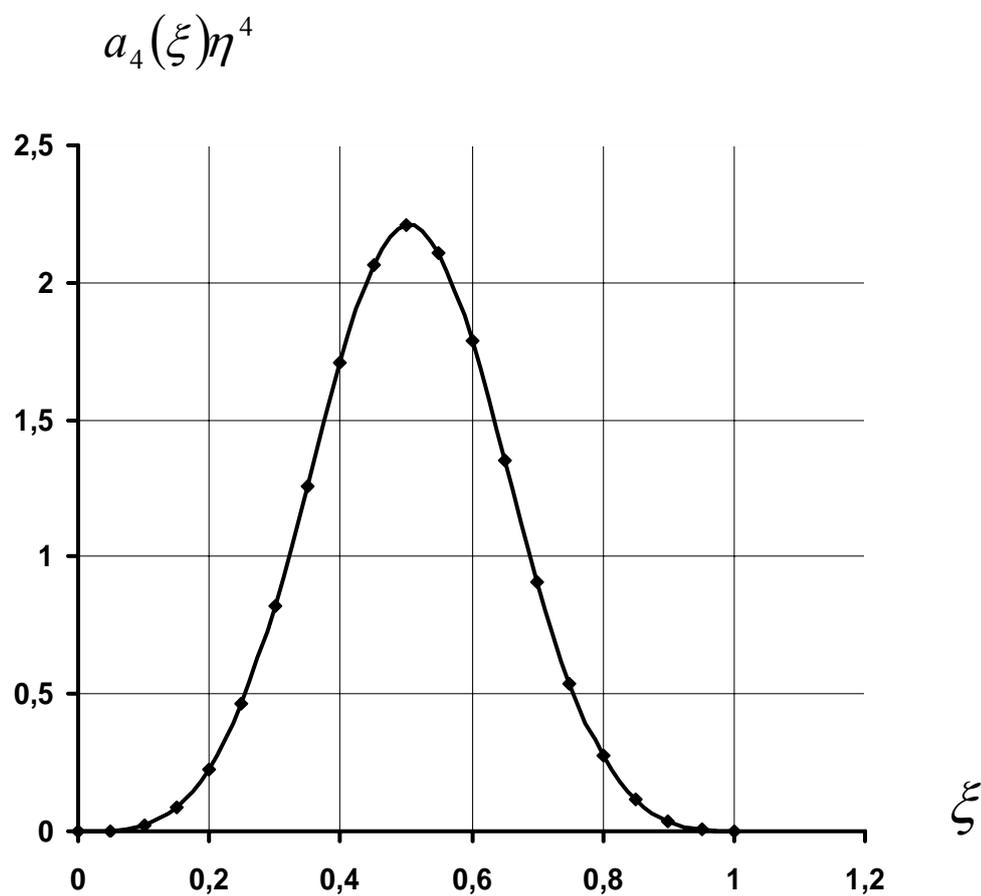


Рис. 3.6. График зависимости слагаемых $a_4(\xi)\eta^4$ от нормированной температуры ξ из диапазона сверхпластичности при растяжении сплава АМг5.

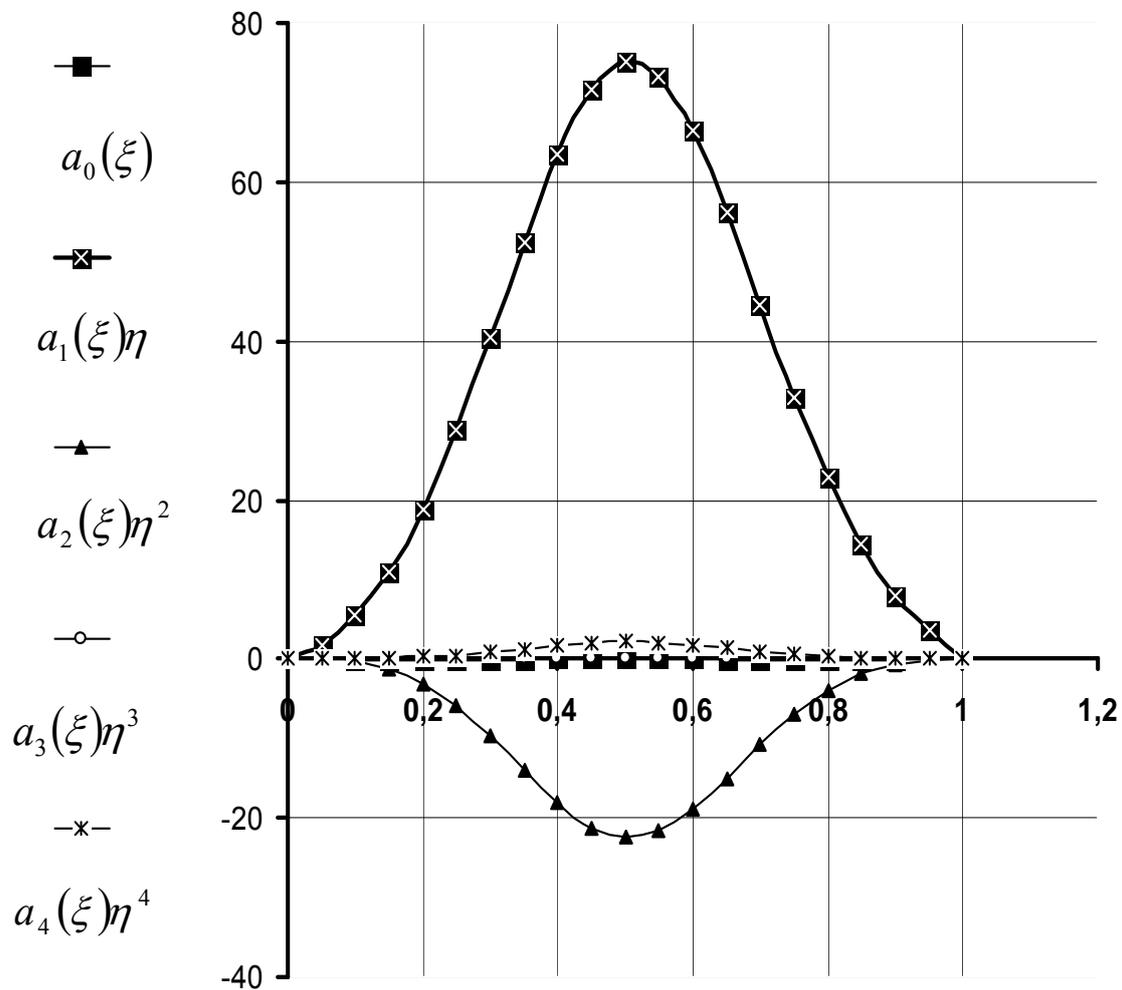


Рис. 3.7. Графики зависимостей слагаемых $a_0(\xi)$, $a_1(\xi)\eta$, $a_2(\xi)\eta^2$, $a_3(\xi)\eta^3$, $a_4(\xi)\eta^4$ от нормированной температуры ξ из диапазона сверхпластичности при растяжении сплава АМг5.

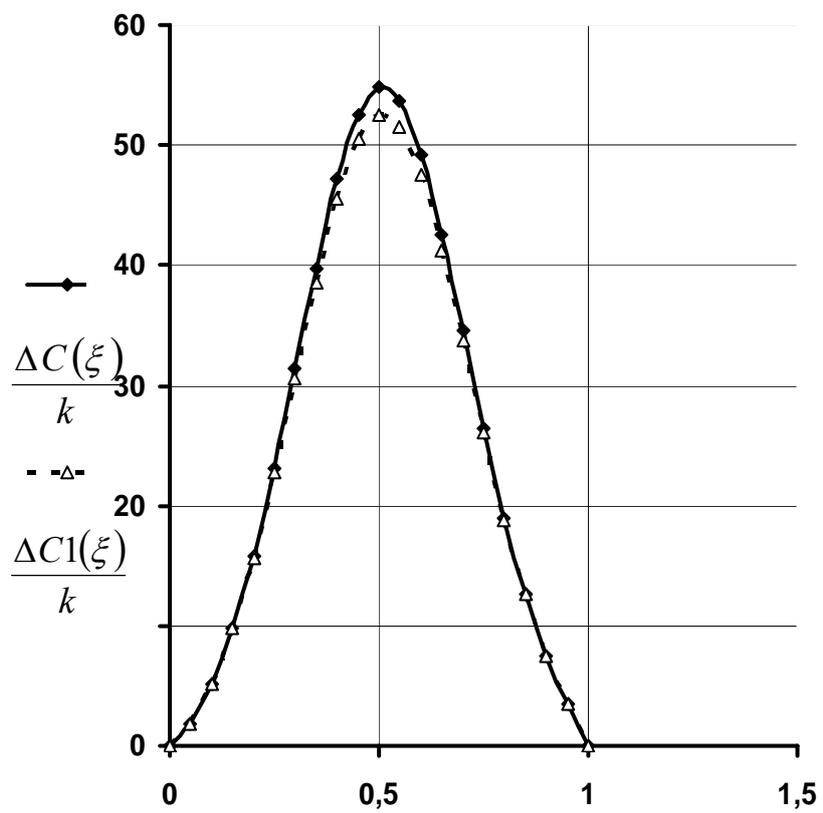


Рис. 3.8. Функция приращения удельной теплоемкости в температурном интервале сверхпластичности при растяжении сплава АМг5.

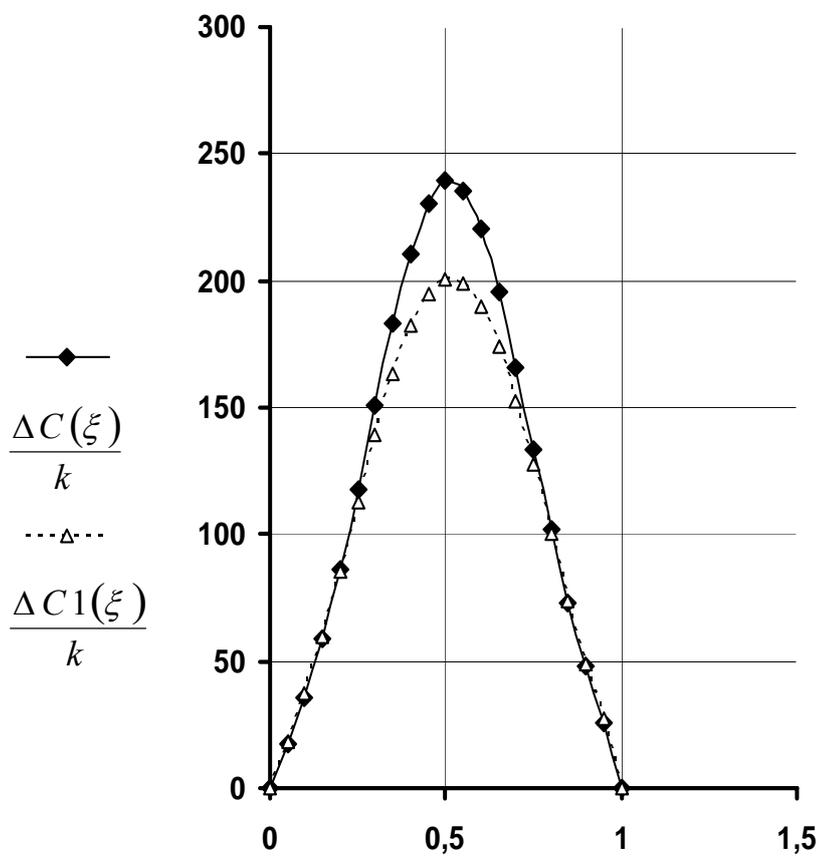


Рис. 3.9. Функция приращения удельной теплоемкости в температурном интервале сверхпластичности при растяжении сплава Д18Т.

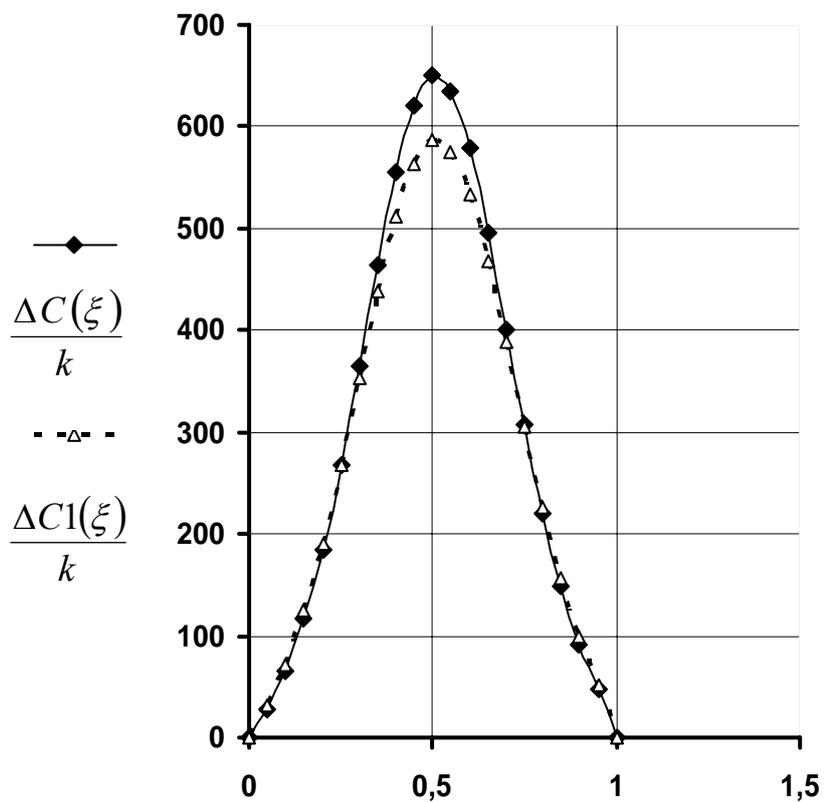


Рис. 3.10. Функция приращения удельной теплоемкости в температурном интервале сверхпластичности при растяжении сплава 1561.

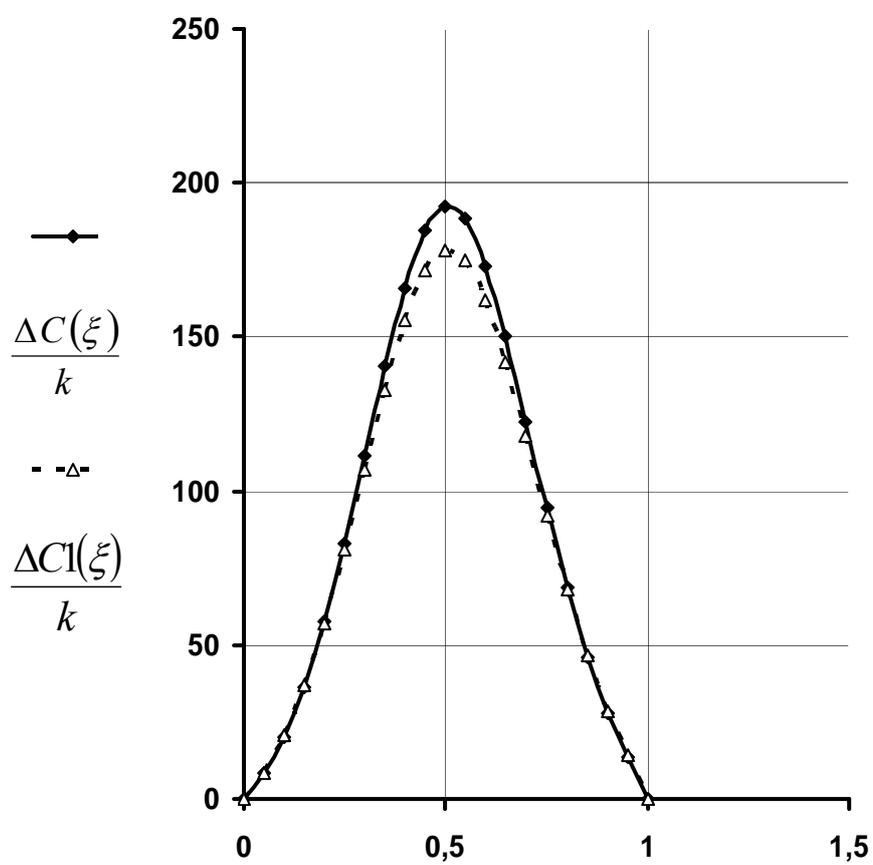


Рис. 3.11. Функция приращения удельной теплоемкости в температурном интервале сверхпластичности при растяжении сплава АК6.

Функция энтропии при известном выражении для свободной энергии определяется формулой (3.6), которую перепишем еще раз

$$S = -\frac{\partial F}{\partial \theta} . \quad (3.57)$$

Если учесть, как и выше, что свободная энергия и плотность потенциала связаны соотношением $\Phi = F/k\theta$ и при формулировке модели энергетическая функция состояния была принята в форме потенциала катастрофы сборки (2.7) с учетом влияния внешнего поля, то для приращения производства энтропии [74] получим

$$\frac{\Delta S}{k} = \frac{3}{4}m_0\eta^4 + \frac{1}{2}\beta\eta^2 + (\xi + \nu) \left[\frac{1}{2} \frac{d\beta}{d\xi} \eta^2 - \beta(3m_0\eta^3 + 3m_0\eta^4 + \beta\eta^2 + \beta\eta) \frac{d \ln \sigma^*}{d\xi} \right], \quad (3.58)$$

где расшифровка слагаемых дается формулами (3.51)...(3.55).

Результаты расчетов, осуществленных по формуле (3.58), показаны в виде графических зависимостей приращения производства энтропии ($\xi_0 = 0$) от нормированной температуры (рис. 3.12) и параметра порядка (рис. 3.13).

Вычисления производились для приведенных выше констант для сплава АМг5. Характер представленных на рис. 3.12, 3.13 зависимостей качественно повторяется и для других исследованных алюминиевых сплавов.

Отметим следующие особенности полученных закономерностей. Из рис. 3.12 видно, что изменение приращения производства энтропии по температуре в пределах скоростных диапазонов сверхпластичности носит флуктуирующий характер, присущий механизму зернограничного проскальзывания, отвечающий неустойчивому структурному состоянию и наличию динамически возбужденной структуры [33]. При этом в середине термического диапазона сверхпластичности ($\xi = 0,5$) имеем $\Delta S/k = 0$. Значения $\Delta S/k = 0$ при $\xi = 0$; $\xi = 1$ отражают смену структурных состояний – при $\xi = 0$ деформированная или литая структура начинает превращаться в

ультрамелкозернистую, а при $\xi = 1$ осуществляется переход к крупнозернистой рекристаллизованной структуре.

На рис. 3.13 приведены зависимости приращения производства энтропии от скорости деформации ($\Delta S/k \sim \eta$) в условиях сверхпластичности при температурах $\xi = 0,0.1...0,5$ (рис. 3.13 а) и $\xi = 0.5...1$ (рис.3.13 б). Общим для этих температур является тенденция стремления к нулю производства энтропии в среднем значении скоростного интервала сверхпластичности ($\eta=0$) [64].

Середине термического и кинематического диапазонов сверхпластичности ($\xi = 0; \eta = 0$) соответствует нулевое значение приращения производства энтропии.

В заключение отметим следующее. При формулировке модели (2.7) было принято, что сверхпластичность считается особым (структурно неустойчивым) состоянием деформируемого материала в иерархической смене состояний. Указанное состояние трактуется как эффект, осуществляемый в условиях структурного неравновесного фазового перехода. Анализ удельной теплоемкости, приращение которой в режимах сверхпластичности носит пикообразный характер (рис. 3.8...3.11), подтверждает последнее и показывает качественное соответствие известным дилатометрическим испытаниям. Минимизации энтропии отвечает образование упорядоченной равноосной ультрамелкозернистой структуры [33, 44], позволяющей прогнозировать возникновение структурной ситуации, способствующей осуществлению механизма зернограничного проскальзывания. Иными словами, путем самоорганизации в условиях, далеких от термодинамического равновесия, реализуется процесс оптимального структурообразования [64], сопровождающийся выделением [65] энтропии открытой системой.

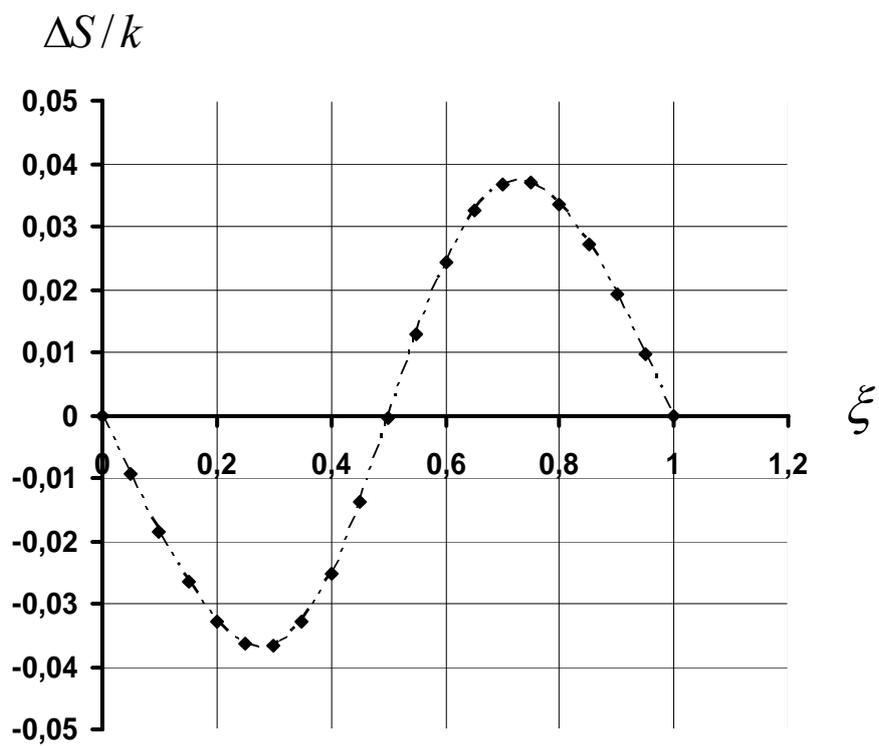


Рис. 3.12. Функция приращения производства энтропии в температурном интервале сверхпластичности.

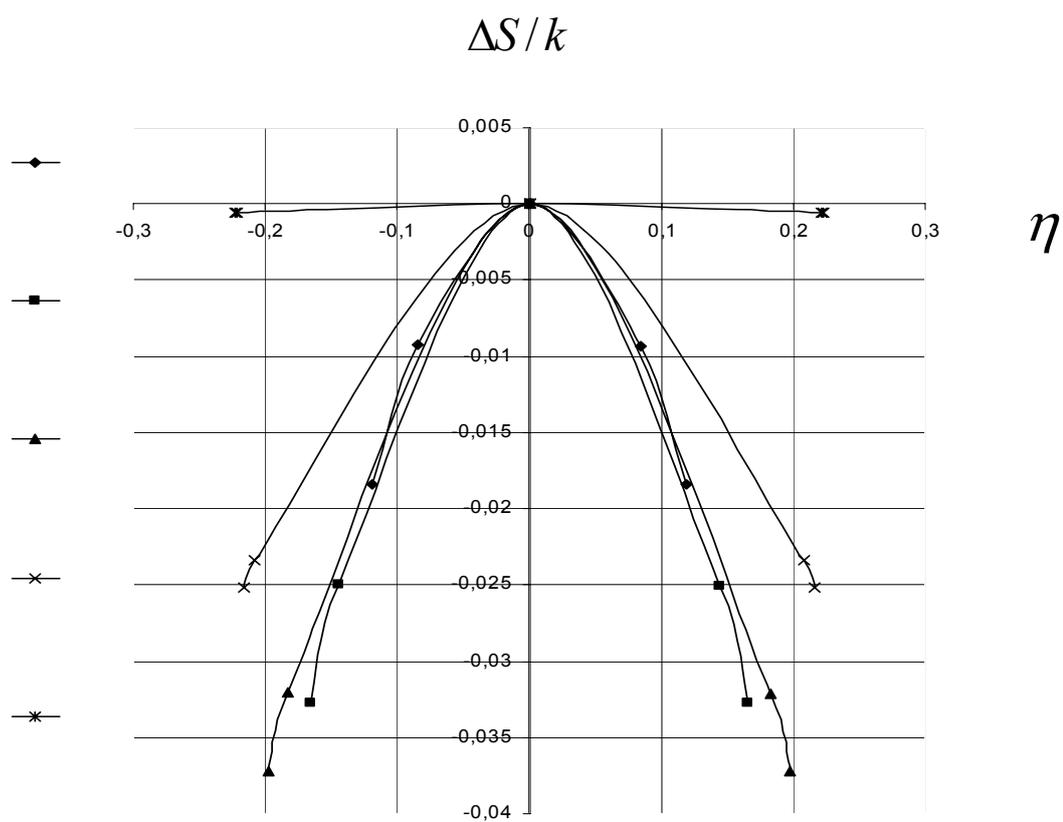


Рис. 3.13,*a*. Зависимость приращения производства энтропии от скорости деформации в условиях сверхпластичности при $\xi = 0, 0.1, \dots, 0.5$.

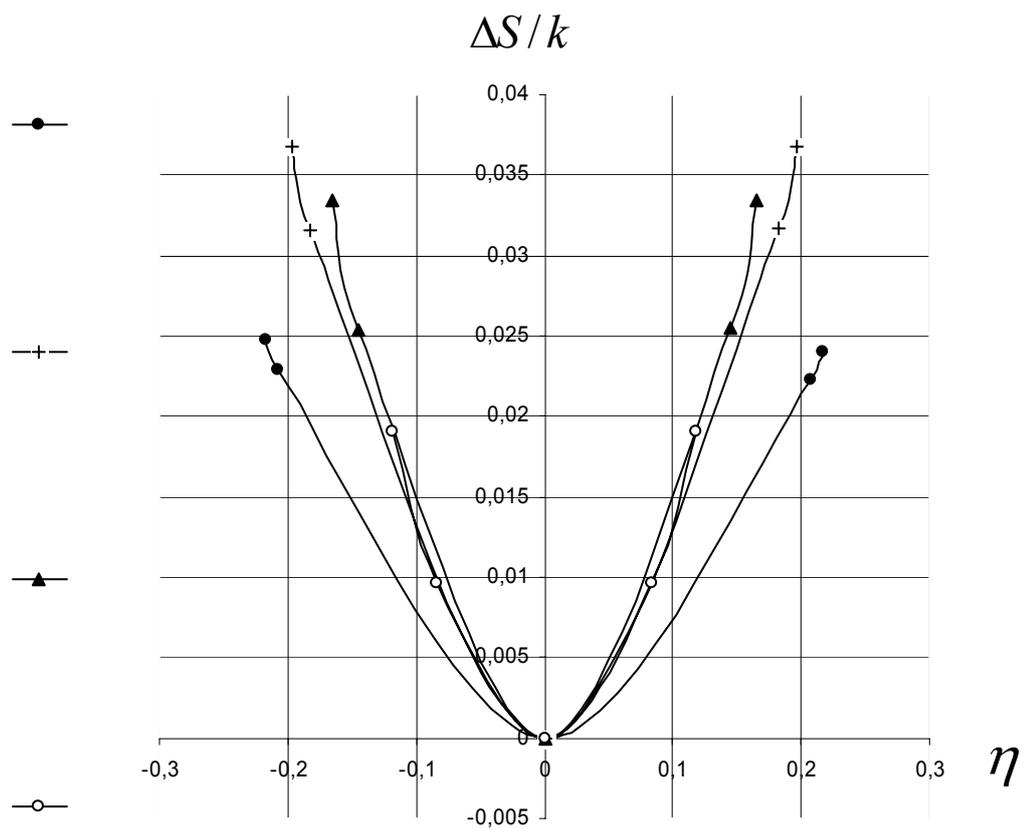


Рис. 3.13, б. Зависимость приращения производства энтропии от скорости деформации в условиях сверхпластичности при $\xi = 0,5, \dots, 1$.

Выводы

1. Сверхпластичность представляется эффектом, реализуемым в термомеханических условиях развития неравновесного размытого фазового перехода. Показано, что для неравновесной системы функция отклика на сильные структурные флуктуации в форме удельной теплоемкости не претерпевает разрыва непрерывности. Вероятностной оценкой параметра порядка доказательно оформлены диапазоны изменения скоростей деформации в термических условиях проявления эффекта сверхпластичности.

2. Установлено, что зависимость приращения удельной теплоемкости от температуры, принадлежащей интервалу сверхпластичности, носит пикообразный характер. Максимуму удельной теплоемкости отвечает оптимальная температура сверхпластичности. Последнее не противоречит известным дилатометрическим испытаниям. Непрерывностью функции удельной теплоемкости объясняется связь сверхпластичности с теорией размытых фазовых переходов.

3. Выявлено, что изучение функции приращения производства энтропии позволило рассмотреть процесс сверхпластичности с позиций самоорганизации диссипативных структур в неравновесных открытых системах. Минимизации энтропии в условиях, далеких от термодинамического равновесия, соответствует оптимальное структурообразование – формирование равноосной ультрамелкозернистой структуры.

IV. МАКРОКИНЕТИКА МЕХАНИЗМОВ ДЕФОРМАЦИИ

4.1. К теории стохастических процессов

Общая теория случайных или стохастических процессов позволяет полуфенологическим образом рассмотреть большой комплекс задач нелинейной статистической механики. Поэтому представляется целесообразным обратить внимание на общие идеи и методы стохастических процессов [66].

Пусть через η обозначена некоторая переменная (параметр порядка). Если бы указанная переменная была детерминированной величиной, то можно было бы построить функцию времени $\eta = \eta(t)$, которая определяла бы значение η в каждый момент времени t по соответствующим начальным условиям при $t = 0$. Однако, если η – случайная переменная, то такой функции не существует. В каждый момент времени переменная η может иметь любое значение, лежащее в области изменения этой переменной. Однако всякому возможному значению η в момент времени t присваивается некоторая вероятность, которая может принимать любое значение, заключенное между нулем и единицей. Поскольку предполагается, что η – непрерывная переменная, то проще и короче говорить о плотности вероятностей. Точнее говоря, утверждается, что значение η случайной переменной в момент времени t обладает плотностью вероятностей $P(\eta, t)$, если существует вероятность $P(\eta, t)d\eta$ найти значение этой переменной в бесконечно малом интервале $(\eta, \eta + d\eta)$.

С одной стороны, интуитивно представляется возможным провести некоторую вероятную траекторию, но ничто не препятствует существованию двух или большего числа равновероятных траекторий.

С другой стороны, для характеристики процесса, вообще говоря, недостаточно задать значение плотности вероятности $P_1(\eta, t)$. Если известно,

что в момент времени t_1 переменная принимает значение η_1 , то это обстоятельство будет влиять на вероятность того, что переменная имеет значение η_2 в момент t_2 , ибо различные точки не обязательно независимы. Иными словами, существует корреляция между событиями, происходившими в моменты t_1 и t_2 . Следовательно, совместную плотность вероятностей $P_2(\eta_1, t_1 | \eta_2, t_2)$ (вероятность того, что в момент времени t_1 переменная принимает значение η_1 , а в момент t_2 - значение η_2) не обязательно можно определить, зная $P_1(\eta_1, t_1)$. Поэтому для полной охарактеризованности случайного процесса необходимо в принципе задать все совместные вероятности $P_1(\eta_1, t_1)$; $P_2(\eta_2, t_2 | \eta_1, t_1)$; $P_3(\eta_3, t_3 | \eta_2, t_2 | \eta_1, t_1)$ и т.д. до бесконечности.

Функция P_n должны обладать некоторыми очевидными свойствами:

- $P_n \geq 0$, поскольку это плотности вероятностей;
- функция $P_n(\eta_n, t_n | \dots | \eta_1, t_1)$ должна быть симметрична относительно перестановок группы переменных (η_1, t_1) среди других групп; это следует из того, что P_n представляет совместную плотность вероятностей;

- функция P_n должна быть согласована со всеми совместными плотностями вероятностей низших порядков:

$$\int d\eta_{m+1} \dots d\eta_n P_n(\eta_n, t_n | \dots | \eta_1, t_1) = P_m(\eta_m, t_m | \dots | \eta_1, t_1) \quad (4.1)$$

Соотношение (4.1) должно выполняться для всех $m < n$, каковы бы ни были значения времени t_1, \dots, t_n .

Обратим внимание на классификацию случайных процессов. Идея классификации заключается в том, что имеются ситуации, в которых для описания задачи достаточно знать одну, две или некоторое конечное число функций P_n . Другими словами, в некоторых случаях функцию высшего порядка P_n можно выразить через функции низших порядков. Остановимся на двух первых классах.

Простейший случай, называемый чисто случайным процессом, имеем, когда для решения задачи достаточно знать функцию $P_1(\eta, t)$. В частности,

$$P_2(\eta_2, t_2 | \eta_1, t_1) = P_1(\eta_2, t_2 | \eta_1, t_1). \quad (4.2)$$

Зависимость (4.2) означает, что в этом случае корреляции во времени отсутствуют. Однако в случае непрерывного физического процесса такое представление нереалистично. Действительно, на достаточно малых промежутках времени между последовательными событиями должна существовать причинная связь.

4.2. Марковские процессы. Уравнение Чепмена – Колмогорова (Смолуховского)

Фундаментальное значение для статистической механики имеет следующий шаг в упомянутой выше классификации случайных процессов, называемых марковскими [66, 67].

Считается, что все информация содержится в двух первых функциях P_1 и P_2 . Для такой характеристики этого процесса удобно ввести представление о вероятности перехода $\omega_2(\eta_2, t_2 | \eta_1, t_1)$, определив ее соотношением

$$P_2(\eta_2, t_2 | \eta_1, t_1) = \omega_2(\eta_2, t_2 | \eta_1, t_1) P_1(\eta_1, t_1). \quad (4.3)$$

Соотношением (4.3), определяющим ω_2 , утверждается, что совместная плотность вероятности найти значение η_1 в момент t_1 и значение η_2 в момент t_2 равняется плотности вероятности нахождения значения η_1 в момент t_1 , умноженной на вероятность перехода от η_1 к η_2 за временной промежуток $t_2 - t_1$.

Из описанных в предыдущем разделе свойств очевидны свойства вероятности перехода ω_2 :

$$- \quad \omega_2(\eta_2, t_2 | \eta_1, t_1) \geq 0; \quad (4.4)$$

$$- \int d\eta_2 \omega_2(\eta_2, t_2 | \eta_1, t_1) = 1; \quad (4.5)$$

$$- P_1(\eta_2, t_2) = \int d\eta_1 \omega_2(\eta_2, t_2 | \eta_1, t_1) P_1(\eta_1, t_1). \quad (4.6)$$

Рассмотрим также вероятность перехода n - порядка

$$\omega_n(\eta_n, t_n | \eta_{n-1}, t_{n-1} | \dots | \eta_1, t_1).$$

Эта вероятность определяется как условная плотность вероятностей обнаружить значение η_n в момент t_n , если в момент $t_{n-1}, t_{n-2} \dots t_1$ переменная η принимала значения $\eta_{n-1}, \eta_{n-2} \dots \eta_1$. При этом предполагается, что временная последовательность упорядочена, т.е. $t_n > t_{n-1} > t_{n-2} > \dots > t_1$.

Теперь марковский процесс можно определить условием

$$\omega_n(\eta_n, t_n | \eta_{n-1}, t_{n-1} | \dots | \eta_1, t_1) = \omega_2(\eta_n, t_n | \eta_{n-1}, t_{n-1};), \quad n \geq 2. \quad (4.7)$$

Условие (4.7) означает, что в марковском процессе вероятность перехода от значения η_{n-1} в момент t_{n-1} к значению η_n в момент t_n зависит только от значения η в момент перехода t_{n-1} и совершенно не зависит от предыстории системы [67].

Теперь легко проверить, что для марковского процесса все совместные плотности вероятностей P_n при $n \geq 3$ выражаются через P_2 и P_1 . Например,

$$\begin{aligned} P_3(\eta_3, t_3 | \eta_2, t_2 | \eta_1, t_1) &= \omega_3(\eta_3, t_3 | \eta_2, t_2 | \eta_1, t_1) P_2(\eta_2, t_2 | \eta_1, t_1) = \\ &= \omega_2(\eta_3, t_3 | \eta_2, t_2) P_2(\eta_2, t_2 | \eta_1, t_1) = \frac{P_2(\eta_3, t_3 | \eta_2, t_2) P_2(\eta_2, t_2 | \eta_1, t_1)}{P_1(\eta_2, t_2)} \end{aligned} \quad (4.8)$$

Используя теперь (4.1) и (4.8), можем записать

$$\begin{aligned} P_2(\eta_3, t_3 | \eta_1, t_1) &= \int d\eta_2 P_3(\eta_3, t_3 | \eta_2, t_2 | \eta_1, t_1) = \\ &= \int d\eta_2 \omega_2(\eta_3, t_3 | \eta_2, t_2) \omega_2(\eta_2, t_2 | \eta_1, t_1) P_1(\eta_1, t_1). \end{aligned}$$

Комбинируя этот результат с соотношением (4.3), получаем

$$\omega_2(\eta_3, t_3 | \eta_1, t_1) = \int d\eta_2 \omega_2(\eta_3, t_3 | \eta_2, t_2) \omega_2(\eta_2, t_2 | \eta_1, t_1) \quad (4.9)$$

Уравнение (4.9) в математической литературе называют уравнением Чепмена – Колмогорова, в литературе по физике – уравнением Смолуховского, которое получено им при исследовании броуновского движения частицы.

Физическая интерпретация интегрального уравнения (4.9) очевидна. Оно дает возможность вычислить вероятность перехода от значения η_1 в момент t_1 к значению η_3 в момент t_3 , если взять произведение вероятности перехода к некоторому значению η_2 в любой промежуточной момент t_2 на вероятности перехода от этого значения к конечному значению в момент t_3 , и просуммировать по всем промежуточным значениям η_2 .

4.3. Уравнение Фоккера – Планка

Обратимся к физически важному случаю, когда вероятность перехода $\omega_2(\eta_2, t_2 | \eta_1, t_1)$ не зависит от момента времени t_1 , в который происходит переход, а определяются только промежутком $t_2 - t_1$. Будучи вероятностью перехода между двумя событиями, ω_2 является единственной независимой вероятностью перехода в марковском процессе. Поэтому индекс «2» в ω_2 в дальнейшем будем опускать, т.е.

$$\omega_2(\eta_2, t_2 | \eta_1, t_1) = \omega(\eta_2 | \eta_1, t_2 - t_1). \quad (4.10)$$

Следуя [66], введем некоторую функцию $L(\eta)$, которая является достаточно регулярной и произвольной. Рассмотрим следующее выражение

$$\begin{aligned} \int d\eta L(\eta) \frac{\partial \omega(\eta | x, \tau)}{\partial \tau} &= \\ &= \lim_{\Delta\tau \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta\tau} \int d\eta L(\eta) \{ \omega(\eta | x, \tau + \Delta\tau) - \omega(\eta | x, \tau) \} = \\ &= \lim_{\Delta\tau \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta\tau} \int d\eta L(\eta) \left\{ \int dz \omega(\eta | z, \Delta\tau) \omega(z | x, \tau) - \omega(\eta | x, \tau) \right\} \end{aligned}$$

Здесь использовано уравнение Чепмена – Колмогорова. Заменяем порядок интегрирования в первом члене и разложим $L(\eta)$ в ряд Тейлора в точке z .
Имеем

$$\begin{aligned}
\int d\eta L(\eta) \frac{\partial \omega(\eta|x, \tau)}{\partial \tau} &= \lim_{\Delta\tau \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta\tau} \left\{ \int dz L(z) \omega(z|x, \tau) \int d\eta \omega(\eta|z, \Delta\tau) + \right. \\
&+ \int dz \frac{\partial L(z)}{\partial z} \omega(z|x, \tau) \int d\eta (\eta - z) \omega(\eta|z, \Delta\tau) + \\
&+ \frac{1}{2} \int dz \frac{\partial^2 L(z)}{\partial z^2} \omega(z|x, \tau) \int d\eta (\eta - z)^2 \omega(\eta|z, \Delta\tau) + \\
&\dots - \int d\eta L(\eta) \omega(\eta|x, \tau) \left. \right\}.
\end{aligned} \tag{4.11}$$

В силу свойства (4.5) первый и последний члены в правой части сокращаются.

Сделаем следующие предположения относительно поведения некоторых функций при $\Delta\tau \rightarrow 0$:

$$\int d\eta (\eta - z) \omega(\eta|z, \Delta\tau) = R(z) \Delta\tau + O[(\Delta\tau)^2]; \tag{4.12}$$

$$\int d\eta (\eta - z)^2 \omega(\eta|z, \Delta\tau) = Q(z) \Delta\tau + O[(\Delta\tau)^2]; \tag{4.13}$$

$$\int d\eta (\eta - z)^n \omega(\eta|z, \Delta\tau) = O[(\Delta\tau)^2]; \quad n \geq 3. \tag{4.14}$$

Такие средние от степеней $(\eta - z)$ называют моментами перехода. Тот факт, что все моменты порядка 3 и выше в пределе $\Delta\tau \rightarrow 0$ пропорциональны, по крайней мере, $(\Delta\tau)^2$, подтверждается физическими примерами, к которым применялась теория [66]. Теорию обобщим, приведя к окончательному результату. При введенных предположениях (4.12)...(4.14) можно в явной форме вычислить предел в уравнении (4.11), а результат проинтегрировать по частям:

$$\begin{aligned}
\int d\eta L(\eta) \frac{\partial \omega(\eta|x, \tau)}{\partial \tau} &= \int dz \omega(z|x, \tau) \left\{ \frac{\partial L(z)}{\partial z} R(z) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 L(z)}{\partial z^2} Q(z) \right\} = \\
&= \int dz L(z) \left\{ -\frac{\partial}{\partial z} [R(z) \omega(z|x, \tau)] + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial z^2} [Q(z) \omega(z|x, \tau)] \right\}.
\end{aligned}$$

После тривиального изменения обозначения переменной интегрирования это уравнение можно переписать так

$$\int d\eta L(\eta) \left\{ \frac{\partial \omega(\eta|x, \tau)}{\partial \tau} + \frac{\partial}{\partial \eta} [R(\eta) \omega(\eta|x, \tau)] - \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial \eta^2} [Q(\eta) \omega(\eta|x, \tau)] \right\} = 0.$$

Последнее равенство справедливо для любой функции $L(\eta)$, откуда следует, что

$$\frac{\partial \omega(\eta|x, \tau)}{\partial \tau} = -\frac{\partial}{\partial \eta} [R(\eta)\omega(\eta|x, \tau)] + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial \eta^2} [Q(\eta)\omega(\eta|x, \tau)] \quad (4.15)$$

Это известное уравнение Фоккера – Планка. Оно играет ведущую роль в статистической физике. На данном этапе отметим аналогию между этим уравнением и уравнением диффузии в макроскопической физике:

$$\frac{\partial n(x, t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 n(x, t)}{\partial x^2}. \quad (4.16)$$

Из математической физики известно, что это параболическое дифференциальное уравнения описывает монотонную необратимую эволюцию любого начального распределения плотности вероятности к равновесному состоянию. Дополнительный член первого порядка в уравнении Фоккера – Планка (4.15) ответственен за систематическое торможение или динамическое трение (коэффициент “дрейфа” [20]). Итак, уравнение Фоккера – Планка описывает суперпозицию процессов трения и диффузии в пространстве переменной η .

Для получения более явной физической картины процесса, заметим, что функция распределения для одного события $P_1(\eta, t)$ также подчиняется уравнению Фоккера – Планка.

Действительно, из соотношений (4.1), (4.3) получаем

$$P_1(\eta, t) = \int dx \omega(\eta|x; (t - t_0)) P_1(x, t_0),$$

где t_0 - произвольный фиксированный момент времени ($t > t_0$).

Следовательно,

$$\frac{\partial P_1(\eta, t)}{\partial t} = \int dx \frac{\partial \omega(\eta|x; (t - t_0))}{\partial t} P_1(x, t_0).$$

Подставляя сюда правую часть (4.15), находим

$$\frac{\partial P_1(\eta, t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial \eta} [R(\eta)P_1(\eta, t)] + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial \eta^2} [Q(\eta)P_1(\eta, t)]. \quad (4.17)$$

Перепишем уравнение Фоккера-Планка следующим образом

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial \eta} \left\{ R(\eta)\psi - \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \eta} [Q(\eta)\psi] \right\}, \quad (4.18)$$

где $\psi = \psi(\eta, t)$ - плотность распределения вероятностей.

Хорошо известно [67], что при исследовании задач статистической динамики и теории случайных процессов возможны два случая задания начальных условий при $t = t_0$:

1. значения ординаты случайной функции $\eta = \eta_0$ являются случайными величинами с известной плотностью вероятности $\psi(\eta_0, t_0)$;
2. значения ординаты случайной функции x_0 являются заданными (неслучайными величинами).

Остановимся на втором случае. При заданном η_0 имеем

$$\psi(\eta, t | \eta_0, t_0) \Big|_{t=t_0} = \delta(\eta - \eta_0). \quad (4.19)$$

Это условие получим так. При известном η_0 вероятность того, что возможные значения $\eta > \eta_0$ и $\eta < \eta_0$ равна нулю. Поэтому плотность вероятности при $t = t_0$ должна удовлетворять условию

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi(\eta, t) d\eta = 1. \quad (4.20)$$

Последний интеграл можно представить в виде суммы

$$\int_{-\infty}^{\eta_0 - \varepsilon} \psi(\eta, t_0) d\eta + \int_{\eta_0 - \varepsilon}^{\eta_0 + \varepsilon} \psi(\eta, t_0) d\eta = \int_{\eta_0 + \varepsilon}^{\infty} \psi(\eta, t_0) d\eta = 1, \quad (4.21)$$

где ε – малая положительная величина.

Первый и третий интеграл выражения (4.21) равны нулю, поскольку представляют вероятности значений η , меньших и больших η_0 . Поэтому

$$\int_{\eta_0 - \varepsilon}^{\eta_0 + \varepsilon} \psi(\eta, t_0) d\eta = 1. \quad (4.22)$$

Соотношение (4.22) при $\varepsilon \rightarrow 0$ является одним из определяющих δ -функцию

$$\psi(\eta, t_0) = \delta(\eta - \eta_0) \quad (4.23)$$

Если случайная функция $\eta = \eta(t)$ может принимать любые значения в интервале $(-\infty, \infty)$, то в качестве краевых следует брать условия на $\pm \infty$ (4.20). Равенство (4.20) позволяет сводить анализ стохастических процессов к уравнению Фоккера – Планка (4.18) с установлением нормирующего множителя [20].

4.4. Моделирование механизмов деформации при динамической сверхпластичности алюминиевых сплавов

Будем считать, как принято выше, сверхпластичность особым состоянием деформируемого материала в иерархии состояний в меняющихся термических и кинематических условиях. При этом в процессе сверхпластического течения происходит размытый необратимый структурный фазовый переход – динамическая рекристаллизация. Последний осуществляется многостадийно – до и после сверхпластичности имеют место метастабильные состояния, при которых механизм зернограничного проскальзывания сосуществует с другими формами массопереноса.

Учитывая сказанное, обратимся к анализу информации, которая следует из найденного приращения удельной теплоемкости в форме (3.56). Иными словами, с привлечением методов неравновесной статистической механики оценим вклад различных механизмов деформации в температурно – скоростных режимах структурного фазового перехода.

Учитывая характер поведения функции приращения удельной теплоемкости, принимаем, что указанной функции отвечает распределение вероятностей, однородное по времени. Поэтому к рассмотрению принимаем стационарную форму уравнения Фоккера – Планка. Полагая теперь $\psi(\eta) = \Delta C(\eta)$, получаем [69]

$$\frac{d}{d\eta} [R(\eta)\Delta C(\eta)] - \frac{1}{2} \frac{d}{d\eta} [Q(\eta)\Delta C(\eta)] = 0. \quad (4.24)$$

При этом на функцию $R(\eta)$ будем возлагать ответственность за механизм зернограничного проскальзывания, а $Q(\eta)$, как и выше, считаем коэффициентом диффузии.

Понятно, что в термомеханических диапазонах сверхпластичности активизируется механизм зернограничного проскальзывания, который сравнительно с другими формами массопереноса вносит наибольший вклад в накопление необратимых деформаций. Поэтому диффузионные процессы можно принять замороженными а коэффициент диффузии считать постоянным ($Q(\eta) = Q_0$). С учетом сказанного уравнение (4.24) переписывается так

$$\frac{d}{d\eta} [R(\eta) \Delta C(\eta)] - \frac{1}{2} Q_0 \frac{d^2 \Delta C(\eta)}{d\eta^2} = 0. \quad (4.25)$$

В развернутой форме уравнение (4.25) принимает вид

$$\frac{dR(\eta)}{d\eta} \Delta C(\eta) + \frac{d\Delta C(\eta)}{d\eta} R(\eta) - \frac{1}{2} Q_0 \frac{d^2 \Delta C(\eta)}{d\eta^2} = 0. \quad (4.26)$$

Функция $\Delta C(\eta)$ записана в форме (3.56), которую напомним еще раз

$$\frac{\Delta C(\eta)}{k} = a(\xi) \eta^2 + b(\xi) \eta. \quad (4.27)$$

Здесь коэффициент $a = a(\xi)$, $b = b(\xi)$ определяются формулами

$$a(\xi) = -(\xi + \nu) \left[\frac{d\beta}{d\xi} + 2\beta \frac{d \ln \sigma^*}{d\xi} \right] - (\xi + \nu)^2 \left[-\beta \frac{d\beta}{d\xi} \frac{d \ln \sigma^*}{d\xi} + \frac{1}{2} \frac{d^2 \beta}{d\xi^2} - 2\beta^2 \left(\frac{d \ln \sigma^*}{d\xi} \right)^2 + \beta \frac{d^2 \ln \sigma^*}{d\xi^2} + \frac{d\beta}{d\xi} \frac{d \ln \sigma^*}{d\xi} \right]; \quad (4.28)$$

$$b(\xi) = -2(\xi + \nu) \frac{d \ln \sigma^*}{d\xi} + (\xi + \nu)^2 \left[\beta \frac{d\beta}{d\xi} \frac{d \ln \sigma^*}{d\xi} + 2\beta^2 \left(\frac{d \ln \sigma^*}{d\xi} \right)^2 + \beta \left(\frac{d \ln \sigma^*}{d\xi} \right)^2 - \frac{d^2 \ln \sigma^*}{d\xi^2} \right]; \quad (4.29)$$

где конкретные значения коэффициентов (4.28), (4.29) вычислены выше с использованием зависимостей (3.46)...(3.50).

Подстановка (4.27) в (4.26) приводит [70] к линейному неоднородному дифференциальному уравнению

$$\frac{dR(\eta)}{d\eta} + \frac{2a\eta + b}{a\eta^2 + b\eta} R(\eta) = \frac{aQ_0}{a\eta^2 + b\eta}. \quad (4.30)$$

Уравнение (4.30) перепишем так

$$\frac{dR(\eta)}{d\eta} + r(\eta)R(\eta) = g(\eta), \quad (4.31)$$

где

$$r(\eta) = \frac{2a\eta + b}{a\eta^2 + b\eta}; \quad g(\eta) = \frac{Q_0 a}{a\eta^2 + b\eta} \quad (4.32)$$

Общее решение уравнения (4.31) определяется [68] формулой

$$R(\eta) = \frac{1}{\chi(\eta)} \left[\int r(\eta)g(\eta)d\eta + c \right], \quad (4.33)$$

где

$$\chi(\eta) = \exp\left[\int r(\eta)d\eta\right] - \quad (4.34)$$

интегрирующий множитель.

Вычисляем $\int r(\eta)d\eta$. Имеем

$$\int r(\eta)d\eta = \int \frac{2a\eta + b}{a\eta^2 + b\eta} d\eta = \int \frac{d(a\eta^2 + b\eta)}{a\eta^2 + b\eta} = \ln|a\eta^2 + b\eta|. \quad (4.35)$$

С учетом (4.35) интегрирующий множитель будет равен

$$\chi(\eta) = \exp[\ln|a\eta^2 + b\eta|] = |a\eta^2 + b\eta|. \quad (4.36)$$

Теперь, если учесть, что

$$\int r(\eta)g(\eta)d\eta = aQ_0\eta, \quad (4.37)$$

получаем в окончательной форме интеграл уравнения (4.31), который запишется следующим образом

$$R(\eta) = \frac{1}{|a\eta^2 + b\eta|} [aQ_0\eta + c], \quad (4.38)$$

где c – произвольная постоянная интегрирования.

В качестве граничных условий для нахождения произвольной постоянной примем, что в изотермических условиях в момент перехода от метастабильного состояния к сверхпластичности вклад механизма проскальзывания по границам

зерен определяется некоторым значением функции $R(\eta) = R_0$ [71]. Такое утверждение объяснимо, поскольку уже в метастабильном состоянии зарождается процесс измельчения зерна и, как следствие, наличествует эффект зернограничного проскальзывания. Поэтому имеем

$$R(\eta) \Big|_{\eta = \pm \left(-\frac{\beta}{3m_0}\right)^{1/2}} = R_0. \quad (4.39)$$

Остановимся еще на одном моменте. Учитывая вид решения (4.38), разделим диапазон изменения параметров порядка на два: $\eta < 0$, $\eta \geq 0$.

Итак, при $\eta \geq 0$ получаем

$$R(\eta) \Big|_{\eta = \left(-\frac{\beta}{3m_0}\right)^{1/2}} = R_0. \quad (4.40)$$

Подставив (4.40) в (4.38), для произвольной постоянной $c = c^{(1)}$ можем записать

$$c^{(1)} = R_0 \left[a \left(-\frac{\beta}{3m_0}\right) + b \left(-\frac{\beta}{3m_0}\right)^{1/2} \right] - aQ_0 \left(-\frac{\beta}{3m_0}\right)^{1/2}. \quad (4.41)$$

При отрицательных значениях η аналогично имеем

$$R(\eta) \Big|_{\eta = -\left(-\frac{\beta}{3m_0}\right)^{1/2}} = R_0. \quad (4.42)$$

Использование (4.42) совместно с (4.38) дает

$$c = c^{(2)} = R_0 \left[a \left(-\frac{\beta}{3m_0}\right) - b \left(-\frac{\beta}{3m_0}\right)^{1/2} \right] + aQ_0 \left(-\frac{\beta}{3m_0}\right)^{1/2}. \quad (4.43)$$

После определения постоянных функция (4.38), ответственная за эффект зернограничного проскальзывания, представляется в форме

$$R(\eta) = \begin{cases} \frac{R_0 \left[a(-\beta/3m_0) - b(-\beta/3m_0)^{1/2} \right] + aQ_0 \left[\eta + (-\beta/3m_0)^{1/2} \right]}{a\eta^2 + b\eta}; \\ \text{при } -(-\beta/3m_0)^{1/2} < \eta < 0; \\ \frac{R_0 \left[a(-\beta/3m_0) + b(-\beta/3m_0)^{1/2} \right] + aQ_0 \left[\eta - (-\beta/3m_0)^{1/2} \right]}{a\eta^2 + b\eta}; \\ \text{при } 0 \leq \eta \leq (-\beta/3m_0)^{1/2}. \end{cases} \quad (4.44)$$

Естественно предположить, что вне пределов структурного фазового перехода влиянию зернограничного проскальзывания составляют конкуренцию другие механизмы – диффузионный и дислокационный. Происходит перераспределение форм массопереноса. В уравнении Фоккера – Планка указанное перераспределение сказывается на величине коэффициента диффузии. Иными словами, можно считать, что эффект зернограничного проскальзывания не выделяется из общих диффузионно – дислокационных процессов и его влияние заметно снижается при удалении от скоростных диапазонов сверхпластичности (при температуре эффекта). Поэтому можно утверждать, что вне интервалов структурного размытого фазового перехода функция $R(\eta)$ становится составной частью функции $Q(\eta)$ и, следовательно, $R(\eta)$ обращается в нуль.

Таким образом, приходим к следующему граничному условию

$$R(\eta) \Big|_{\eta = \pm \left(-\frac{\beta}{m_0} \right)^{1/2}} = 0. \quad (4.45)$$

Равенство (4.45) равносильно условию, в соответствие которому на границе метастабильного и деформированного (литого) состояний эффект зернограничного проскальзывания выделяется из других механизмов накопления необратимых деформаций.

Решая (4.44) совместно с условием (4.45) для величины Q_0 получаем

$$\frac{Q_0}{R_0} = \begin{cases} -\frac{a(-\beta/3m_0) - b(-\beta/3m_0)^{1/2}}{a[-(-\beta/m_0)^{1/2} + (-\beta/3m_0)^{1/2}]}; \text{ при } \eta = -(-\beta/m_0)^{1/2} \\ -\frac{a(-\beta/3m_0) + b(-\beta/3m_0)^{1/2}}{a[(-\beta/m_0)^{1/2} + (-\beta/3m_0)^{1/2}]}; \text{ при } \eta = (-\beta/m_0)^{1/2}. \end{cases} \quad (4.46)$$

Результат (4.46) внесем в (4.44) и после несложных преобразований, для функции «дрейфа» можем записать окончательное выражение

$$\frac{R(\eta)}{R_0} = \begin{cases} \frac{\left[a(-\beta/3m_0) - b(-\beta/3m_0)^{1/2} \right] \left[-(-\beta/m_0)^{1/2} - \eta \right]}{\left[a\eta^2 + b\eta \right] \left[-(-\beta/m_0)^{1/2} + (-\beta/3m_0)^{1/2} \right]}; \\ \text{при } -(-\beta/3m_0)^{1/2} < \eta < 0 \\ \frac{\left[a(-\beta/3m_0) + b(-\beta/3m_0)^{1/2} \right] \left[(-\beta/m_0)^{1/2} - \eta \right]}{\left[a\eta^2 + b\eta \right] \left[(-\beta/m_0)^{1/2} - (-\beta/3m_0)^{1/2} \right]}; \\ \text{при } 0 \leq \eta < (-\beta/3m_0)^{1/2} \end{cases} \quad (4.47)7$$

На рис. 4.1...4.4 приведены графики функций $R = R(\eta)$, рассчитанные по формулам (4.47) для двух значений температур, интерпретированных нормированными температурами и принадлежащих соответственно сплавам АМг5, Д18Т, 1561, АК6. Из графиков видно, что к середине скоростного диапазона сверхпластичности ($\eta \rightarrow 0$) все механизмы деформации, кроме проскальзывания по границам зерен, становятся несущественными ($R(0) \rightarrow \infty$). По мере отдаления скоростного интервала от $\eta = 0$ влияние механизма проскальзывания по границам зерен уменьшается и при $\eta = \pm(-\beta/3m_0)^{1/2}$ имеем $R(\eta) \rightarrow R_0$.

На рис. 4.5...4.8 показана температурная зависимость отношения постоянных Q_0/R_0 , т.е. $Q_0/R_0 \sim \xi$. Конкретные вычисления производились соответственно для сплавов АМг5, Д18Т, 1561, АК6. Как и следовало ожидать, в середине температурного диапазона сверхпластичности отношение Q_0/R_0 минимизируется, а на границе – терпит разрыв непрерывности.

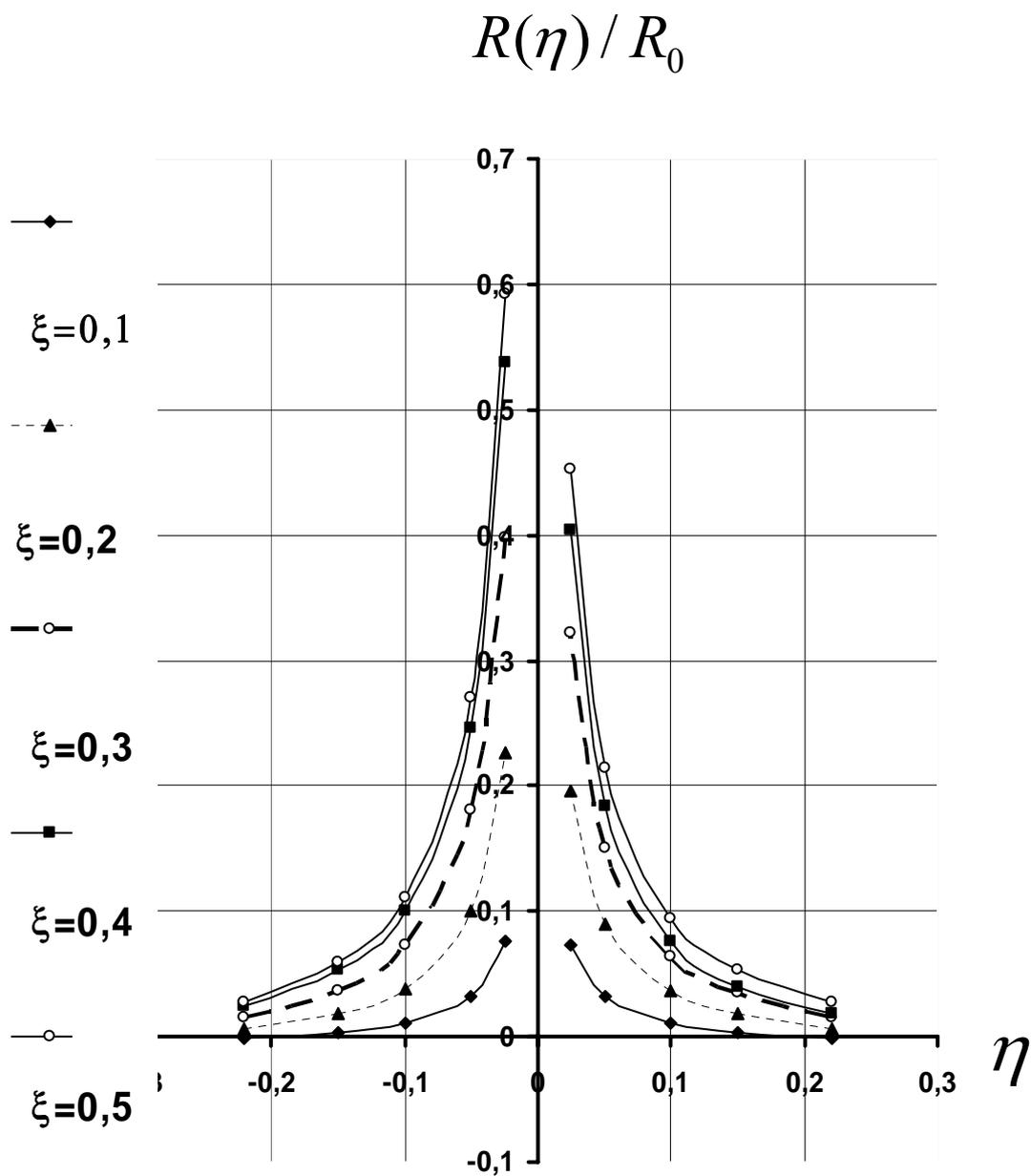


Рис. 4.1 Поведение функции $R(\eta) / R_0$ в зависимости от параметра порядка η из диапазона сверхпластичности при растяжении сплава АМг5.

$$R(\eta) / R_0$$

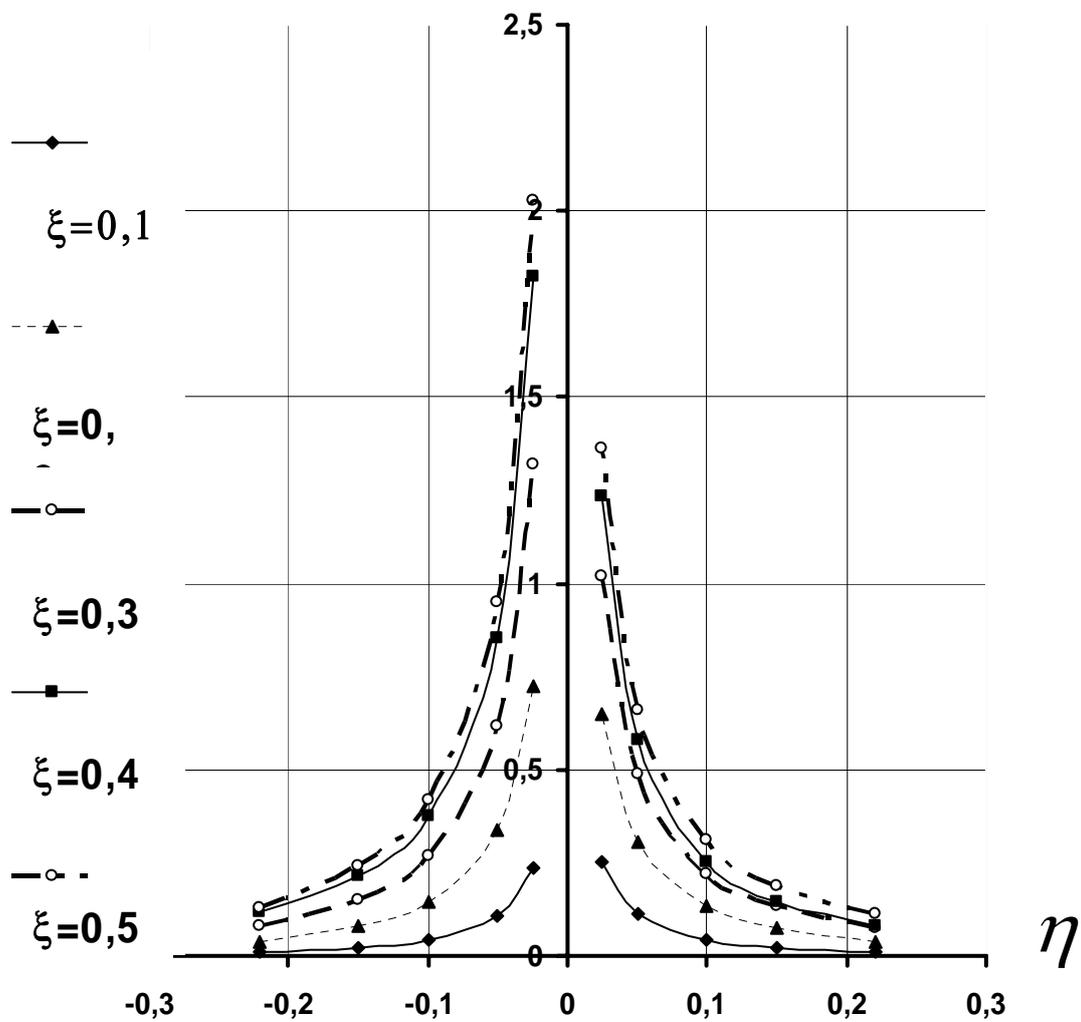


Рис. 4.2 Поведение функции $R(\eta) / R_0$ в зависимости от параметра порядка η из диапазона сверхпластичности при растяжении сплава Д18Т.

$$R(\eta) / R_0$$

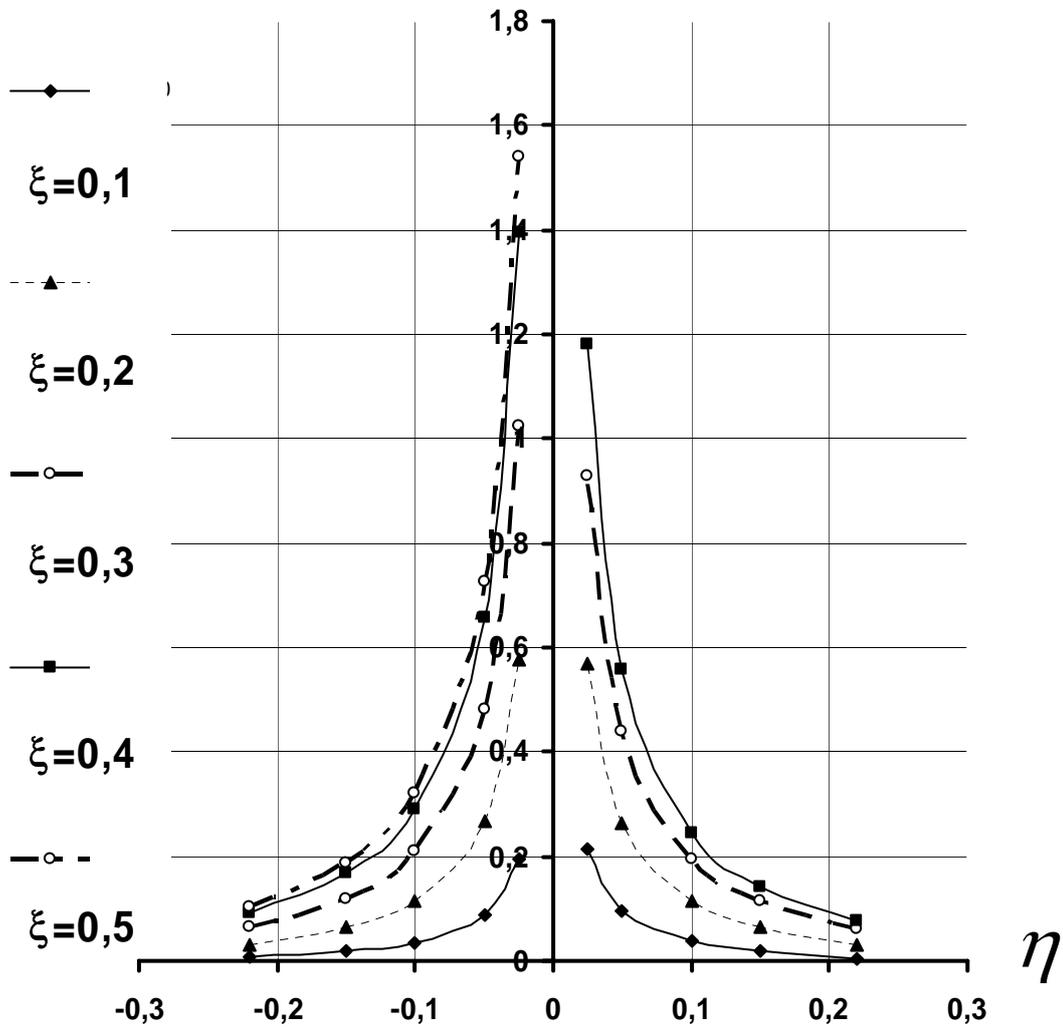


Рис. 4.3 Поведение функции $R(\eta)/R_0$ в зависимости от параметра порядка η из диапазона сверхпластичности при растяжении сплава 1561.

$$R(\eta) / R_0$$

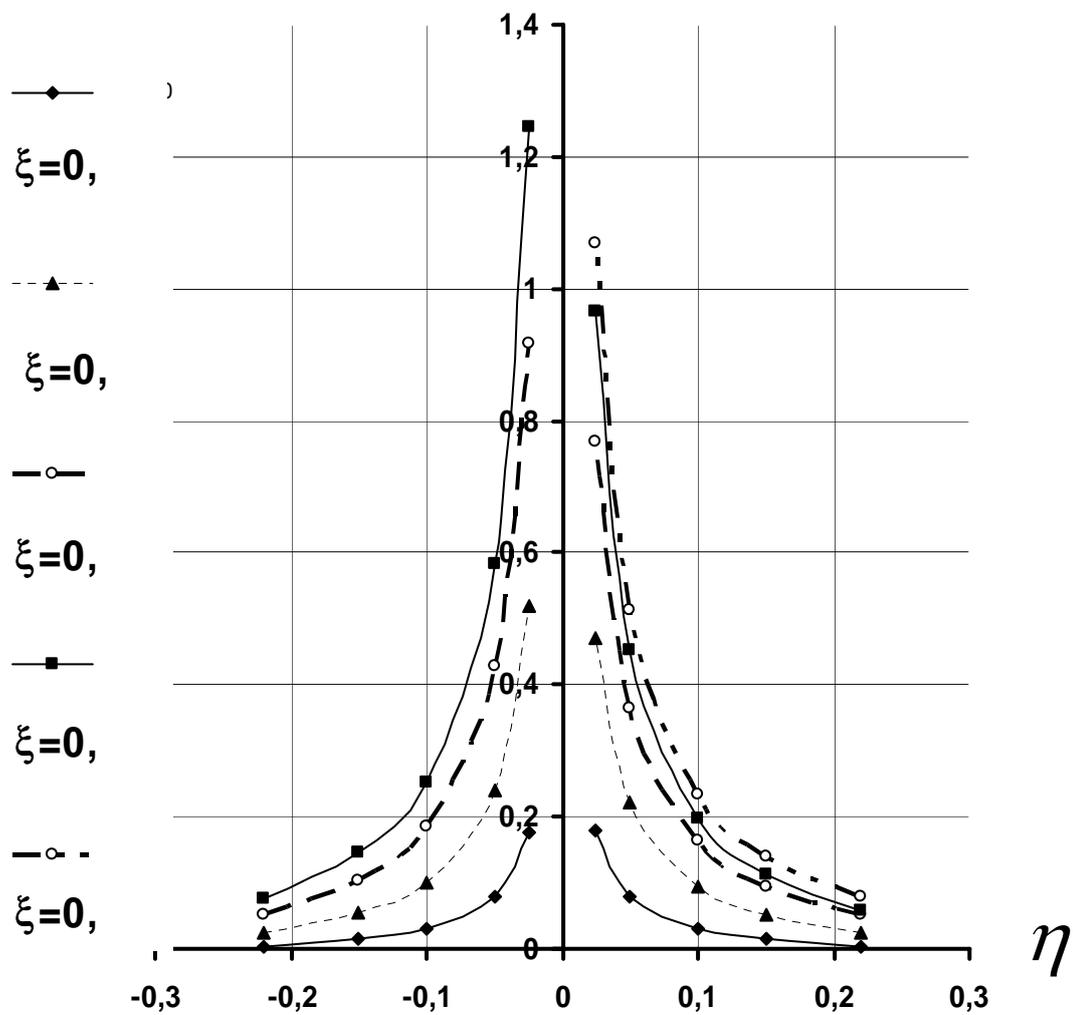


Рис. 4.4 Поведение функции $R(\eta)/R_0$ в зависимости от параметра порядка η из диапазона сверхпластичности при растяжении сплава АК6.

$$Q_0 / R_0$$

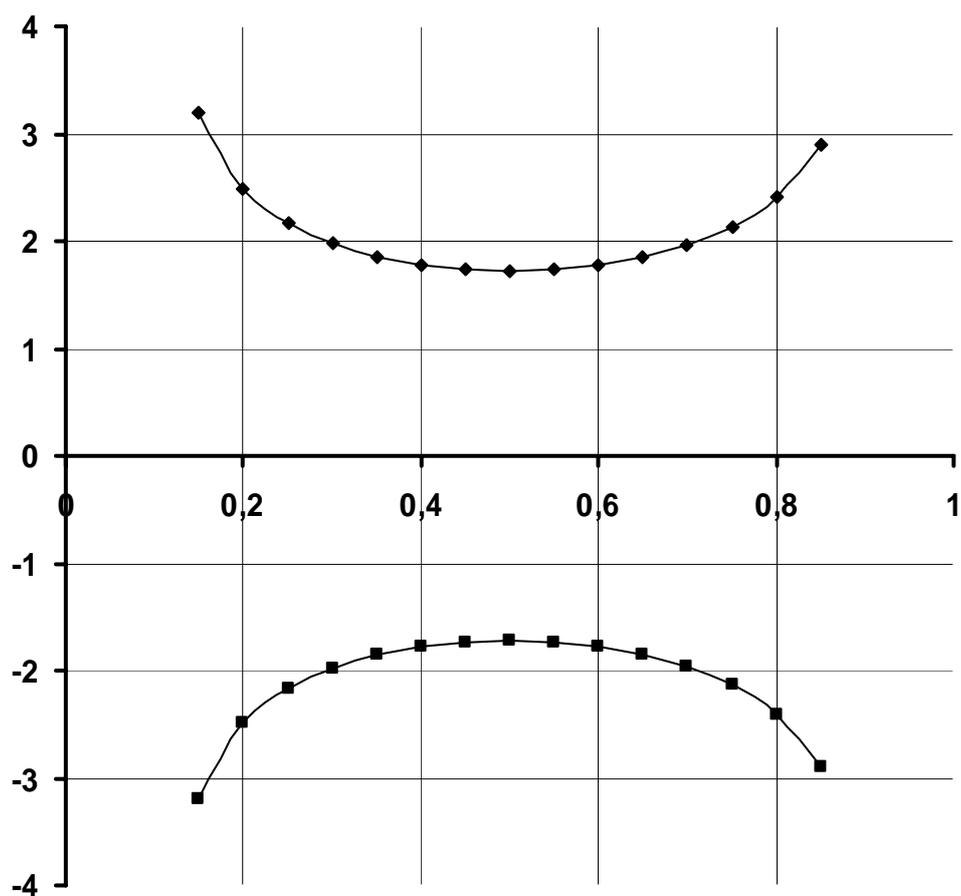


Рис. 4.5 Поведение отношения коэффициента Q_0 / R_0 в температурном интервале сверхпластичности при растяжении сплава Амг5.

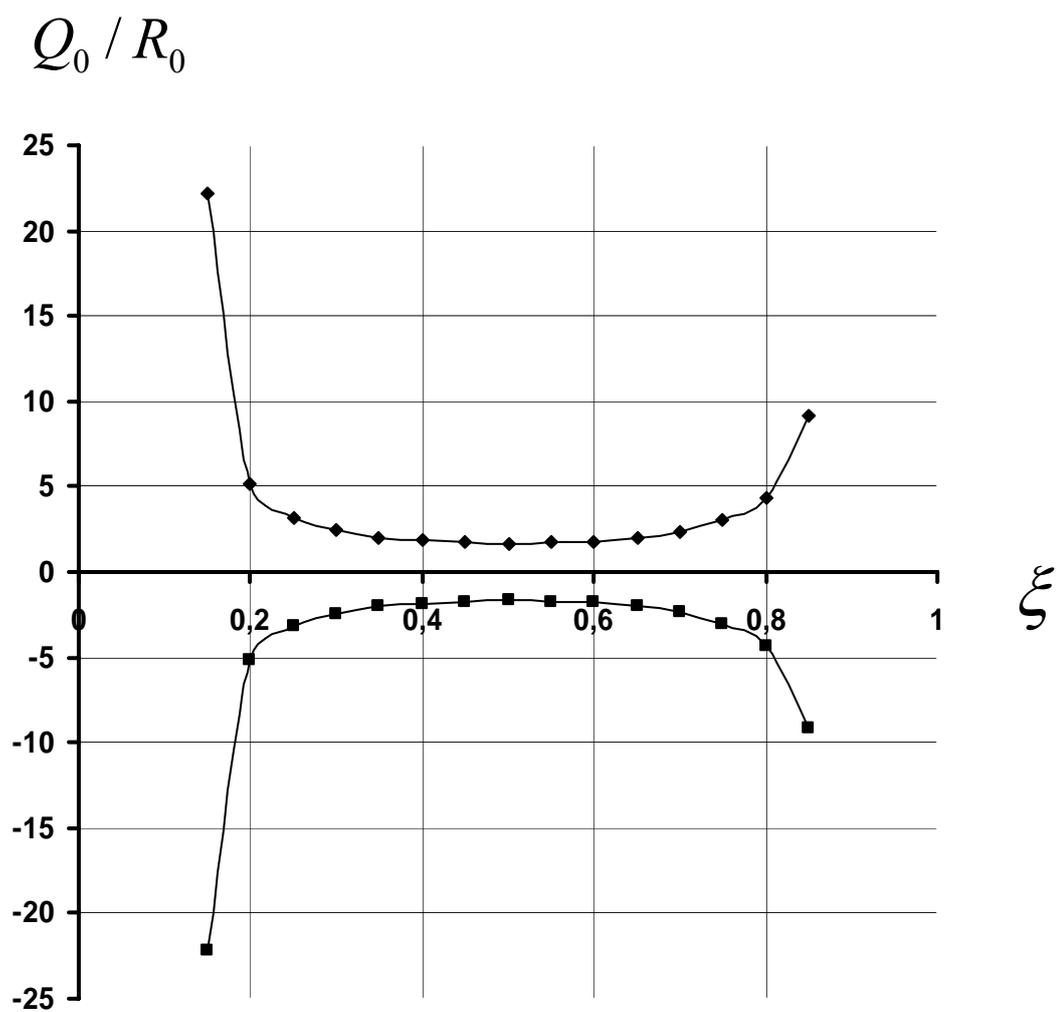


Рис. 4.6 Поведение отношения коэффициента Q_0 / R_0 в температурном интервале сверхпластичности при растяжении сплава Д18Т.

$$Q_0 / R_0$$

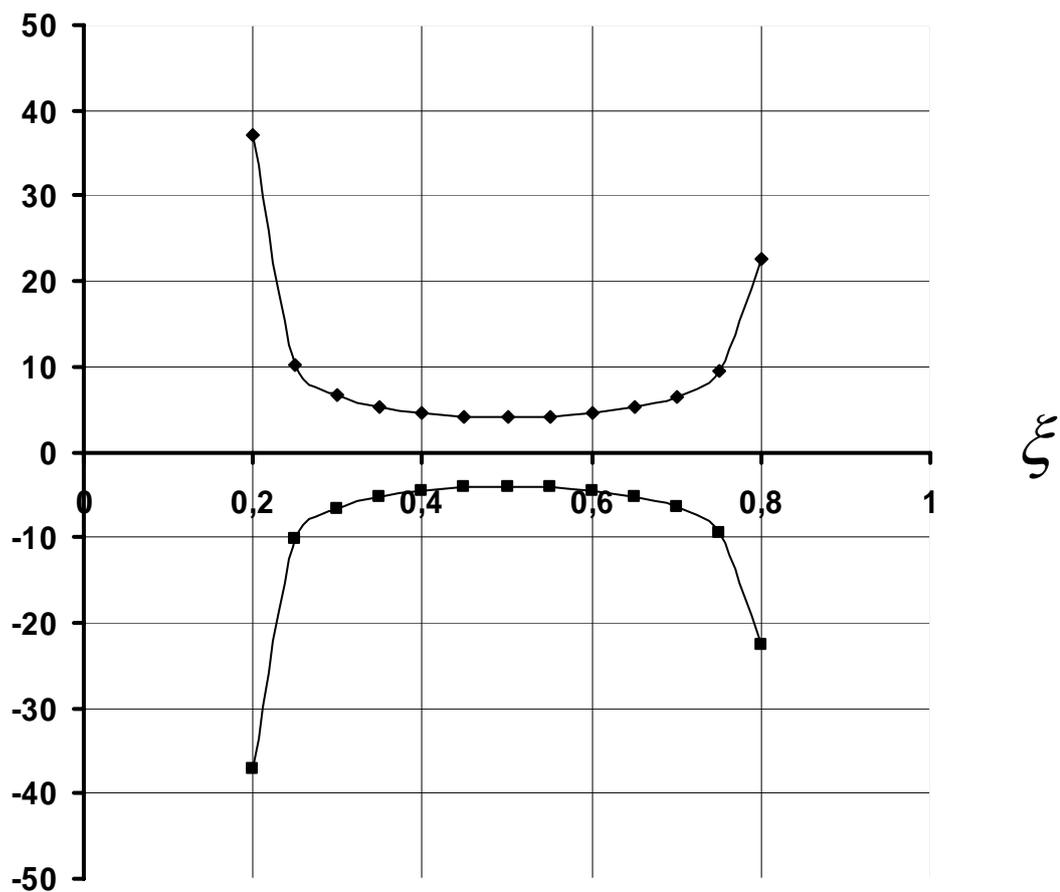


Рис. 4.7 Поведение отношения коэффициента Q_0/R_0 в температурном интервале сверхпластичности при растяжении сплава 1561.

$$Q_0 / R_0$$

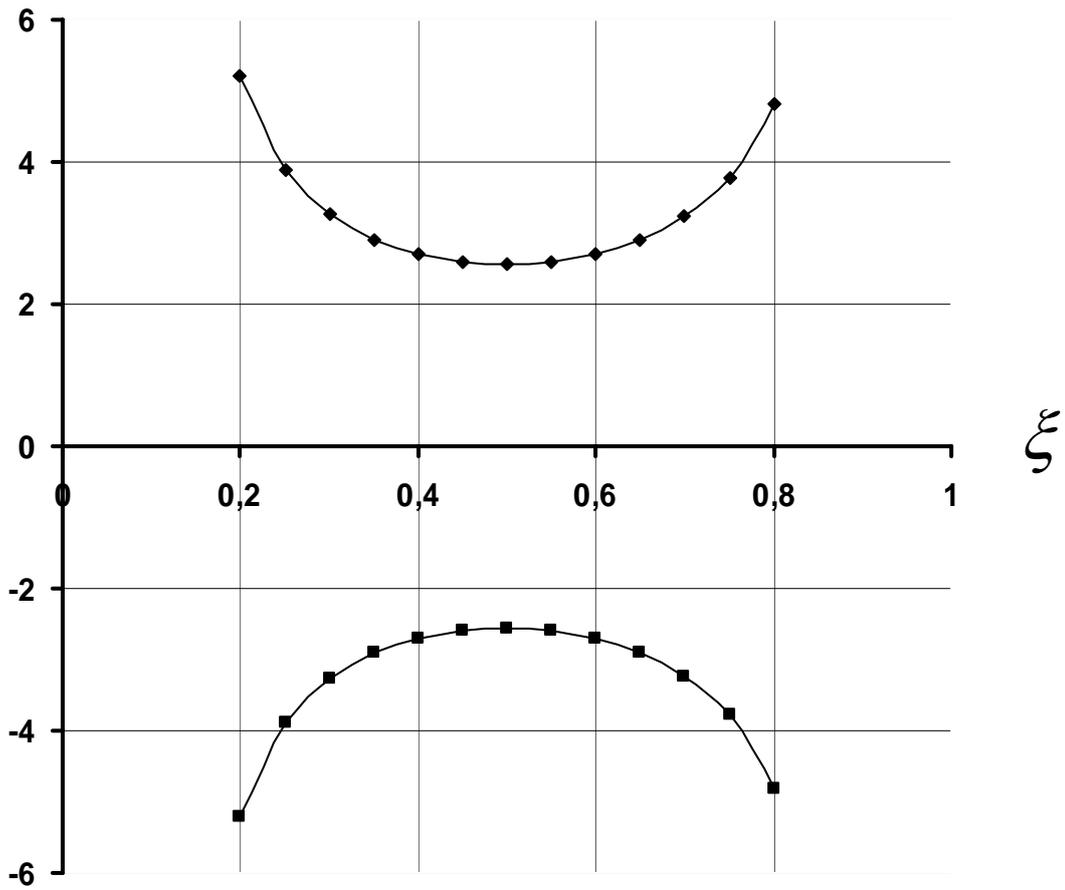


Рис. 4.8 Поведение отношения коэффициента Q_0 / R_0 в температурном интервале сверхпластичности при растяжении сплава АК6.

4.5. Диффузионная оценка процесса деформации

В предыдущей главе заложена предпосылка, утверждающая, что вне кинематического диапазона структурного фазового перехода $(\eta \leq -(-\beta/m_0)^{1/2}; \eta \geq (-\beta/m_0)^{1/2})$ функция, ответственная за реализацию механизма зернограничного проскальзывания $R(\eta) = 0$. При этом, естественно, активизируются традиционные формы массопереноса [72,73]. Уравнение (4.24) для указанного случае примет вид

$$\frac{d^2}{d\eta^2} [Q(\eta)\Delta C(\eta)] = 0 \quad (4.48)$$

где, как и выше, $Q(\eta)$ – коэффициент диффузии; $\Delta C(\eta)$ – приращение удельной теплоемкости.

Проведем очевидное преобразование. Имеем

$$\begin{aligned} \frac{d^2}{d\eta^2} [Q(\eta)\Delta C(\eta)] &= \frac{d}{d\eta} \left[\Delta C(\eta) \frac{dQ(\eta)}{d\eta} + Q(\eta) \frac{d\Delta C(\eta)}{d\eta} \right] = \\ &= Q(\eta) \frac{d^2 \Delta C(\eta)}{d\eta^2} + \Delta C(\eta) \frac{d^2 Q(\eta)}{d\eta^2} + 2 \frac{dQ(\eta)}{d\eta} \frac{d\Delta C(\eta)}{d\eta} = 0 \end{aligned} \quad (4.49)$$

Поскольку для приращения удельной теплоемкости имеем (3.56), то

$$\frac{d\Delta C(\eta)}{d\eta} = 2a\eta + b; \quad \frac{d^2 \Delta C(\eta)}{d\eta^2} = 2a \quad (4.50)$$

С учетом (3.56) и (4.50) уравнение (4.49) может быть переписано так

$$\frac{d^2 Q(\eta)}{d\eta^2} + 2\varphi_1(\eta) \frac{dQ(\eta)}{d\eta} + \varphi_2(\eta) Q(\eta) = 0, \quad (4.51)$$

$$\text{где } \varphi_1(\eta) = \frac{2a\eta + b}{a\eta^2 + b\eta}; \quad \varphi_2(\eta) = \frac{2a}{a\eta^2 + b\eta}. \quad (4.52)$$

Уравнение (4.50) относится [69] к классу линейных дифференциальных уравнений второго порядка с переменными коэффициентами. Для нахождения его интеграла воспользуемся следующей подстановкой

$$U(\eta) = Q(\eta) \exp \left[\int \varphi_1(\eta) d\eta \right]. \quad (4.53)$$

Разрешаем (4.53) относительно $Q(\eta)$ и полученный результат подставляем в (4.51). Имеем

$$\frac{dQ(\eta)}{d\eta} = \frac{U'(\eta)}{\exp\left[\int \varphi_1(\eta)d\eta\right]} - U(\eta) \frac{\varphi_1(\eta)}{\exp\left[\int \varphi_1(\eta)d\eta\right]}$$

$$\frac{d^2Q(\eta)}{d\eta^2} = \frac{U''(\eta)}{\exp\left[\int \varphi_1(\eta)d\eta\right]} - \frac{U'(\eta)\varphi_1(\eta)}{\exp\left[\int \varphi_1(\eta)d\eta\right]} - \frac{U(\eta)\varphi_1'(\eta)}{\exp\left[\int \varphi_1(\eta)d\eta\right]} - \frac{U(\eta)\varphi_1^2(\eta)}{\exp\left[\int \varphi_1(\eta)d\eta\right]}. \quad (4.54)$$

Формулы (4.54) получены с использованием следующего равенства

$$\left\{ \exp\left[-\int \varphi_1(\eta)d\eta\right] \right\}' = \exp\left[-\int \varphi_1(\eta)d\eta\right] \cdot \left[-\varphi_1(\eta)d\eta\right]' = -\varphi_1(\eta) \exp\left[-\int \varphi_1(\eta)d\eta\right]. \quad (4.55)$$

Подстановка (4.53), (4.54) в (4.51) дает

$$U''(\eta) - U(\eta) \left[\varphi_1'(\eta) + \varphi_1^2(\eta) - \varphi_2(\eta) \right] = 0. \quad (4.56)$$

Если учесть при этом (4.52), то вместо (4.56) получаем

$$U''(\eta) = 0. \quad (4.57)$$

Интегрирование уравнения (4.57) не вызывает трудностей, а его решение имеет вид

$$U(\eta) = c_1\eta + c_2, \quad (4.58)$$

где c_1, c_2 – произвольные постоянные интегрирования.

Принимая во внимание (4.53), (4.58), можем записать

$$Q(\eta) \exp\left[\int \varphi_1(\eta)d\eta\right] = c_1\eta + c_2 \quad (4.59)$$

Воспользовавшись первой формулой (4.52), получаем следующее выражение для коэффициента диффузии

$$Q(\eta) = \frac{c_1\eta + c_2}{|a\eta^2 + b\eta|}. \quad (4.60)$$

Первое из граничных условий для нахождения постоянных c_1 и c_2 очевидно и имеет вид

$$Q(\eta) \Big|_{\eta = \pm \left(-\frac{\beta}{3m_0}\right)^{1/2}} = Q_0; \quad (4.61)$$

Второе граничное условие свидетельствует о плавном сопряжении при $(Q_0 + 0)$ и $(Q_0 - 0)$, т.е. полагаем, что

$$\frac{dQ(\eta)}{d\eta} \Big|_{\eta = \pm \left(-\frac{\beta}{3m_0}\right)^{1/2}} = 0. \quad (4.62)$$

Производная

$$\frac{dQ(\eta)}{d\eta} = \frac{c_1}{|a\eta^2 + b\eta|} - \frac{(c_1\eta + c_2)(2a\eta + b)}{(a\eta^2 + b\eta)^2}. \quad (4.63)$$

Обратимся к первым условиям (на левой границе скоростного диапазона сверхпластичности): $\eta = -\left(-\frac{\beta}{3m_0}\right)^{1/2}$. Условие (4.61) дает

$$-c_1\left(-\frac{\beta}{3m_0}\right)^{\frac{1}{2}} + c_2 = Q_0\left[a\left(-\frac{\beta}{3m_0}\right) - b\left(-\frac{\beta}{3m_0}\right)^{\frac{1}{2}}\right]. \quad (4.64)$$

Условие (4.62), (4.63) приводит к следующему уравнению

$$-c_1a\left(-\frac{\beta}{3m_0}\right) + c_2\left[2a\left(-\frac{\beta}{3m_0}\right)^{\frac{1}{2}} - b\right] = 0. \quad (4.65)$$

Совместное решение системы линейных алгебраических уравнений (4.64), (4.65) позволят вычислить корни в виде

$$c_1 = -Q_0\left[2a\left(-\frac{\beta}{3m_0}\right)^{\frac{1}{2}} - b\right]; \quad c_2 = -Q_0a\left(-\frac{\beta}{3m_0}\right). \quad (4.66)$$

Аналогично для случая $\eta = \left(-\frac{\beta}{3m_0}\right)^{1/2}$ получаем систему уравнений

$$c_1a\left(-\frac{\beta}{3m_0}\right) + c_2\left[2a\left(-\frac{\beta}{3m_0}\right)^{\frac{1}{2}} + b\right] = 0; \quad (4.67)$$

$$c_1\left(-\frac{\beta}{3m_0}\right)^{\frac{1}{2}} + c_2 = Q_0\left[a\left(-\frac{\beta}{3m_0}\right) + b\left(-\frac{\beta}{3m_0}\right)^{\frac{1}{2}}\right].$$

корни которых равны

$$c_1 = Q_0\left[2a\left(-\frac{\beta}{3m_0}\right)^{\frac{1}{2}} + b\right]; \quad c_2 = -Q_0a\left(-\frac{\beta}{3m_0}\right). \quad (4.68)$$

С учетом установленных значений произвольных постоянных интегрирования функция, характеризующая изменение коэффициента диффузии в зависимости от скорости деформации, определяется так

$$\frac{Q(\eta)}{Q_0} = \begin{cases} \frac{\left[-2a(-\beta/3m_0)^{1/2} - b \right] \eta - a(-\beta/3m_0)}{a\eta^2 + b\eta}; \\ \text{при } \eta \leq -(-\beta/3m_0)^{1/2}; \\ \frac{\left[2a(-\beta/3m_0)^{1/2} + b \right] \eta - a(-\beta/3m_0)}{a\eta^2 + b\eta}; \\ \text{при } \eta \geq (-\beta/3m_0)^{1/2}. \end{cases} \quad (4.69)$$

На рис. 4.9...4.12 приведены графики, характеризующие развитие диффузионных процессов вне скоростного диапазона сверхпластичности и построенные соответственно для сплавов АМг5, Д18Т, 1561, АК6 при $\xi = 0,25$ на основании формулы (4.68). Характер полученных зависимостей качественно не изменится и для других температур, принадлежащих сверхпластическому диапазону ($\xi \in]0,1[$). Из графика видно, что при приближении к скоростному интервалу сверхпластичности влияние диффузионных процессов убывает, а коэффициент диффузии стремится к значению Q_0 , соответствующему сверхпластичности.

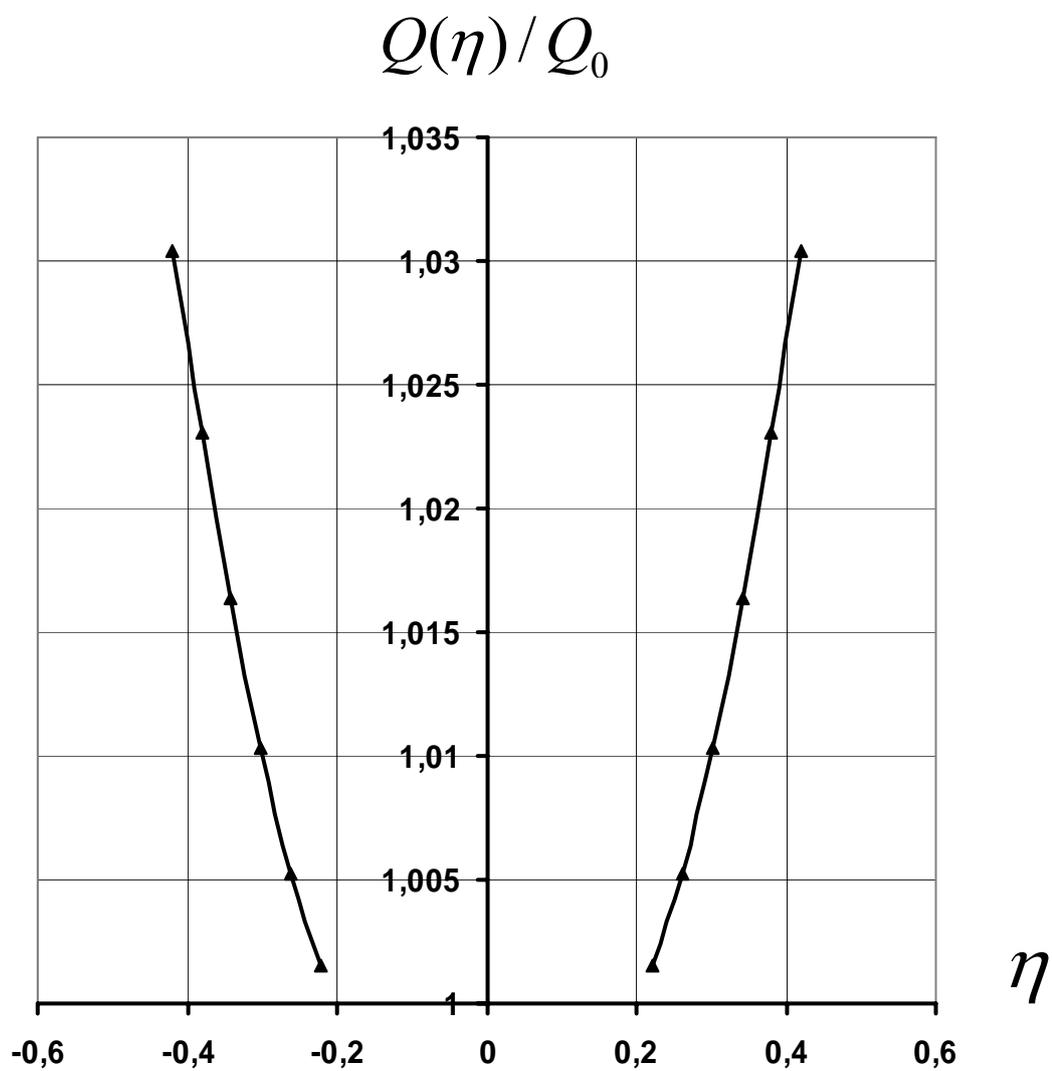


Рис. 4.9 Зависимость коэффициента диффузии $Q(\eta)/Q_0$ от параметра порядка η из диапазона сверхпластичности при растяжении сплава АМг5.

$$Q(\eta) / Q_0$$

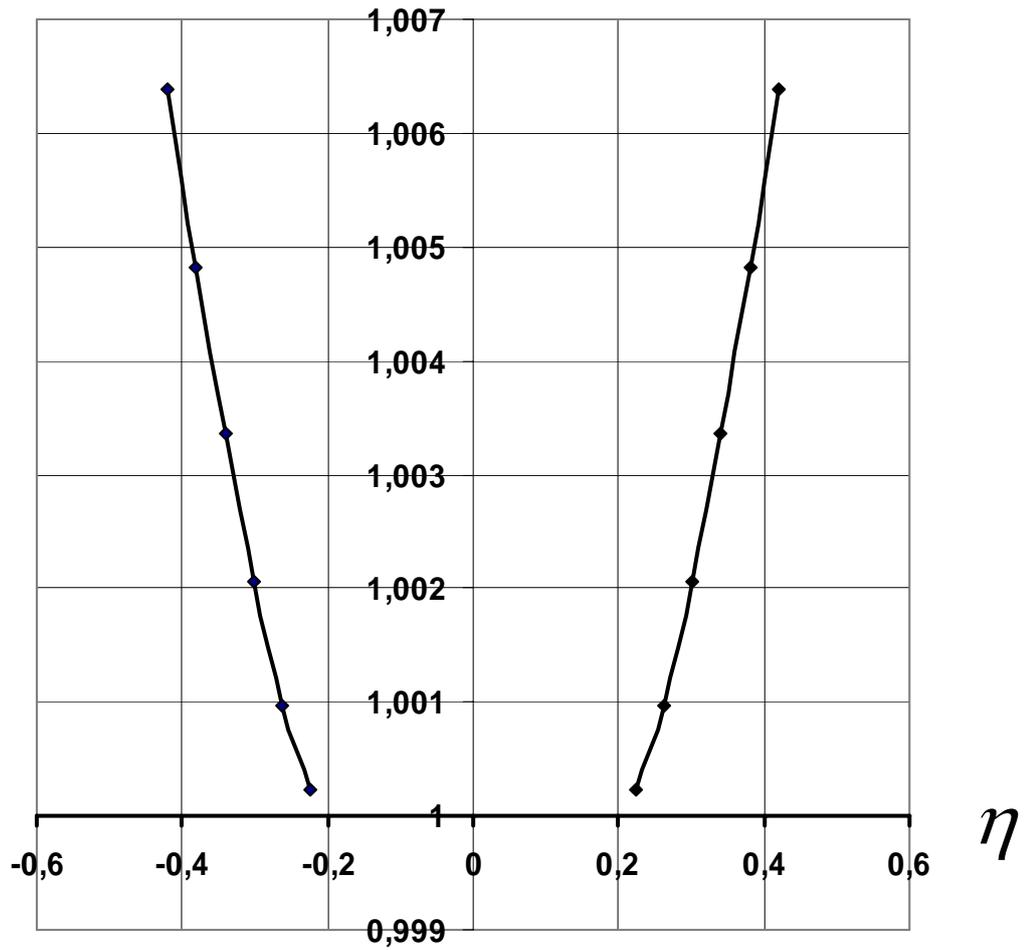


Рис. 4.10 Зависимость коэффициента диффузии $Q(\eta)/Q_0$ от параметра порядка η из диапазона сверхпластичности при растяжении сплава АК6.

$$Q(\eta)/Q_0$$

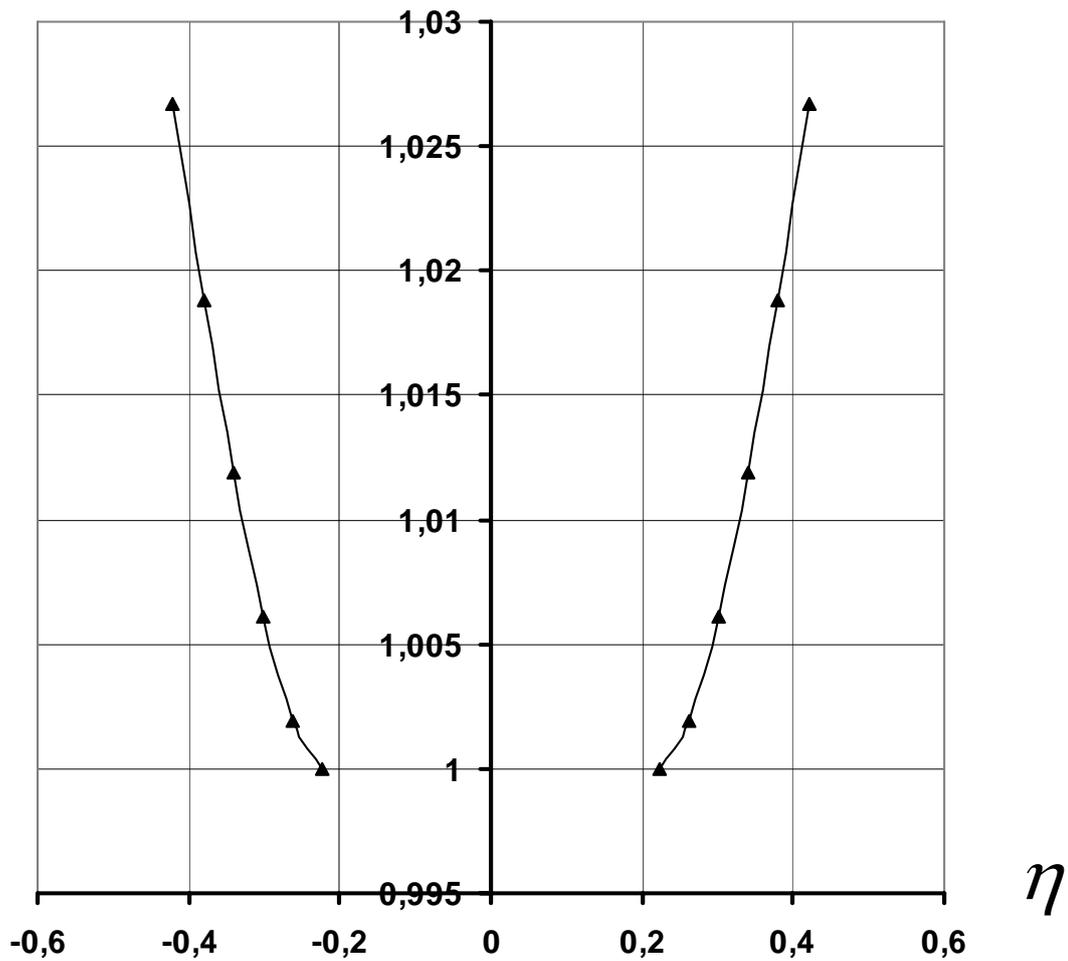


Рис. 4.11 Зависимость коэффициента диффузии $Q(\eta)/Q_0$ от параметра порядка η из диапазона сверхпластичности при растяжении сплава 1561.

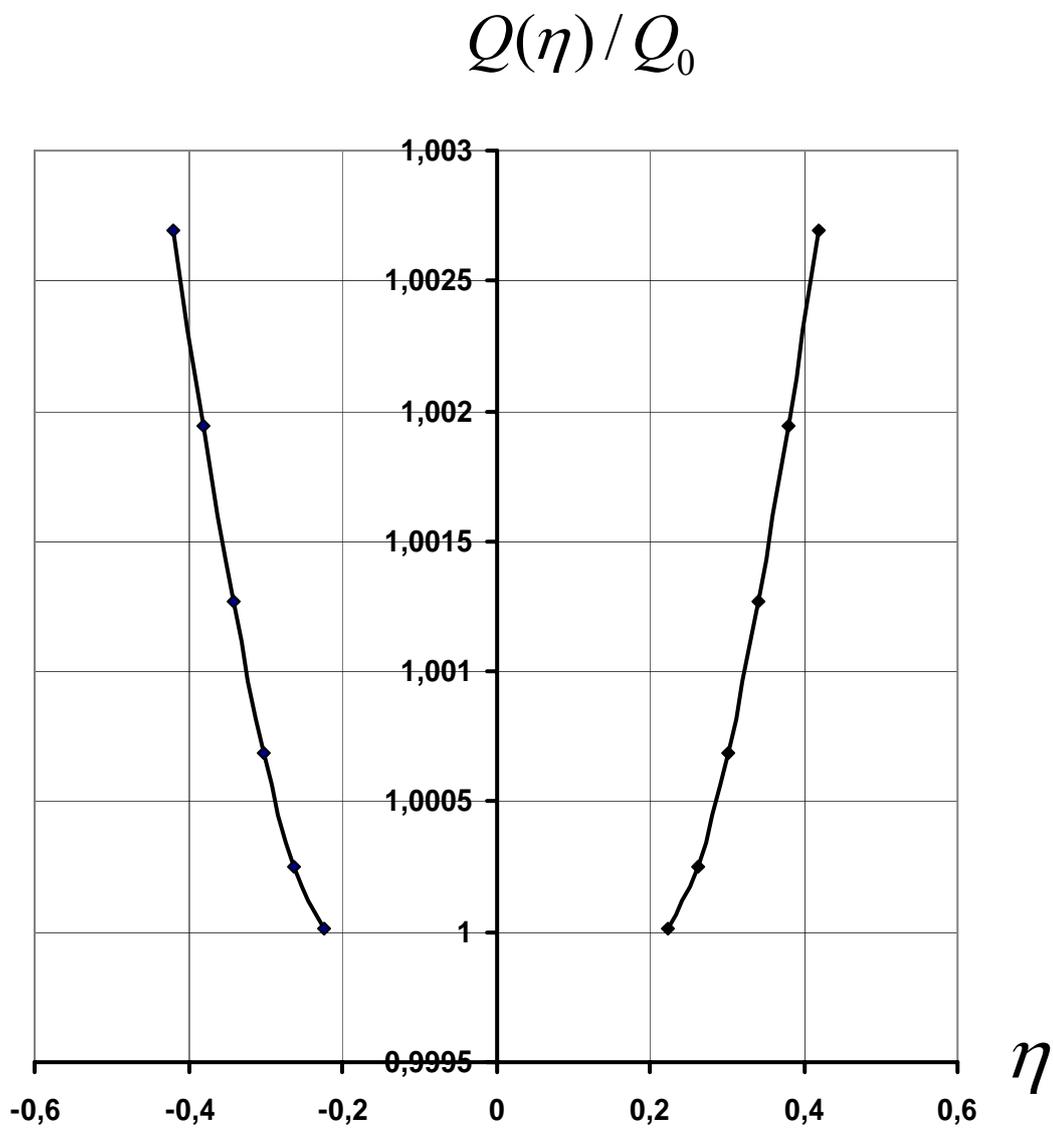


Рис. 4.12 Зависимость коэффициента диффузии $Q(\eta)/Q_0$ от параметра порядка η из диапазона сверхпластичности при растяжении сплава Д18Т.

Выводы

1. Сформулирована модель, в которой макрокинетика деформации отождествляется со стационарной формой известного в неравновесной статистической механике уравнения Фоккера – Планка. В предположении, что процесс не выходит из термического диапазона сверхпластичности, в качестве функции плотности распределения вероятности принято приращение удельной теплоемкости. Модель предназначена для учета влияния различных форм массопереноса на процесс накопления необратимых деформаций.

2. Показано, что в скоростном диапазоне сверхпластичности предпочтение, сравнительно с диффузионным и дислокационным, отдается механизму зернограничного проскальзывания, характерного для сверхпластичности. Функция, ответственная за эффекты проскальзывания по границам зерен (коэффициент «дрейфа»), особенно активизируется к середине скоростного интервала сверхпластичности.

3. Подтверждено, что вне скоростного диапазона сверхпластичности происходит перераспределение форм массопереноса, ответственность за которое возложена на коэффициент диффузии. Показано, что диффузионная функция обнаруживает тенденцию к снижению при приближении к интервалу скоростей сверхпластичности. Метастабильным состояниям свойственна конкуренция диффузионных механизмов и зернограничного проскальзывания.

Заключение

1. Макрокинетический анализ механизмов сверхпластической деформации осуществлен на основании модели, представляющей связь между напряжениями, температурой и кинематическими характеристиками, причем энергетическую функцию состояния предложено рассматривать в форме потенциала катастрофы сборки. Уравнение состояния получено минимизацией потенциала по параметру порядка и дополнено кинетическими уравнениями для управляющего параметра и внутренних параметров состояния. Полученные соотношения пригодны для количественного описания закономерностей деформирования алюминиевых сплавов при наличии явного выражения функции чувствительности среды к структурным превращениям.

2. Сверхпластичность представляется эффектом, реализуемым в термомеханических условиях развития неравновесного размытого фазового перехода. Показано, что для неравновесной системы функция отклика на сильные структурные флуктуации в форме удельной теплоемкости не претерпевает разрыва непрерывности. Непрерывностью функции удельной теплоемкости объясняется связь сверхпластичности с теорией размытых фазовых переходов.

3. Вероятностной оценкой параметра порядка подтвержден диапазон изменения скоростей деформации в термических условиях проявления эффекта сверхпластичности. Установлено, что в интервале сверхпластичности зависимость приращения удельной теплоемкости от температуры носит пикообразный характер. Максимуму удельной теплоемкости соответствует оптимальная температура сверхпластичности. Последнее не противоречит известным дилатометрическим испытаниям.

4. Анализ поведение функции приращения производства энтропии позволил рассмотреть процесс сверхпластичности с позиций самоорганизации диссипативных структур в неравновесных открытых системах.

5. Показано, что макрокинетика деформации описывается стационарной формой известного в неравновесной статистической механике уравнения

Фоккера – Планка, в предположении, что процесс не выходит из термического диапазона сверхпластичности, и в качестве функции плотности распределения вероятности принято приращение удельной теплоемкости.

6. Приняв, что в скоростном диапазоне сверхпластичности преобладает сравнительно с диффузионным и дислокационным механизмом зернограничного проскальзывания ($Q(\eta) = Q_0 = const$), установлен характер изменения коэффициента “дрейфа” – функции, ответственный за эффекты проскальзывания по границам зерен. Результат показывает, что этот механизм особенно активизируется к середине скоростного интервала сверхпластичности.

7. Считая вне скоростного диапазона сверхпластичности эффект проскальзывания по границам зерен нулевым ($R(\eta) = 0$), показано, что диффузионная функция при этом обнаруживает тенденцию к снижению при приближении к интервалу скоростей сверхпластичности.

Литература

1. Бочвар А.А., Свидерская З.А. Явление сверхпластичности в сплавах цинка с алюминием // Изв. АН СССР, ОТН.–1945.–№9.–С. 824.
2. Кайбышев О.А. Сверхпластичность промышленных сплавов.– М.: Металлургия, 1984.–264 С.
3. Новиков И.И. Определение понятия “сверхпластичность” // Тез. докл. II Всесоюзн. научно–технич. конф. “Сверхпластичность металлов”. Ч. I.–М., 1981.–С. 11-15.
4. Бекофен В. Процессы деформации. – М.: Металлургия, 1977.–288 с.
5. Теория пластических деформаций металлов / Под ред. Е.Н. Унксова, А.Г. Овчинникова.–М.: Машиностроение, 1983.–598 С.
6. Гуляев А.П. Сверхпластичность стали.–М.: Металлургия, 1982. – 56 С.
7. Пресняков А.А. О природе сверхпластического течения // Тез. докл. III Всесоюзн. научн.-технич. конф. “Сверхпластичность металлов”. Ч. I.–Тула, 1986.– С. 4–5.
8. Ролов Б.Н., Юркевич В.Э. Физика размытых фазовых переходов.– Ростов: РГУ , 1983. – 320 С.
9. Ролов Б.Н., Ивин В.А., Кузовков В.Н. Статистика и кинетика фазовых переходов в твердом теле. – Рига: Зинатне , 1979. – 179 С.
10. Краткая химическая энциклопедия. – М., Изд-во Советская энциклопедия ,1967, т.5, С. 74.
11. Физическая энциклопедия словарь. – М., Изд-во Советская энциклопедия , 1966.- т. 5, С. 278.
12. Кристиан Дж., Теория превращений в металлах и сплавах. Пер.с англ. – М., Мир, 1978, ч.I.
13. Ehrenfest P. – Commun . Leiden Univ.,1933,v.20,Suppl. b 75, p.628.
14. Вукалович М.П., Новиков И.И., Термодинамика. – М., “Машиностроение”, 1972. – 672С.
15. Ролов Б.Н. Размытые фазовые переходы. – Рига, Зинатне , 1972.

16. Encyclopaedic Dictionary. – N.Y., Pergamon Press, 1962, Vol.7.–P.424.
17. Mayer J.E., Streeter S.E.–J.Chem. Phys., 1939, Vol.7.– P.1019.
18. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Статистическая физика. М.: Наука,1976. – 564 С.
19. Изюмов Ю.А. , Сыромятников В.Н. Фазовые переходы и симметрия кристаллов. – М.: Наука. Главная редакция физико-математической литературы,1984. – 248 С.
20. Хакен Г. Синергетика. – М.: Мир, 1980 – 406 С.
21. Хакен Г. Синергетика. Иерархия неустойчивостей в самоорганизующихся системах и устройствах. – М.: Мир, 1985.– 419С.
22. Гленсдорф П., Пригожин И. Термодинамическая теория структуры, устойчивости, флуктуаций. – М.: Мир, 1973. – 280С.
23. Пригожин И., Стенгерс И. Порядок из хаоса. –М.: Едиториал УРСС, 2000. – 312 С.
24. Гладышев Г.Н. Термодинамика и макрокинетика природных иерархических процессов. – М.: Наука, 1988. – 287 С.
25. Николис Г., Пригожин И. Познание сложного. Введение. – М.: Мир, 1990. – 344 С.
26. Пригожин И. Введение в термодинамику необратимых процессов. – Ижевск: НИЦ “Регулярная и хаотическая динамика”, 2001. – 160 С.
27. Пригожин И. Неравновесная статистическая механика. – М.: Меркурий – ПРЕСС, 2000. – 314 С.
28. Моисеев Н.Н. Алгоритмы развития. – М.: Наука, 1987. – 303 С.
29. Pearson C.V. // Inst. Metals, 1934. – Vol.54. – P.111.
30. Новиков И.И. Определение понятия “сверхпластичность” // II Всесоюзн. научно-технич. конф. “Сверхпластичность металлов” (Москва, декабрь, 1981). Тез. докл. – М.: Б.Н., 1981. – С. 11-15.
31. Бочвар А.А. Сверхпластичность мелкозернистых материалов // II Всесоюзн. научно – технич. конф. “Сверхпластичность металлов” (Москва, декабрь, 1981). Тез. докл. – М.: Б.Н., 1981. –С. 3-9.

32. Кайбышев О.А., Валиев Р.З. Границы зерен и свойства металлов. – М.: Металлургия, 1987. – 214 С.
33. Рудаев Я. И. Введение в механику динамической сверхпластичности. – Бишкек. Изд-во КРСУ, 2003. – 134 С.
34. Базаров И.П. Термодинамика. – М.: Высшая школа, 1991.– 376 С.
35. Трусделл К. Первоначальный курс рациональной механики сплошных сред. - М.: Мир, 1975. – 592 С.
36. Механические свойства металлов и сплавов с позиций синергетики / В.С. Иванова, Г.В. Встовский // Итоги науки и техники, материаловедение и термическая обработка. – М.: ВИНТИ, 1990. – т.24. – С. 43-98.
37. Пресняков А.А. О природе сверхпластического течения // III Всесоюзн. научно – технич. конф. “Сверхпластичность металлов” (Тула, ноябрь, 1986). Тез. докл. – Тула: Б.Н., ч.1.,1986. – С. 4-5.
38. Гуляев А.П. Сверхпластичность стали. – М.: Металлургия, 1982. – 56С.
- 39.Кувшинов Г.А., Новиков И.И. Об оптимальной температуре сверхпластичности // Теплофизика конденсированных сред. – М.: Наука, 1985. – С.41-43.
40. Дегтярева А.С. Закономерности эвтектоидного распада в системах алюминий – цинк. Автореф. дисс.: канд. тех. наук. – Ленинград: ЛПИ, 1987. – 16 С.
41. Золотаревский Ю.С., Паняев В.А., Рудаев Я.И. и др. Сверхпластичность некоторых алюминиевых сплавов // Судостроительная промышленность. Серия материаловедение. – 1990. – Вып.15. – С. 45-49.
42. Паняев В.А., Рудаев Я.И., Чашников Д.И. О сверхпластичности алюминиевых сплавов 1980 и В95 // Вопросы материаловедения, 1996. – Вып1(4). – С. 36-40 .
43. Сопротивление деформации меди МОБ и сплава Бр. ОФ – 0,2 /А.М. Галкин, В.И.Озерский, М.Я.Пахомова и др. // Цветные металлы, 1988. – №2. –С. 71-73.

44. Вайнблат Ю.М., Шаршагин Н.А. Динамическая рекристаллизация алюминиевых сплавов // Цветные металлы. – 1984. – №2. – С. 67-70.
45. Сверхпластичность некоторых титановых сплавов / Р.К. Аубакирова, А.А. Пресняков, С.С. Ушков, А.Н. Байдельдинова. – Алма-Ата: Наука, 1987. – 212 С.
46. Динамическая рекристаллизация упорядоченного сплава $Ti - Al$ / Г.А. Салищев, Р.М. Имаев, А.Б. Ноткин и др.// Цветные металлы, 1988. – №7. – С. 95-98.
47. Рудаев Я.И. О фазовых переходах в сверхпластичности // Проблемы прочности. – 1990. – №10 – С. 50-54.
48. Портной В.К. Формирование ультрамелкозернистой структуры сплавов на разной основе для сверхпластической формовки. Автореф. дисс.: докт. тех. наук. – Москва, 1988. – 51 С.
49. Реальные фазовые переходы и принципы на описания / А.Н. Смирнов // Системы особых температурных точек твердых тел. - М.: Наука, 1983. – С. 210-239.
50. Гилмор Р. Прикладная теория катастроф. Ч.1. – М.: Мир, 1984.–285 С.
51. Кайбышев О.А. Сверхпластичность промышленных сплавов. – М.: Metallurgy, 1984. – 264 С.
52. Перевезенцев В.Н., Рыбин В.В. Современное состояние теории сверхпластичности // Сверхпластичность металлов: Тез. докл. IV Всесоюзной конф. Ч.1. – Уфа, 1989. – С.5.
53. Гуфан Ю.М. К теории фазовых переходов, характеризующихся многомерным параметром порядка // ФТТ. – 1971. – Т.13. – С.225 –231.
54. Поздеев А.А., Трусов П.В., Няшин Ю.И. Большие упругопластические деформации: теория, алгоритмы, приложения. – М.: Наука, 1986. – 232 С.
55. Горелик С.С. Рекристаллизация металлов и сплавов. – М.: Metallurgy, 1978. – 582 С.
56. Kitaeva D.A., Rudaev Ya.I. About kinetic equations of dynamic superplasticity model // Proceeding of the XXXI Summer School «Advanced

Problems in Mechanics». – St. Petersburg, 2004. – P.172-176.

57. Китаева Д.А., Рудаев Я.И. О кинетических уравнениях модели динамической сверхпластичности // Вестник СамГУ. Естественнонаучная серия. – 2005. – №3 (37). – С.72-78.

58. Стратонович Р.Л. Нелинейная неравновесная термодинамика. – М.: Наука, 1980. – 480С.

59. Вильсон К., Когут Дж. Ренормализационная группа и ε -разложение. – М.: Мир, 1985. – 256 С.

60. Аманбаева Г. А., Китаева Д. А. О термокинетике при динамической сверхпластичности // Актуальные проблемы механики и машиностроения: Тр. Международная научная конференция. – Алматы: Изд – во «Эверо», 2005. – Т.1. – С. 89-93.

61. Аманбаева Г. А., Китаева Д. А. К анализу удельной теплоемкости при динамической сверхпластичности // ВЕСТНИК ОшГУ. – 2005. – №3. –С. 180–184.

62. Золотаревский Ю.С., Паняев В.А., Рудаев Я.И. и др. Сверхпластичность некоторых алюминиевых сплавов // Судостроительная промышленность. Серия материаловедение. – 1989. – Вып.12. – С. 41-48.

63. Рудаев Я.И. Об элементах самоорганизации в механике динамической сверхпластичности // Вісн. Дніпропетр. унів., Механіка, 2001.–Вып. 4.–Т. 1.– С. 165-175.

64. Пригожин И. От существующего к возникающему. – М.: Едиториал УРСС, 2002. – 288С.

65. Волькенштейн М.В. Сущность биологической эволюции // Успехи физических наук. –1984. – Т.143. – С.429-466.

66. Балеску Р. Равновесная и неравновесная статистическая механика. Т. 2. М.: Мир, 1978. – 399 С.

67. Светлицкий В.А. Статистическая механика и теория надежности. – М.: Издательство МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2002. – 504С.

68. Гнеденко Б.В. Курс теории вероятностей. – М.: Высшая школа, 1988. – 446 С.
69. Камке Э. Справочник по обыкновенным дифференциальным уравнениям. – М.: Наука, 1971. – С. 576.
70. Аманбаева Г.М., Китаева Д.А., Рудаев Я.И. Термокинетический анализ параметров динамической сверхпластичности // Математическое моделирование систем и процессов (ПермГТУ), 2006. – №14. –С. 6-10.
71. Amanbaeva G., Kitaeva D.A., Rudaev Ya.I. Termokinetics fluctuating parameters of dynamic superplasticity // XXXIV – Summer School – Conference «Advanced Problems in Mechanics». – St. Petersburg (Repino), 2006.
72. Аманбаева Г.М., Рудаев Я.И. Термокинетика флуктуирующих параметров динамической сверхпластичности // Известия КГТУ им. И. Раззакова “Инновации в образовании, науке и технике”: Международная научно-техническая конференция. – г. Бишкек, 2006. – №9. Т.2. – С. 235-240.
73. Аманбаева Г.М. Термокинетика флуктуирующих параметров динамической сверхпластичности алюминиевых сплавов // ВЕСТНИК ОшГУ. – 2006. – №4. –С. 146– 150.
74. Аманбаева Г.М. О макрокинетике динамической сверхпластичности алюминиевых сплавов // ВЕСТНИК КРСУ. – 2007. – Т.7. — №4. –С. 120– 126.