

УДК 539.2

ТЕРМОДИНАМИКА ИНТЕНСИВНОЙ ПЛАСТИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ С УЧЕТОМ ШУМА

А.В. Хоменко, Я.А. Ляшенко, Л.С. Метлов*

Сумский государственный университет, khot@phe.sumdu.edu.ua;

**Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина НАН
Украины, ismet@kinetic.ac.donetsk.ua*

В рамках теории фазовых переходов Ландау исследуется фрагментация твердых тел в процессе интенсивной пластической деформации. Для описания образующихся дефектных структур введены плотности избыточной энергии и суммарной поверхности границ зерен, что позволяет учесть два канала диссипации энергии (тепловой и производства дефектов). Проведен учет аддитивных шумов плотности энергии границ зерен и температуры, и построена фазовая диаграмма, где интенсивность шума температуры и упругая компонента деформации определяют области реализации различных типов предельных структур. Установлено, что с увеличением упругих деформаций размер зерен в предельных структурах уменьшается. Найдены условия формирования двух предельных структур, что отвечает режиму, при котором существует смесь зерен различного размера. Самоподобное распределение плотностей энергий границ зерен представляется при учете дробного характера плотной обратной связи в системе и обеспечивается флуктуациями температуры. В детерминистическом случае исследована кинетика системы.

ВВЕДЕНИЕ

Система уравнений Лоренца [1] часто используется в теории фазовых переходов для описания процессов самоорганизации [2-5]. В то же время эта система обладает существенным недостатком – она не может быть получена путем дифференцирования многомерного термодинамического потенциала. В настоящее время для описания разрушения квазихрупких материалов [6,7], измельчения зерен в процессе обработки металлов методами интенсивной пластической деформации (ИПД) [8-10] разрабатываются методы близкие концепции фазовых переходов Ландау. В них эволюционные уравнения для неравновесных переменных получаются путем дифференцирования многомерного термодинамического потенциала. Однако, в этих методах не учитывалось возможное влияние флуктуационного шума, что в некоторых случаях может существенно изменить характер эволюции системы. Например, введение аддитивных шумов в задаче трения двух атомарно-плоских стальных поверхностей, разделенных ультратонкой пленкой смазки, позволило описать прерывистый режим (stick-slip) [11-13]. Отметим, что такой режим наблюдался экспериментально [14], и его описание не представляется возможным при использовании той же модели в детерминистическом случае [15]. Данная работа посвящена исследованию влияния аддитивных шумов на фрагментацию материала в процессе ИПД и описанию ее самоподобного режима, который наблюдался экспериментально [16].

При наличии только двух каналов диссипации энергии (теплового и одного канала производства дефектов) можно получить термодинамическое тождество или равенство

$$du = \sigma_{ij} d\varepsilon_{ij}^e + Tds + \varphi dh, \quad (1)$$

которое включает в себя одновременно и первый, и второй закон термодинамики (см., например, [7,10]). Здесь u – плотность внутренней энергии, σ_{ij} , ε_{ij}^e – тензор напряжений и упругая часть тензора деформаций; T , s – температура и энтропия; φ и h – сопряженная пара термодинамических переменных – средняя энергия дефекта и плотность дефектов. В общем случае в процессе обработки металлов методами ИПД формируется целая иерархия дефектов – дислокации, скопления дислокаций, ячеистые структуры, оборванные границы, малоугловые границы и высокоугловые или межзеренные границы и т.п., каждый из которых представляет отдельный механизм деформирования. Поэтому в (1) следовало бы учесть сумму по всем типам дефектов, но в статье для простоты предполагается наличие дефектов только одного типа. Полагается, что главным дефектом металла является самый крупный дефект структуры – граница зерна, а остальные дефекты могут быть учтены значениями параметров теории. Строго говоря, это не совсем так, так как в процессе деформации может меняться соотношение между дефектами различных структурных уровней. Однако при выходе на стационарный режим это соотношение будет стремиться к постоянному значению, и для качественного описания модель с одним типом дефектов будет вполне приемлемой. В этом случае φ в соотношении (1) есть некоторая удельная энергетическая характеристика – средняя поверхностная плотность энергии внутренних границ – границ зерен, а h – объемная плотность суммарной поверхности границ зерен.

Величины, входящие в (1), могут быть экспериментально измерены или вычислены. Первое слагаемое описывает обратимую часть внешней работы (изменение упругой энергии), второе слагаемое – тепловой канал диссипации, последнее слагаемое – канал диссипации, связанный с образованием дефектов. Энергия, введенная в систему за счет необратимой части внешней работы, распределяется между этими двумя каналами, которые с математической и физической точки зрения являются равноправными. Чтобы подчеркнуть равноправность каналов, переменной φ можно придать смысл статической температуры, а h – статической энтропии. Аналогично тому, как обычная температура и энтропия являются средними характеристиками теплового (динамического) хаоса, статическая температура и энтропия характеризуют в среднем статический хаос, связанный со случайным распределением потенциального поля дефектов.

В процессе диссипации часть энергии связывается полем тепловых колебаний Ts , часть же – дефектами φh . Осуществляя полное преобразование Лежандра по обоим видам связанной энергии, получим выражение для плотности свободной энергии в виде:

$$f = u - Ts - \varphi h. \quad (2)$$

Согласно (1), внутренняя энергия является функцией экстенсивных переменных ε_{ij}^e , s и h , то есть $u = u(\varepsilon_{ij}^e, s, h)$, а свободная энергия (2) –

экстенсивной переменной ε_{ij}^e и двух интенсивных переменных T и φ , то есть $f = f(\varepsilon_{ij}^e, T, \varphi)$.

Поскольку точное аналитическое выражение для свободной энергии не известно, рассмотрим упрощенную модель, разложив свободную энергию в ряд по ее аргументам вплоть до кубических вкладов:

$$f(\varphi, T, \varepsilon_{ij}^e) = f_0' - h_0' \varphi + \frac{1}{2} a' \varphi^2 - \frac{1}{3} b \varphi^3 + \frac{1}{2} \lambda (\varepsilon_{ii}^e)^2 + \mu (\varepsilon_{ij}^e)^2 - g \varphi \varepsilon_{ii}^e - \frac{1}{2} \bar{\lambda} \varphi (\varepsilon_{ii}^e)^2 - \bar{\mu} \varphi (\varepsilon_{ij}^e)^2 - e \varphi^2 \varepsilon_{ii}^e + \alpha' \varphi \Delta T + \alpha_g \varphi \Delta T \varepsilon_{ii}^e + \beta \varphi^2 \Delta T - \gamma (\Delta T)^2, \quad (3)$$

где $\Delta T = T - T_0$, T_0 – начальная температура, постоянные h_0' , a' , b выражают зависимость свободной энергии квазиравновесной подсистемы от плотности энергии границ зерен при отсутствии внешних воздействий. Остальные параметры описывают внешние механические, температурные или смешанные воздействия. Упругие напряжения учитываются с точностью до квадратичных вкладов через первые два инварианта тензора деформаций ε_{ii}^e , $(\varepsilon_{ij}^e)^2 = \varepsilon_{ij}^e \varepsilon_{ji}^e$. Здесь по повторяющимся индексам подразумевается суммирование. Полагается, что вследствие быстрой релаксации в неравновесной подсистеме напряжения, при которых проявляются кубические вклады по тензору деформаций ε_{ij}^e , не успевают развиваться. Далее, поскольку описывается типичный для ИПД процесс сжатия деформируемого объекта, полагается $\varepsilon_{ii}^e < 0$.

Компоненты деформации ε_{ij}^e являются управляющими параметрами, представляющими внешнее воздействие, и их можно считать константами. Тогда после переобозначения постоянных

$$f_0 = f_0' + \frac{1}{2} \lambda (\varepsilon_{ii}^e)^2 + \mu (\varepsilon_{ij}^e)^2, \quad h_0 = h_0' + g \varepsilon_{ii}^e + \frac{1}{2} \bar{\lambda} (\varepsilon_{ii}^e)^2 + \bar{\mu} (\varepsilon_{ij}^e)^2, \quad (4)$$

$$a = a' - 2e \varepsilon_{ii}^e, \quad \alpha = \alpha' + \alpha_g \varepsilon_{ii}^e$$

свободная энергия принимает более простой вид:

$$f(\varphi, T) = f_0 - h_0 \varphi + \frac{1}{2} a \varphi^2 - \frac{1}{3} b \varphi^3 + \alpha \varphi \Delta T + \beta \varphi^2 \Delta T - \gamma (\Delta T)^2. \quad (5)$$

1 УЧЕТ ВЛИЯНИЯ ШУМА

Запишем теперь для оставшихся компонент уравнения движения

$$\tau_\varphi \dot{\varphi} = -\frac{\partial f}{\partial \varphi}, \quad \tau_T \dot{T} = -\frac{\partial f}{\partial T}, \quad (6)$$

где введены времена релаксации τ_φ , τ_T соответствующих величин, характеризующие инерционные свойства системы. В результате получим систему уравнений для параметров состояния:

$$\tau_\varphi \dot{\varphi} = h_0 - a\varphi + b\varphi^2 - \alpha\Delta T - 2\beta\varphi\Delta T + \sqrt{I_\varphi} \xi_1(t), \quad (7)$$

$$\tau_T \dot{T} = -\alpha\varphi - \beta\varphi^2 + 2\gamma\Delta T + \sqrt{I_T} \xi_2(t). \quad (8)$$

Фактически, все хорошо известные дислокационные механизмы пластической деформации (см., например, обзоры по этой проблеме [17,18]) принимают участие в формировании новой границы зерна. Однако их учет осуществляется выбором эффективной постоянной теории h_0 , которая представляет собой эффективную плотность дефектов более глубоких структурных уровней или источник повышения энергии границ зерен, то есть, степени их неравновесности (см. эволюционное уравнение (7)). Распад сильно неравновесных границ приводит к их размножению, иными словами, к дроблению зерен.

Следует отметить, что в свободной энергии (3), в отличие от [9,10], нами учтены два дополнительных слагаемых. Первое из них позволяет ввести отрицательную обратную связь между φ и T в уравнении (7), второе необходимо для описания самосогласованного поведения φ и T . Кроме того, при введении последнего слагаемого результирующий шум становится мультипликативным (зависящим от параметра φ). При этом он обеспечивает не только переходы системы между минимумами потенциала, а и является причиной возникновения дополнительных стационарных состояний [11-13]. В правые части уравнений добавлены стохастические слагаемые, которые моделируют шумы с интенсивностями $I_{\varphi,T}$ [20], возникающие в результате влияния различных структурных неоднородностей, включений, примесей, дефектов, тепловых флуктуаций и т.д. Для параметра φ это, фактически, означает, что в начальном состоянии в материале одновременно имеются как крупные, так и мелкие зерна (статический шум или хаос), соотношение между которыми предопределяет конкурентную борьбу и перебросы между различными структурными состояниями. Функции $\xi_i(t)$ представляют δ - коррелированные стохастические источники (белый шум). Их моменты определяются следующим образом ¹:

$$\langle \xi_i(t) \rangle = 0, \quad \langle \xi_i(t) \xi_j(t') \rangle = 2\delta_{ij} \delta(t - t'). \quad (9)$$

В рамках адиабатического приближения $\tau_\varphi \gg \tau_T$, при котором эволюция температуры T следует за изменениями параметра φ , из уравнения (8) находим:

$$T = T_0 + \frac{\alpha}{2\gamma} \varphi + \frac{\beta}{2\gamma} \varphi^2 - \frac{\sqrt{I_T}}{2\gamma} \xi_2(t). \quad (10)$$

Подставив ΔT из (10) в (7), получим уравнение Ланжевена:

$$\tau_\varphi \dot{\varphi} = F(\varphi) + \sqrt{I(\varphi)} \xi(t), \quad (11)$$

¹ Здесь множитель 2 выбран для того, чтобы величина $I(\varphi)$ (13) играла в соответствующем уравнении Фоккера–Планка роль коэффициента диффузии.

где сила F задается выражением

$$F(\varphi) = h_0 - \left(a + \frac{\alpha^2}{2\gamma} \right) \varphi + \left(b - \frac{3\beta\alpha}{2\gamma} \right) \varphi^2 - \left(\frac{\beta^2}{\gamma} \right) \varphi^3, \quad (12)$$

а эффективная интенсивность шума I выражается равенством

$$I(\varphi) = I_\varphi + I_T \frac{(\alpha + 2\beta\varphi)^2}{4\gamma^2}, \quad (13)$$

следующим из свойства аддитивности дисперсий гауссовых случайных величин [21]. Уравнению (11) соответствует уравнение Фоккера-Планка в форме Ито [13,21]:

$$\tau_\varphi \frac{\partial P(\varphi, t)}{\partial t} = - \frac{\partial}{\partial \varphi} [F(\varphi)P(\varphi, t)] + \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} [I(\varphi)P(\varphi, t)]. \quad (14)$$

Соответствующее стационарное распределение

$$P(\varphi) = Z^{-1} \exp\{-U(\varphi)\} \quad (15)$$

определяется нормировочной постоянной Z и эффективным потенциалом

$$U(\varphi) = \ln I(\varphi) - \int_0^\varphi \frac{F(\varphi')}{I(\varphi')} d\varphi'. \quad (16)$$

Стационарные состояния плотности энергии границ зерен φ задаются условием экстремума распределения (15) (потенциала (16)), которое приводит к выражению

$$2\beta^2\gamma\varphi^3 - (2b\gamma^2 - 3\alpha\beta\gamma)\varphi^2 + (\alpha^2\gamma + 2a\gamma^2 + 4\beta^2I_T)\varphi - 2(h_0\gamma^2 - \alpha\beta I_T) = 0. \quad (17)$$

Таким образом, положения экстремумов распределения (потенциала) не зависят от интенсивности шума I_φ . Данные экстремумы определяют режимы фрагментации при ИПД.

Решение (17) показано на рисунке 1. Согласно ему, при малых значениях интенсивности I_T существуют три стационарных состояния, два из которых соответствуют минимуму потенциала $U(\varphi)$ (сплошная и штриховая кривая), а один его максимуму (штрихпунктирная кривая). Первый минимум может достигаться при нулевом и ненулевом значениях плотности энергии границ зерен φ_0 в зависимости от значения $(\varepsilon_{ij}^e)^2$.

Ненулевые значения он принимает только в том случае, когда $(\varepsilon_{ij}^e)^2$ больше некоторой критической величины. Это обусловлено тем, что при ИПД процесс фрагментации может протекать, когда упругие деформации ε_{ij}^e и связанные с ними напряжения σ_{ij} превышают предел текучести. Стационарные состояния в процессе ИПД достигаются только при выполнении этого условия. Отметим, что в возбужденном

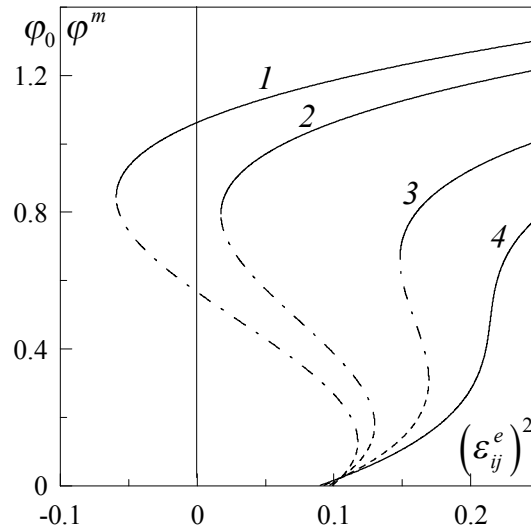


Рисунок 1 – Зависимость стационарных значений плотности энергии границ зерен φ_0 , φ^m от инварианта $(\varepsilon_{ij}^e)^2$ при параметрах $h'_0 = 0.005$, $\bar{\lambda} = 2.2$, $\bar{\mu} = 2.1$, $\alpha' = 1.7$, $\alpha_g = 1.0$, $e = 0.05$, $g = 2.1$, $a' = 0.3$, $\gamma = 2.4$, $\beta = 2.2$, $b = 2.8$, $\varepsilon_{ii}^e = -1.8$. Кривые 1–4 отвечают значениям $I_T = 0.1, 0.22, 0.45, 0.6$

(деформированном) состоянии предел текучести примерно на 10% выше, чем в равновесном (в сталях повышение предела текучести, обусловленное возбуждением границ зерен, достигало 50%) [22]. Часть кривой может оказаться в нефизической области мнимых деформаций (кривая 1). Второй минимум всегда имеет ненулевое значение. Меньшее из стационарных значений отвечает большему размеру зерна (штриховая кривая на рис. 1), большее (сплошная) — меньшему его размеру. Их разделяет неустойчивое состояние (штрихпунктирная кривая) при значении плотности энергии границ зерен φ^m , которое соответствует максимуму потенциала. Следует отметить, что нулевой минимум соответствует крупнозернистому поликристаллу, а в пределе монокристаллу. В случае монокристалла изначально реализуется нулевой минимум потенциала, и только когда он станет ненулевым процесс фрагментации начинает протекать. Если образец до ИПД уже имеет мелкозернистую структуру (реализуется состояние близкое к ненулевому минимуму $U(\varphi)$), то эволюция структуры материала к стационарному состоянию возможна даже при малых значениях $(\varepsilon_{ij}^e)^2$.

При увеличении I_T зависимость выходит из нефизической области (кривая 2), и при $(\varepsilon_{ij}^e)^2 = 0$ образец представляет собой монокристалл (или крупнозернистый поликристалл). Если повышать уровень деформации, то некоторое время реализуется монокристалл ($\varphi_0 = 0$). При увеличении $(\varepsilon_{ij}^e)^2$ до значения, когда сосуществуют нулевой и ненулевой минимумы потенциала при недостаточной интенсивности шума, который осуществляет перебросы между минимумами, процесс фрагментации не может произойти, так как эти минимумы разделены потенциальным барьером (штрихпунктирная линия). Затем нулевой минимум становится

ненулевым (пунктирная линия), и происходит непрерывный процесс фрагментации. При дальнейшем увеличении деформации первый минимум исчезает вместе с потенциальным барьером, и система по механизму фазового перехода первого рода резко переходит в состояние, описываемое вторым минимумом потенциала (сплошная линия). Данный переход может осуществляться и при наличии потенциального барьера за счет шума, если его интенсивность окажется достаточной. При этом происходит резкое уменьшение размеров зерен. Известно, что при фазовом переходе первого рода из-за наличия одновременно двух минимумов термодинамического потенциала система может находиться в двух метастабильных фазах [23]. Здесь это означает сосуществование предельных структур с различным размером зерна.

При дальнейшем возрастании теплового шума I_T реализация потенциала одновременно с нулевым и ненулевым минимумами становится невозможна (кривая 3). В остальном поведение системы аналогично описываемому кривой 2.

С ростом I_T (кривая 4) будет реализоваться непрерывный переход между монокристаллом и фрагментированным образцом при отсутствии потенциального барьера. При этом возможно формирование только одной предельной структуры.

Критическое значение второго инварианта получается из (17) при $\varphi = 0$

$$(\varepsilon_{ij}^e)_c^2 = -\frac{1}{\bar{\mu}} \left(h'_0 + g\varepsilon_{ii}^e + \frac{1}{2} \bar{\lambda} (\varepsilon_{ii}^e)^2 - \frac{\alpha\beta I_T}{\gamma^2} \right). \quad (18)$$

В координатах $(\varepsilon_{ij}^e)^2 - I_T$ соотношение (18) представляет прямую с угловым коэффициентом $\alpha\beta / \bar{\mu}\gamma^2$, ниже которой существует нулевое стационарное решение уравнения (17), отвечающее минимуму $U(\varphi)$ в точке $\varphi_0 = 0$.

На рисунке 2 приведена фазовая диаграмма, где линии отвечают пределам потери устойчивости системы.

Прямая 1, ниже которой возможно нулевое стационарное решение, определяется выражением (18). При $\varphi_0 = 0$ отсутствует канал диссипации энергии, связанный с образованием дефектных структур, и система представляет собой монокристалл, либо структуру, близкую к нему. Точки 1–4 на фазовой диаграмме соответствуют кривым потенциала на рис. 3, который обладает минимумами.

Область А отвечает реализации двух ненулевых минимумов потенциала $U(\varphi)$ (кривая 2 на рис. 3). Здесь наблюдаются две предельные структуры с большим (первый минимум потенциала) и малым (второй минимум) размером зерна.

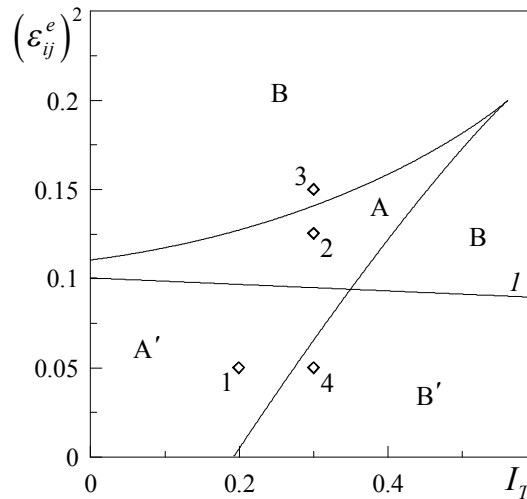


Рисунок 2 – Фазовая диаграмма системы с областями формирования двух (A, A') и одной (B, B') предельных структур, соответствующая параметрам рис. 1

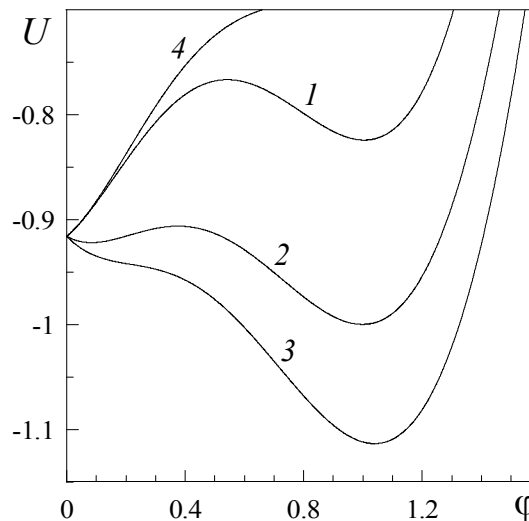


Рисунок 3 – Зависимость эффективного потенциала (16) от плотности энергии границ зерен ϕ при $I_\phi = 0,4$ и параметрах рисунка 1.

Кривые 1–4 отвечают значениям $(\varepsilon_{ij}^e)^2 = 0,05, 0,125, 0,15, 0,05$ и $I_T = 0,2, 0,3, 0,3, 0,3$ (точки 1–4 на рис. 2)

Область диаграммы A' подобна области A, но с тем отличием, что первый минимум потенциала здесь нулевой (кривая 1 рис. 3). Поскольку первая предельная структура формируется при $\phi_0 = 0$, она представляет собой монокристалл. В этой области малых деформаций в процессе ИПД фрагментация материала может не реализоваться. Однако, так как всегда сказывается влияние шума, который осуществляет переход системы между минимумами потенциала, здесь скорее будут сосуществовать две предельные структуры с различными типами зерен. Первая из них соответствует самым крупным монокристаллическим зернам (нулевой минимум потенциала), вторая – более мелким зернам.

В области больших деформаций B , согласно кривой 3, формируется одна предельная структура, и размер зерна здесь минимален. При увеличении $(\varepsilon_{ij}^e)^2$ он будет уменьшаться, и в пределе $(\varepsilon_{ij}^e)^2 \rightarrow \infty$ обработанный образец имеет аморфную структуру.

Единственный нулевой минимум $U(\varphi)$ (кривая 4 на рис. 3) реализуется в области малых деформаций B' . Здесь система представляет собой монокристалл, поскольку отсутствует второй минимум, в который в результате действия шума в процессе ИПД осуществляются переходы. Следует отметить, что такие переходы возможны только непосредственно во время ИПД. Благодаря им в областях A, A' формируются две предельные структуры, что отвечает режиму, при котором имеет место смесь зерен различного размера. Когда процесс ИПД закончен, следует полагать, что образец сформирован, и дальнейшие переходы за счет шума не осуществляются.

2 САМОПОДОБНЫЙ РЕЖИМ

Экспериментально обнаружено, что в процессе ИПД при определенных условиях могут возникать фрактальные структуры [16]. При этом во фрагментированном образце существуют зерна различного размера, и невозможно выделить какой-либо характерный масштаб (в нашем случае – масштаб плотности энергии границ зерен φ). Это означает, что система подобна сама себе при ее увеличении в любое количество раз.

Для исследования самоподобного поведения системы, следуя [12,24], найдем распределение вероятности (15), вид которого определяется эффективным потенциалом (16). В случае $I_\varphi \gg I_T$ получаем выражение

$$P(\varphi) \approx Z^{-1} I_\varphi^{-1} \exp \left\{ I_\varphi^{-1} \int_0^\varphi F(\varphi) d\varphi \right\}, \quad (19)$$

существенно отличное от однородной функции

$$P(x) = x^{-2\omega} \Pi(\varphi), \quad x = \varphi \varphi_s. \quad (20)$$

Последняя отвечает самоподобной системе, для которой отсутствует характерный масштаб плотности энергии дефектов ($\omega < 1$ — показатель распределения) [25]. Флуктуации температуры $I_T \gg I_\varphi$ приводят к распределению:

$$P(\varphi) \approx Z^{-1} 4\gamma^2 I_T^{-1} (\alpha + 2\beta\varphi)^{-2} \exp \left\{ 4\gamma^2 I_T^{-1} \int_0^\varphi F(\varphi) (\alpha + 2\beta\varphi)^{-2} d\varphi \right\}. \quad (21)$$

Данное распределение характеризуется степенной асимптотикой $P(\varphi) \propto \varphi^{-2}$ при $\alpha \rightarrow 0$ ($\alpha' \approx -\alpha_g \varepsilon_{ii}^e$) только в области $\varphi \rightarrow 0$, так как при этом интеграл в выражении (21) равен нулю и не дает вклад в распределение. При $\varphi \gg 1$ интеграл в общем случае дает значительный вклад, и распределение становится экспоненциальным, т.е. быстро спадает с увеличением φ . Требование самоподобия заключается в степенном виде функции распределения, поскольку при этом она спадает гораздо медленнее чем экспоненциальная, и вероятность возникновения в

системе значений $\varphi \gg 1$ хоть и мала, но существенна. Таким образом, рост интенсивности флуктуаций температуры в области $\varphi \rightarrow 0$ приводит к установлению самоподобного режима, которому отвечает однородная функция $P(x)$, характеризуемая целым показателем $2\omega = 2$. Это означает формирование большого количества предельных структур с крупными зернами различного размера. Однако, более интересна ситуация, когда образуются фрактальные структуры, т.е. размер зерен представлен как большими, так и малыми значениями φ .

В общем случае показатель распределения 2ω может быть не целым, а дробным, в частности, режиму самоорганизуемой критичности (СОК) отвечает значение $2\omega = 1.5$. Во избежание такого ограничения заменим потенциал (5) выражением²

$$f(\varphi, T) = f_0 - h_0\varphi + \frac{1}{2}a\varphi^2 - \frac{1}{3}b\varphi^3 + \alpha\varphi\Delta T + \beta\varphi^{1+\omega}\Delta T - \gamma(\Delta T)^2, \quad (22)$$

где введен показатель $0 < \omega < 1$. В работах [12,24] для описания самоподобного режима параметр порядка возводился в степень непосредственно в кинетических уравнениях. Здесь поскольку система является гамильтоновой, т.е. все уравнения получены из многомерного термодинамического потенциала, необходимо производить замену непосредственно в потенциале, а затем получать из него соответствующие уравнения. Система кинетических уравнений (7), (8) при этом принимает вид

$$\tau_\varphi \dot{\varphi} = h_0 - a\varphi + b\varphi^2 - \alpha\Delta T - (1 + \omega)\beta\varphi^\omega\Delta T + \sqrt{I_\varphi}\xi_1(t), \quad (23)$$

$$\tau_T \dot{T} = -\alpha\varphi - \beta\varphi^{1+\omega} + 2\gamma\Delta T + \sqrt{I_T}\xi_2(t). \quad (24)$$

Физический смысл проведенной замены состоит в том, что требование самоподобия достигается в рамках предположения о дробном характере отрицательной обратной связи, учтенной в первом кинетическом уравнении.

Тогда условие адиабатичности $\tau_\varphi \gg \tau_T$ немедленно приводит к уравнению Ланжевена (ср. с (11))

$$\tau_\varphi \dot{\varphi} = F_\omega(\varphi) + \sqrt{I_\omega(\varphi)}\xi(t), \quad (25)$$

где сила F_ω и эффективная интенсивность шума I_ω определяются равенствами

$$F_\omega(\varphi) = h_0 - \left(a + \frac{\alpha^2}{2\gamma}\right)\varphi + b\varphi^2 - \frac{\alpha\beta}{\gamma}\left(1 + \frac{\omega}{2}\right)\varphi^{1+\omega} - \frac{\beta^2(1+\omega)}{2\gamma}\varphi^{1+2\omega}, \quad (26)$$

$$I_\omega(\varphi) = I_\varphi + I_T \frac{(\alpha + (1 + \omega)\beta\varphi^\omega)^2}{4\gamma^2}. \quad (27)$$

²При $\omega = 1$ получаем потенциал (5) и переходим к случаю, описанному в разделе 2

Соответствующее распределение (ср. с (15))

$$P_{\omega}(\varphi) = Z^{-1} \exp\{-U_{\omega}(\varphi)\} \quad (28)$$

задается статистической суммой Z и эффективным потенциалом

$$U_{\omega}(\varphi) = \ln I_{\omega}(\varphi) - \int_0^{\varphi} \frac{F_{\omega}(\varphi')}{I_{\omega}(\varphi')} d\varphi'. \quad (29)$$

При $I_T \gg I_{\varphi}$ и $\alpha \rightarrow 0$ (28) сводится к каноническому виду (20), где $x = \varphi\varphi_s = \varphi$ и $\Pi(\varphi)$ определяется выражением

$$\Pi(\varphi) \approx Z^{-1} 4\gamma^2 \beta^{-2} (1+\omega)^{-2} I_T^{-1} \exp\left\{4\gamma^2 I_T^{-1} \int_0^{\varphi} F_{\omega}(\varphi') (\alpha + (1+\omega)\beta\varphi')^{-2} d\varphi'\right\}. \quad (30)$$

Согласно этому, распределение (28) имеет степенной вид, если интеграл в (30) слабо изменяется с увеличением φ . Условие $I_T \gg I_{\varphi}$ легко обеспечить, положив $I_{\varphi} = 0$. Примем также $\alpha = 0$ ($\alpha' = -\alpha_g \varepsilon_{ii}^e$), так как степенной вид распределения (28) требует выполнения этого условия. Подынтегральное выражение в (30) при этом имеет вид

$$4\gamma^2 I_T^{-1} \left[\frac{h_0}{(\beta(1+\omega))^2 \varphi^{2\omega}} - \frac{a}{(\beta(1+\omega))^2 \varphi^{2\omega-1}} + \frac{b\varphi^{2(1-\omega)}}{(\beta(1+\omega))^2} - \frac{\varphi}{2\gamma(1+\omega)} \right]. \quad (31)$$

Первое слагаемое с ростом φ уменьшается, второе слабо влияет на распределение при $a \approx 0$ или $\omega > 0.5$, третье слагаемое не дает вклада при $b \approx 0$. Причем влияние этих слагаемых можно значительно уменьшить при увеличении параметра β . Однако четвертое слагаемое с ростом φ существенно искажает степенной вид распределения, превращая его в экспоненциальное. Поэтому степенное распределение будет реализоваться только при $\gamma \ll 1$ или $I_T \gg 1$ и в ограниченном диапазоне $0 < \varphi < \varphi_{\max}$ ³. Однако физически φ не может принимать бесконечно больших значений, так как при этом фрагментированный образец будет представлять собой аморфную структуру, а этого нельзя достичь современными методами ИПД. Поэтому такое ограничение здесь уместно – в диапазоне $0 < \varphi < \varphi_{\max}$ формируется квазифрактальная структура, где имеются размеры зерен при всех φ данного диапазона. При больших φ распределение быстро спадает, становясь экспоненциальным, и более мелкие зерна не образуются.

Точки экстремума распределения (28) определяются уравнением:

³ Физический смысл требований самоподобия $\gamma \ll 1$ и $I_T \gg 1$ становится понятен из (27), поскольку при таких условиях возрастает эффективная интенсивность шума, соответственно увеличивается разброс значений φ по их величине.

$$(1 + \omega)\beta^2\gamma\varphi^{1+2\omega} + \alpha\beta\gamma(2 + \omega)\varphi^{1+\omega} - 2b\gamma^2\varphi^2 + (\alpha^2\gamma + 2a\gamma^2)\varphi + (1 + \omega)I_T\beta\omega(\alpha + (1 + \omega)\beta\varphi^\omega)\varphi^{\omega-1} - 2h_0\gamma^2 = 0. \quad (32)$$

Согласно (32) в актуальной области $\gamma \ll 1$, $I_T \gg 1$ фазовая диаграмма теряет смысл, так как при таком соотношении параметров существенным остается только предпоследнее слагаемое. При этом согласно (20) при $\varphi = 0$ распределение расходится, так как интеграл в (30) не дает вклада. С увеличением φ распределение остается степенным до тех пор, пока не станет существенным последнее слагаемое в (31), и распределение (28) не превратится в экспоненциально убывающее. Таким образом, при выбранном диапазоне параметров реализуется один максимум функции распределения в точке $\varphi = 0$, далее до $\varphi = \varphi_{\max}$ распределение является степенным, и при $\varphi > \varphi_{\max}$ оно экспоненциально спадает.

Распределения вероятностей (28) для самоподобного режима при $\omega = 0.7$ приведены на рисунке 4. Они ненормированные, поскольку интерес представляет только диапазон значений φ , при которых распределение имеет степенной вид. Все кривые построены в логарифмическом масштабе для того, чтобы показать, что в определенном диапазоне φ распределение принимает степенной вид, и реализуется самоподобный режим.

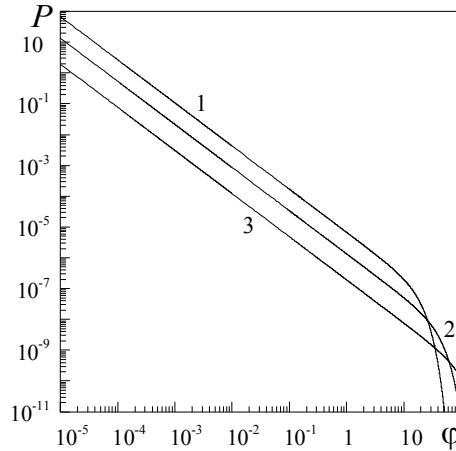


Рисунок 4 – Ненормированная функция распределения (28) при $\omega = 0,7$, $I_\varphi = 0$ и параметрах $h'_0 = 0,005$, $\bar{\lambda} = 2,2$, $\bar{\mu} = 2,1$, $\alpha_g = 1,0$, $e = 0,05$, $g = 2,1$, $a' = 0,3$, $\gamma = 0,01$, $\beta = 3,2$, $b = 0,01$, $\varepsilon_{ii}^e = -1,8$, $(\varepsilon_{ii}^e)^2 = 0,1$, $\alpha' = -\alpha_g\varepsilon_{ii}$. Кривые 1–3 отвечают значениям $I_T = 2, 10, 70$

Чтобы убедиться в линейности участков кривых на рис. 4 при $0 < \varphi < \varphi_{\max}$ проведем корреляционный анализ. Для этого в диапазоне значений $10^{-5} \leq \varphi \leq 10$ (где визуальности зависимости представляют прямые) методом наименьших квадратов получим уравнения регрессии вида:

$$\lg P_\omega(\varphi) = A \lg \varphi + B, \quad (33)$$

для первой кривой $A = -1.4157$, $B = -5.2063$, для второй $A = -1.4032$, $B = -5.8765$, и для третьей $A = -1.4005$, $B = -6.7153$. Полученное значение $A \approx -1.4$ согласуется со степенным выражением (20), где в нашем случае $2\omega = 1.4$. Коэффициент корреляции определим стандартным образом:

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n (y_i - \tilde{y})^2}{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2}, \quad (34)$$

где $y \equiv \lg P_\omega(\varphi)$ и \tilde{y} – значение соответственно уравнению (33), $\bar{y} = \sum_{i=1}^n y_i / n$ – среднее значение, а текущие значения y_i берутся из выражения (28) без учета Z . При этом для кривых 1–3 на рис. 4 величины R^2 составляют соответственно 0.99987989, 0.99999502, 0.99999989. Это говорит о высокой скоррелированности уравнения регрессии (33) и выражения (28) на линейном участке, т.е. распределение является здесь действительно степенным. На рисунке видно, что с увеличением интенсивности шума I_T протяженность линейного участка увеличивается, о чем также свидетельствует увеличение значения R^2 с ростом I_T . В формируемой квазифрактальной структуре при этом минимально возможный размер зерна будет уменьшаться.

3 КИНЕТИКА УСТАНОВЛЕНИЯ СТАЦИОНАРНОГО ЗНАЧЕНИЯ ПЛОТНОСТИ ЭНЕРГИИ ДЕФЕКТОВ

Для исследования кинетики плотности энергии границ зерен запишем уравнение вида

$$\dot{\varphi} = -\delta \frac{\partial f}{\partial \varphi}, \quad (35)$$

где δ – кинетический коэффициент. Из сравнения (35) с первым уравнением (6) следует $\delta \equiv 1/\tau_\varphi$.

Для простоты рассмотрим детерминистический случай, в котором $I_\varphi = I_T = 0$. Подставляя (5), (10) в (35) и измеряя время в единицах τ_φ ($\tilde{t} \equiv t/\tau_\varphi$), получим кинетическое уравнение в явном виде:

$$\frac{\partial \varphi}{\partial \tilde{t}} = h_0 - \left(a + \frac{\alpha^2}{2\gamma} \right) \varphi + \left(b - \frac{3\beta\alpha}{2\gamma} \right) \varphi^2 - \left(\frac{\beta^2}{\gamma} \right) \varphi^3. \quad (36)$$

Оно определяет динамику параметра φ при отсутствии шума и совпадает с уравнением Ланжевена (11) при $I(\varphi) = 0$. Производная $-\partial f/\partial \varphi$ задает термодинамическую силу $F(\varphi)$ (12), которая стремится привести параметр φ в притягивающий аттрактор, соответствующий

стационарному значению. Система при этом описывается термодинамическим потенциалом

$$V(\varphi) \equiv - \int_0^{\varphi} F(\varphi) d\varphi, \quad (37)$$

совпадающим с (5) при использовании подстановки (10).

Отметим, что первое слагаемое h_0 в (12) описывает некоторый постоянный источник дефектов, приводящий к росту плотности энергии границ зерен φ . Большие значения параметра h_0 смещают стационарные точки задачи в область более высоких значений дефектности и способствуют формированию более мелких зерен. Существование этого источника связано с дефектностью материала более глубоких структурных уровней – наличием дислокационной подструктуры, примесей и т.д. В частности, в случае сплавов параметром h_0 определяется зависимость предельного размера зерна от процентного содержания легирующих элементов. Так, например, в работе [26] для сплавов на основе алюминия приведены данные, из которых следует, что средний размер зерна в сплавах Al-Mg составляет 150 и 90 нм для 5 и 10% Mg; для сплавов Al-5% Zn-2% Mg и Al-10% Zn-4% Mg величина зерна равна соответственно 150 и 120 нм (до деформирования – 500 мкм). Это подтверждает указанную выше закономерность.

Исследуем влияние деформации ε_{ij}^e на процесс установления равновесия в системе с учетом определения (4). Функция, находящаяся в правой части (36), представлена на рисунке 5. Кривая 1 построена при самом малом значении деформации. Первое пересечение кривой с осью абсцисс соответствует неустойчивой стационарной точке (максимуму потенциала $V(\varphi)$ (37)), поскольку при отклонении от нее система назад не возвращается.

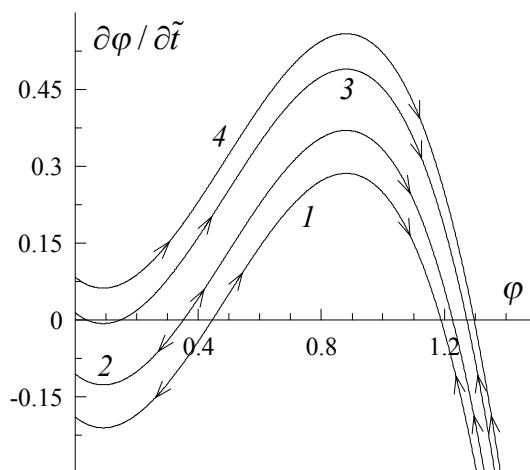


Рисунок 5 – Скорость изменения плотности энергии границ зерен $\partial\varphi / \partial\tilde{t}$ (36) как функция φ при параметрах рис. 1. Кривые 1–4 отвечают значениям $(\varepsilon_{ij}^e)^2 = 0.01, 0.05, 0.107, 0.14$ соответственно

Второе пересечение отвечает минимуму потенциала, и соответственно устойчивому значению φ . Как видно из рисунка, при $\varphi = 0$ скорость изменения плотности энергии границ зерен отрицательна. Это связано с

тем, что $V(\varphi)$ имеет минимум в области значений $\varphi < 0$. Однако отрицательные φ не имеют физического смысла, так как при них канал диссипации энергии, связанный с образованием дефектов, становится источником выделения дополнительной энергии, а это противоречит законам сохранения. Поэтому следует полагать, что при достижении нулевого значения плотность энергии границ зерен перестает уменьшаться.

Пусть в системе установилось равновесное значение $\varphi > 0$, отвечающее второму пересечению кривой 1 с осью абсцисс, и при этом образовалась соответствующая предельная структура. Если теперь быстро увеличивать значение деформации, плотность энергии границ зерен растет, как показано кривой 2. Размер зерна в предельной структуре при этом уменьшается. Здесь кинетика приближения к устойчивому стационарному значению имеет экспоненциальный характер, поскольку зависимость вблизи точки пересечения близка к линейному виду. При дальнейшем увеличении $(\varepsilon_{ij}^e)^2$, как показано кривой 3, наблюдаются три точки пересечения зависимости с осью абсцисс. При этом добавляется новое стационарное устойчивое состояние, описываемое первым пересечением. Так как оно близко к значению $\varphi = 0$, реализуется предельная структура с крупным размером зерна. Потенциал имеет при этом два минимума и один максимум в положительной области φ , в отрицательной же он монотонно возрастает при $\varphi \rightarrow -\infty$. При дальнейшем увеличении $(\varepsilon_{ij}^e)^2$ существует только одно стационарное состояние (кривая 4), которое отвечает реализации предельной структуры с малым размером зерна.

Следует отметить, что в реальном эксперименте в силу геометрических особенностей методов ИПД достижение стационарного режима невозможно. В таких классических методах, как равноканальное угловое прессование, винтовая экструзия, многоугольная равноканальная гидроэкструзия и т.д., для которых характерно сохранение сечения образца до и после обработки ИПД, этого нельзя достичь по причине невозможности обеспечения постоянного во времени упругого напряжения (в нашем случае ε_{ij}^e). Образец с некоторой постоянной скоростью входит в активную зону экспериментальной установки и выходит из нее. При этом действующие сдвиговые напряжения σ_{ij} ($i \neq j$) меняются от нуля до некоторого максимального значения при входе в активную зону и от максимального значения до нуля при выходе из нее. Тем не менее, в активной зоне структура материала будет эволюционировать в сторону стационарного значения, но за время пребывания в зоне система успеет пройти только часть пути в этом направлении. Поэтому для достижения стационарного предельного среднего размера зерна широко практикуется многократное повторение обработки материала на одной и той же установке или комбинирование обработки на установках различного типа.

Используют также идею интенсивного однородного нагружения образца в процессе его обработки. В этом случае стационарный режим по напряжению $\varepsilon_{ij}^e = \text{const}$, в принципе, может быть достигнут, но в силу изменения сечения образца в процессе такой обработки, только на ограниченном промежутке времени.

4 ВЫВОДЫ

Предложенная теория описывает существование предельной зеренной структуры материала, которая достигается в процессе ИПД (ненулевой минимум термодинамического потенциала). Интересным является то, что обычное монокристаллическое или близкое ему крупнозернистое состояние материала (нулевой минимум) в контексте теории можно рассматривать как своего рода предельную структуру, которая является равновесной для обычной пластичности. Показано, что переход от основной крупнозернистой структуры ко второй мелкозернистой в процессе ИПД может проходить по сценарию фазового перехода первого и второго рода. Исследование самоподобного режима показывает, что можно подобрать параметры, при которых образуется множество предельных структур с различным размером зерна. При этом распределение вероятности реализации значений плотности энергии границ зерен имеет степенной вид. Исследована кинетика установления стационарных значений плотности энергии дефектов.

Учитывая более высокие степени разложения термодинамического потенциала, можно предсказать принципиальную возможность существования в материале и других предельных структур с еще более мелким зерном. Для экспериментального обнаружения предельных структур более высокого ранга необходимо после того, как будет достигнута первая предельная структура, резко увеличить скорость деформирования (увеличить ε_{ij}^e). Этого можно достигнуть, либо увеличив скорость подачи материала в установку ИПД, или при той же скорости подачи резко уменьшить сечение заготовки в процессе обработки.

Выражаем благодарность Государственному фонду фундаментальных исследований Украины (грант Ф25/668-2007) за поддержку работы. Мы признательны также участникам семинара отдела "Электронные свойства металлов" Донецкого ФТИ им. А.А. Галкина НАН Украины и семинара по статистической физике при Институте прикладной физики НАН Украины (г. Сумы) за обсуждение работы. Я.А. Ляшенко благодарен В.Н. Борисюку за консультационную поддержку при исследовании самоподобного режима.

SUMMARY

THEMODYNAMICS OF SEVERE PLASTIC DEFORMATIONS WITH ACCOUNT OF NOISE

*A.V.Khomenko, Ya.A.Lyashenko, L.S.Metlov**

Sumy State University

**Donetsk Institute of Physics and Technics named after A.A.Galkin,*

e-mail: ismet@kinetic.ac.donetsk.ua

Within the framework of Landau theory of phase transitions the fragmentation of solids is studied during the process of severe plastic deformations. For description of appearing defect structures a densities of excess energy and total surface of grain boundaries are introduced that allows to take into account two channels of energy dissipation (thermal and defects productions). The account of additive noises of the energy density of grain boundaries and temperature is carried out, and the phase diagram is built, where intensity of temperature noise and elastic component of strain determine the domains of realization of different types of limiting structures. It is shown that with the increase of elastic strains the size of grains decreases in limiting structures. The formation conditions of two limiting structures are found that correspond to the mode at which the mixture of grains of different size exists. The self-similar distribution of energies densities of grain boundaries is represented at the account of fractional character of feedback in the system and is provided by fluctuations of temperature. The kinetics of the system is investigated in deterministic case.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Lorenz E.N. Deterministic nonperiodic flow // J. Atmos. Sci. – 1963. – V.20.– P.130–141.

2. Зельцер А.С., Соболева Т.К., Филиппов А.Э. Автоблокировка зародышеобразования и универсальность кинетических явлений при фазовых переходах первого рода // ЖЭТФ. – 1995. – Т. 108, № 1. – С. 356–373.
3. Олемской А.И., Хоменко А.В. Трехпараметрическая кинетика фазового перехода // ЖЭТФ. – 1996. – Т. 110, №6(12). – С. 2144–2167.
4. Хоменко А.В., Ляшенко Я.А. Гистерезисные явления при плавлении ультратонкой пленки смазки // ФТТ. – 2007. – Т. 49, № 5. – С. 886–890.
5. Олемской А.И., Хоменко А.В. Синергетика конденсированной среды. – Сумы: Изд-во СумГУ, 2002. – 372 с.
6. Метлов Л.С., Морозов А.Ф. Особенности разрушения квазихрупких тел // ФТВД. – 2001. – Т. 11, № 2. – С. 93–103.
7. Metlov L.S. // Preprint: <http://arxiv.org/abs/cond-mat/0711.0399>. – 2007. – 9 p.
8. Метлов Л.С. Качественная термодинамическая модель фрагментации твердых тел при интенсивной пластической деформации // Деформация и разрушение материалов. – 2007. – № 2. – С. 40–43.
9. Метлов Л.С. Фрагментация твердых тел // Вестник ДонГУ, Сер. А: Естественные науки. – 2006. – № 1. – С. 269–274.
10. Метлов Л.С. Термодинамика интенсивных пластических деформаций // МФИИТ. – 2007. – Т. 29, № 3. – С. 335–345.
11. Khomenko A.V. Noise influence on solid-liquid transition of ultrathin lubricant film // Phys. Lett. A. – 2004. – V. 329, № 1–2. – P. 140–147.
12. Хоменко А.В., Ляшенко Я.А. Стохастическая теория прерывистого режима плавления ультратонкой пленки смазки // ЖТФ. – 2005. – Т. 75, № 11. – С. 17–25.
13. Хоменко А.В., Ляшенко Я.А. Плавление ультратонкой пленки смазки за счет диссипативного разогрева поверхностей трения // ЖТФ. – 2007. – Т. 77, № 9. – С. 137–140.
14. Yoshizawa H., Chen Y.-L., Israelachvili J. Fundamental mechanisms of interfacial friction. 1. Relation between adhesion and friction // J. Phys. Chem. – 1993. – V. 97, № 16. – P. 4128–4140; Yoshizawa H., Israelachvili J. Fundamental mechanisms of interfacial friction. 2. Stick-slip friction of spherical and chain molecules // J. Phys. Chem. – 1993. – V. 97, № 43. – P. 11300–11313.
15. Khomenko A.V., Yushchenko O.V. Solid-liquid transition of ultrathin lubricant film // Phys. Rev. E. – 2003. – Vol. 68, № 3. – P. 036110–6.
16. Бейгельзимер Я.Е., Варюхин В.Н., Орлов Д.В., Сынков С.Г. Винтовая экструзия – процесс накопления деформаций. – Донецк: ТЕАН, 2003. – 87 с.
17. Малыгин Г.А. Самоорганизация дислокаций и локализация скольжения в пластически деформируемых кристаллах (обзор) // ФТТ. – 1995. – Т. 37, № 1. – С. 3–42.
18. Малыгин Г.А. Процессы самоорганизации дислокаций и пластичность кристаллов // УФН. – 1999. – Т. 169, № 9. – С. 979–1010.
19. Малыгин Г.А. Кинетический механизм образования фрагментированных дислокационных структур при больших пластических деформациях // ФТТ. – 2002. – Т. 44, № 11. – С. 1979–1986.
20. Горопов Е.А., Харченко Д.О. Влияние шума на характер поведения синергетической системы // Известия ВУЗов, физика. – 1996. – № 4. – С. 75–82; Олемской А.И. Теория стохастических систем с сингулярным мультипликативным шумом // УФН. – 1998. – Т. 168, № 3. – С. 287–321.
21. Risken H. The Fokker-Planck equation. – Berlin: Springer, 1989. – 474 p.
22. Олемской А.И., Валиев Р.З., Хоменко А.В. О возбужденном состоянии границы зерна в нано- и субмикроструктурах // МФИИТ. – 1999. – Т. 21, № 4. – С. 43–58.
23. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Статистическая физика. Ч.1. – М.: Наука, 1995. – 608 с.
24. Olemskoi A.I., Khomenko A.V., Kharchenko D.O. Self-organized criticality within fractional Lorenz scheme // Physica A. – 2003. – V. 323. – P. 263–293.
25. Amit D.J. Field Theory, the Renormalization Group, and Critical Phenomena. – New York: McGraw-Hill, Inc., 1978. – 336 p.
26. Мазилкин А.А., Страумал Б.Б., Протасова С.Г., Когтенкова О.А., Валиев Р.З. Структурные изменения в алюминиевых сплавах при интенсивной пластической деформации // ФТТ. – 2007. – Т. 49, № 5. – С. 824–829.
27. Варюхин В.Н., Спусканюк В.З., Матросов Н.И., Дугадко А.Б., Шевченко Б.А., Медведская Э.А., Сенникова Л.Ф., Спусканюк А.В., Павловская Е.А. Равноканальная многоугловая экструзия // ФТВД. – 2002. – Т. 12, № 4. – С. 31–39.

Хоменко А.В., кандидат физ.-мат. наук, доцент
кафедры физической электроники;
Ляшенко Я.А., аспирант кафедры физической
электроники;
Метлов Л.С., кандидат физ.-мат. наук, старший
научный сотрудник

Поступила в редакцию 30 апреля 2008 г.