

Министерство образования и науки Украины
Сумский государственный университет

А.И. Олемской, А.В. Хоменко

СИНЕРГЕТИКА КОНДЕНСИРОВАННОЙ СРЕДЫ

Рекомендовано Министерством образования и науки Украины в качестве учебного пособия для студентов высших учебных заведений, которые обучаются по направлению "Электроника"

Сумы Издательство СумГУ 2002

ББК 22.37я7
О53
УДК 538.9 (075.8)

Рекомендовано Міністерством освіти і науки України
як навчальний посібник для студентів вищих навчальних закладів,
які навчаються за напрямом "Електроніка"
(гриф надано Міністерством освіти і науки України
лист №14/18.2 — 1825 від 08.10.2002)

Рецензенти:

доктор фіз.—мат. наук, проф. С.П. Рощупкін
доктор фіз.—мат. наук, проф. С.І. Денисов

Рекомендовано до друку вченою радою Сумського державного
університету Міністерства освіти і науки України

Олемской О.І., Хоменко О.В.

О53 Синергетика конденсованого середовища: Навчальний посіб-
ник. — Суми: Видавництво СумДУ, 2002. — Російською мовою.

ISBN 966 - 7668 - 67 - 3

Навчальний посібник присвячений розвитку синергетичної картини, що дозволяє подати єдиним чином структурні перетворення, процес пластичної деформації та руйнування твердого тіла. Посібник призначений для студентів і аспірантів фізико—технічних спеціальностей університетів.

ISBN 966 - 7668 - 67 - 3

ББК 22.37я7

© О.І. Олемской, О.В. Хоменко

© Видавництво СумДУ, 2002

Оглавление

Предисловие	7
1 Теория самоорганизующихся систем	15
1.1 Синергетика фазового перехода	18
1.1.1 Переход второго рода	22
1.1.2 Переход первого рода	33
1.1.3 Кинетическая картина фазового превращения	44
1.2 Самоорганизующаяся критичность	51
1.2.1 Формирование стационарной лавины	55
1.2.2 Флуктуационное формирование лавины	59
1.2.3 Дробная система Лоренца	67
1.2.4 Самоподобное распределение лавин	73
1.2.5 Неаддитивный ансамбль лавин	80
1.3 Синергетика самоорганизующейся системы	88
1.3.1 Термодинамическое превращение	91
1.3.2 Кинетическое превращение	96
1.3.3 Лагранжев формализм	98
1.4 Суперсимметричная теория самоорганизующейся системы	102
1.4.1 Микроскопическое представление системы Лоренца	104
1.4.2 Суперсимметричный лагранжев формализм .	107
1.4.3 Корреляционная техника	111
1.4.4 Микроскопическое условие самоорганизующей критичности	125

2	Структурные превращения вдали от равновесия	129
2.1	Смещения атомов сильнонеравновесного кристалла .	133
2.2	Микроскопическая теория превращений мартенситного типа	137
2.3	Теория иерархической связи	144
2.4	Фрактальная кинетика перестройки кристаллической структуры	155
2.5	Особенности низкотемпературной эволюции орторомбической фазы оксидов	170
	2.5.1 Структурная релаксация	170
	2.5.2 Магнитная релаксация	174
2.6	Кинетика наводороживания и дегазации палладия . .	178
	2.6.1 Образование и рост β -фазы	178
	2.6.2 Кинетика обратного $\beta \rightarrow \alpha$ превращения . . .	186
2.7	Проявление неравновесности в поведении мартенситной макроструктуры	198
	2.7.1 Обзор экспериментальных данных	199
	2.7.2 Термодинамическое описание мартенситных состояний	205
	2.7.3 Фрактальная картина формирования мартенситной структуры	213
	2.7.4 Сравнение теории с экспериментом	220
2.8	Взрывная кристаллизация ультрадисперсных аморфных пленок	232
	2.8.1 Экспериментальные данные	234
	2.8.2 Исследование условий взрывной кристаллизации	235
	2.8.3 Описание взрывной кристаллизации в представлении самоорганизуемой критичности . .	238
	2.8.4 Временная зависимость вероятности кристаллизации	243
3	Синергетика пластической деформации	247
3.1	Полевая теория сверхпластичности	249
	3.1.1 Концепция перестраиваемого потенциального рельефа	250

3.1.2	Полевая теория вязкоупругого поведения конденсированной среды	257
3.2	Коллективное поведение дислокационно–вакансионного ансамбля в локализованной зоне пластической деформации	266
3.2.1	Вывод уравнений дислокационно–диффузионной кинетики	269
3.2.2	Анализ уравнений дислокационно–диффузионной кинетики	276
3.2.3	Синергетика образования локализованной полосы пластического течения	281
3.3	Синергетика структурных превращений при деформации и отжиге ГЦК монокристаллов	286
3.3.1	Деформация	286
3.3.2	Отжиг	293
3.4	Волны пластической деформации	295
3.5	Возникновение иерархических дефектных структур в процессе развитой пластической деформации	304
3.5.1	Фрактальная кинетика ползучести твердого тела	304
3.5.2	Эволюция дефектной структуры в процессе пластической деформации	318
4	Синергетика разрушения твердого тела	323
4.1	Термодинамические критерии разрушения	325
4.2	Микроскопическая картина разрушения	329
4.2.1	Исследование элементарного носителя разрушения	331
4.2.2	Кластеризация носителей хрупкого разрушения	335
4.3	Фрактальная теория усталостного разрушения	338
	Литература	345
	Приложение А	363
	Приложение В	367

Предисловие

Будучи наукой о самоорганизующихся системах, синергетика позволяет понять особенности коллективного поведения сильно неравновесных статистических ансамблей в физике, химии, биологии, социологии и т. д. Вместе с тем при исследовании конденсированной среды до последнего времени использовались методы равновесной статистической физики. Это связано с предположением, что конденсированная среда, находящаяся под воздействием, сохраняющим ее как таковую, представляет равновесную или слабонеравновесную статистическую систему. В последнее время, однако, возрос интерес к явлениям, в которых поведение статистического ансамбля атомов в конденсированном состоянии становится таким, что обычные представления (типа концепции фононов или термодинамической картины фазовых переходов) теряют применимость либо требуют принципиальных изменений. Такое поведение связано с сильным отклонением атомной системы от равновесного состояния, как это имеет место, например, в ядре дефекта кристаллической решетки или зонах пластического течения и разрушения. Последовательная картина сильнонеравновесной конденсированной среды требует использования методов, которые позволяют представить такие особенности, как неэргодичность статистического ансамбля, возникновение иерархических структур, структурная релаксация, взаимное влияние подсистемы, испытывающей фазовый переход, и окружающей среды и т. д. Целью настоящего пособия является всестороннее исследование такого рода особенностей в рамках концепции о перестройке атомных состояний при значительном удалении от равновесия. Это достигается на основе синергетической картины, представляющей взаимно согласованную эволюцию гидродинамических мод, па-

раметризующих систему.

Пособие состоит из четырех глав, первая из которых посвящена развитию синергетической концепции, а три остальные содержат ее приложение к структурным превращениям, пластической деформации и разрушению твердого тела вдали от равновесия.

В первой главе изложены методы исследования самоорганизующейся конденсированной среды, которые представляют основу дальнейшего рассмотрения. В разделе 1.1 мы показываем, каким образом проводится обобщение стандартной картины фазовых переходов первого и второго рода на синергетическую картину превращения. Основой используемого подхода является схема Лоренца, в рамках которой эволюция системы представляется параметром порядка, сопряженным ему полем и управляющим параметром. Показано, что кинетическая картина фазовых переходов проявляет универсальность, состоящую в наличии на фазовом портрете квазистационарного участка, положение которого не зависит от микроскопических деталей. Проведен анализ возможных режимов эволюции системы в ходе превращения.

Раздел 1.2 посвящен синергетическому исследованию явления самоорганизующейся критичности, которое отличается от фазового перехода тем, что система претерпевает критическую перестройку в отсутствие внешнего воздействия. Основная особенность такого режима состоит в том, что эволюция стохастической системы протекает самоподобным образом, в связи с чем ее функция распределения имеет степенную асимптотику. В подразделе 1.2.1 показано, что такое поведение наблюдается при течении сыпучей среды по наклонной плоскости (модель sandpile). Образование одиночной лавины представляется системой Лоренца, параметризуемой компонентами скорости и наклоном поверхности, величины которых испытывают аддитивный шум. В результате построена фазовая диаграмма, определяющая области равновесного, неравновесного и смешанного состояний (подраздел 1.2.2). Показано, что учет условия самоподобия требует дробного характера обратных связей в схеме Лоренца (подраздел 1.2.3). При параметризации системы размером лавин, их энергией и сложностью, которая в обычном случае сводится к энтропии, дробная система Лоренца позволяет воспроизвести степенную форму распределения лавин по размерам (подраздел 1.2.4). Для

определения соотношений между показателями этого распределения и мультипликативного шума, фрактальной размерностью фазового пространства, числом уравнений, необходимых для представления системы в режиме самоорганизующейся критичности, и параметром неаддитивности Цаллиса в подразделе 1.2.5 использованы представления дробного дифференциала/производной и производной Джексона (основные сведения о них приведены в приложении А).

В разделе 1.3 синергетический подход используется для описания термодинамических (подраздел 1.3.1) и кинетических (подраздел 1.3.2) переходов. При описании первых в качестве параметра превращения используется плотность сохраняющейся величины, а во втором случае — сопряженный ей поток. Наше рассмотрение основывается на уравнении непрерывности и соотношении Онзагера, обобщение которых на нестационарный случай приводит к системе Лоренца. В этой связи можно предполагать, что развитый формализм представляет синергетическое обобщение физической кинетики. В подразделе 1.3.3 показано, каким образом уравнения Лоренца следуют из полевого подхода.

Важная особенность сильнонеравновесных систем состоит в том, что их поведение определяется как одиночными возбуждениями фермиевского типа, так и коллективными — бозевского. Поэтому последовательная микроскопическая теория таких систем должна носить суперсимметричный характер. Соответствующая техника изложена в разделе 1.4, где сначала (подраздел 1.4.1) проведена микроскопическая интерпретация модели Лоренца. Показано, что она отвечает простейшему выбору гамильтониана бозон—фермионной системы. В подразделе 1.4.2 представлен суперсимметричный лагранжев формализм, позволяющий воспроизвести уравнения Лоренца, в которых роль управляющего параметра играет энтропия (см. также приложение В). Использование корреляционной техники в подразделе 1.4.3 позволяет самосогласованным образом описать эффекты памяти и потери эргодичности в процессе самоорганизации. Получены микроскопический параметр памяти, микро— и макроскопическая восприимчивости, а также параметр неэргодичности в зависимости от интенсивности термического беспорядка. Построена фазовая диаграмма системы, определяющая области упорядоченной, разупорядоченной, эргодической и неэргодической фаз. В заключительном под-

разделе 1.4.4 определены микроскопические условия применимости схемы Лоренца для описания самоорганизуемой критичности.

Глава 2 посвящена исследованию неравновесных структурных превращений, последовательное описание которых требует выхода за рамки стандартных представлений. Так, разделы 2.1, 2.2 основаны на концепции перестраиваемого потенциального рельефа, согласно которой при удалении от равновесия, кроме перемещения атома по жесткому рельефу, становится существенным изменение его формы (например, появляются новые минимумы). Использование этой концепции позволяет представить картину ближнего порядка смещений вблизи фазового перехода (раздел 2.1), а также разработать микроскопический механизм мартенситного превращения (раздел 2.2).

Основная часть главы 2 посвящена исследованию макроскопических особенностей структурных превращений в рамках представления об иерархически соподчиненных структурах. Это представление основывается на концепции ультраметрического пространства, в котором невозможно построить треугольник со всеми разными сторонами. Соответствующий формализм, представляющий основу дальнейшего изложения, разработан в разделе 2.3, где предложено уравнение, позволяющее найти возможные виды распределения вероятности по иерархическим уровням. Реальные иерархические структуры рассмотрены в разделе 2.4, согласно которому нижний уровень отвечает однородным объемам, обладающим идеальной кристаллической решеткой; переход на следующий уровень, означающий смещение в ультраметрическом пространстве, отвечает объединению этих объемов в кластеры; последние, в свою очередь, объединяются в суперкластеры следующего уровня иерархии и т. д. — до полного объема образца. В результате распределение атомов иерархической структуры представляется в виде разложения по волновому и ультраметрическому пространствам.

Разделы 2.5 — 2.8 посвящены применению указанных представлений к конкретным проблемам физики конденсированной среды. Анализ данных по дифракции проникающего излучения в высокотемпературных сверхпроводниковых оксидах приводит к заключению, что их понимание требует, чтобы вместо единственного ансамбля концентрационных волн использовался иерархически соподчиненный набор таких ансамблей (подраздел 2.5.1). Это позволя-

ет объяснить критическое замедление эволюции структуры оксида $YBa_2Cu_3O_{7-x}$ в зависимости от степени его нестехиометричности x . В подразделе 2.5.2 показано, каким образом особенности структурной релаксации определяют процесс магнитной.

Исследование эволюции структуры в системе *водород — переходной металл* (раздел 2.6) позволяет приблизиться к пониманию важнейшей проблемы удержания водорода в металлах. На основе фрактального представления ансамбля дефектов, возникающего при наводороживании палладия, выясняется природа стабилизации водорода в неравновесной системе (подраздел 2.6.1). Кинетика обратного процесса выхода водорода из решетки металла исследуется в подразделе 2.6.2.

Значительное место главы 2 уделено исследованию макроструктуры мартенсита в ходе реконструктивного превращения (раздел 2.7). Анализ экспериментальных данных в подразделе 2.7.1 указывает на существенно неравновесный характер такой структуры, наиболее ярко проявляющийся в сложном строении петли гистерезиса. Показано, что использование теории Ландау при описании мартенситного превращения требует учета дальнедействующих упругих полей, наличие которых приводит к фрактальной зависимости термодинамического потенциала от параметров макроструктуры (подраздел 2.7.2). В свою очередь, такая зависимость является отражением иерархического соподчинения элементов мартенситной структуры, относящихся к различным уровням. В результате ее изменение изображается движением по двумерному иерархическому дереву (подраздел 2.7.3). Использование такого представления позволяет понять особенности акустической эмиссии в ходе превращения. Количественная картина, развитая в подразделе 2.7.4, объясняет дефект модуля мартенситного кристалла и природу эффекта памяти формы. Показано, каким образом процесс пластической деформации сказывается на мартенситном превращении.

Заключительный раздел 2.8 посвящен исследованию механизма взрывной кристаллизации в аморфных пленках. Наше рассмотрение основывается на результатах экспериментов с ультрадисперсными порошками германия (подраздел 2.8.1). Использование модели Лоренца в подразделе 2.8.2 позволяет найти условия перехода от холодной к взрывной кристаллизации. Соответственно исследование

стационарных распределений теплоты кристаллизации и теплового потока по иерархическим уровням приводит к определению условий взрывной кристаллизации в зависимости от температуропроводности (подраздел 2.8.3). В подразделе 2.8.4 найдена временная зависимость вероятности спонтанной кристаллизации в тонких пленках.

Переходя к изложению глав 3, 4, посвященных исследованию пластической деформации и разрушения, следует отметить, что несмотря на значительные усилия, последовательная картина, позволяющая представить эти процессы на масштабах от микроскопического до макроскопического, до последнего времени отсутствует. Причина отставания в объяснении деформации и разрушения, кажущихся намного проще таких явлений, как сверхпроводимость и сверхтекучесть, состоит в том, что для последних хорошо определены элементарные носители явления (конденсат куперовских пар и атомов He^4), тогда как для первых их представление приводит к весьма трудной задаче. Так, например, совершенно неприемлемо рассматривать процесс сверхпластичности как сверхтекучесть дефектов кристаллической среды. Это связано с многообразием механизмов сверхпластичности и отсутствием последовательной микроскопической картины, позволяющей описать носители деформации. Таким образом, требуется развить микроскопическое описание дефектов кристаллической структуры, которое позволило бы представить не только упругое поле, но и характер нарушения межатомных связей в области ядер. Такая программа реализована в разделах 3.1, 4.2. Другая особенность реальной структуры состоит в том, что в ходе своей эволюции различные дефекты испытывают не только взаимодействие, но и попадают в иерархическое соподчинение друг к другу: дислокации выстраиваются в малоугловые стенки, вакансии образуют дислокационные петли и т. д. Установление иерархической связи проявляется как качественная перестройка в поведении системы дефектов, которая выражается в появлении нового структурного уровня. Соответствующая теория изложена в разделе 3.5.

Изложение главы 3, посвященной синергетике развитой пластической деформации, открывается рассмотрением бесструктурной среды, сдвиговая вязкость которой настолько велика, что возникает бездефектное сверхпластичное состояние (раздел 3.1). На основе полевого подхода найдены уравнения, представляющие поведение

пластической и упругой составляющих, проанализирован характер их поведения в различных частных случаях. Наиболее ярким примером такого рода является течение вязкой жидкости.

Раздел 3.2 посвящен рассмотрению автокаталитического процесса размножения вакансий и дислокаций в зоне развитой пластической деформации. В подразделе 3.2.1 получены феноменологические уравнения диффузионно–дислокационной кинетики, параметры которых оценены в рамках микроскопического подхода. Благодаря нелинейности этих уравнений их анализ требует использования метода фазовых портретов (подраздел 3.2.2). Показано, что при достижении предельного уровня скалывающих напряжений система переходит в автокаталитический режим размножения, приводящий к появлению локализованной полосы пластической деформации. Ее описание (подраздел 3.2.3) проводится на основе синергетического подхода, развитого в разделе 1.1.

Предметом раздела 3.3 является связь между процессами пластической деформации и структурных превращений. В подразделе 3.3.1 исследована эволюция структуры ГЦК кристалла при плавном нарастании внешней деформации. Перестройка дефектной структуры представлена в рамках синергетических представлений. Аналогичным образом дается описание процесса отжига, в ходе которого происходит обратное упрощение дефектной структуры (подраздел 3.3.2).

Как правило, процесс пластической деформации определяется самоорганизацией в ансамбле дефектов, распределение которых представляется материальными полями. В отличие от этого раздел 3.4 посвящен исследованию самоорганизации самого упругого поля, проявляющейся как волны пластической деформации. Проведен анализ экспериментальной картины наблюдения таких волн, дается ее теоретическая трактовка.

Раздел 3.5 посвящен исследованию процесса пластической деформации при наличии иерархически соподчиненных дефектных структур. В подразделе 3.5.1 рассмотрена картина ползучести твердого тела при различном сочетании температур и нагрузок. Показано, что установившаяся и неуставившаяся стадии ползучести реализуются, когда определяющую роль играет единственный структурный уровень. С включением иерархической связи дефектов процесс

деформации замедляется вплоть до логарифмического. В подразделе 3.5.2 построена картина эволюции дефектной структуры, наблюдающейся с ростом пластической деформации. Показано, что в реальной структуре связано малое число иерархических уровней.

Глава 4 посвящена исследованию синергетической картины процесса разрушения. В разделе 4.1 проведен обзор термодинамических критериев разрушения, сводящих его к "плавлению" межатомных связей. Подраздел 4.2.1 посвящен микроскопическому описанию элементарного носителя вязкого разрушения, который отвечает ослаблению межатомных связей в локализованной области, заключенной между соседними плотноупакованными плоскостями. Наряду с дислокациями эти образования определяют флуктуационное зарождение кластера, приводящего к магистральной трещине в процессе вязкого разрушения (подраздел 4.2.2). При поэтапном объединении элементарных носителей реализуется механизм усталостного разрушения, рассмотренный в разделе 4.3.

Глава 1

Теория самоорганизующихся систем

Под синергетикой понимается междисциплинарное направление, позволяющее единым образом представить явление самоорганизации в задачах физики, химии, биологии, социологии и других открытых системах. Как известно, неравновесная кинетика основывается на втором начале термодинамики, согласно которому энтропия закрытой системы, представляющая меру ее беспорядка, может только возрастать или оставаться постоянной. В отличие от этого синергетика исследует самоорганизацию открытых систем, значительное удаление которых от равновесия приводит к уменьшению энтропии. В результате такой самоорганизации возникает метастабильное упорядоченное состояние, отвечающее минимуму синергетического потенциала, в котором подсистема может находиться настолько долго, пока подвержена внешнему воздействию. Характерная особенность синергетического состояния состоит в том, что оно стационарно, но неравновесно.

Раздел 1.1 посвящен исследованию кинетики фазовых переходов, течение которых представляется параметром порядка, сопряженным полем и управляющим параметром, роль которого играет энтропия. В предельных случаях соотношений между временами релаксации указанных величин проведено аналитическое и численное исследование фазовых портретов, отвечающих различным кинетическим режимам. Показано, что благодаря критическому возрастанию времен

релаксации параметра порядка и сопряженного поля колебательное поведение реализуется, если затравочное время релаксации управляющего параметра намного превышает значения для других степеней свободы. В противоположном случае все фазовые траектории быстро сбегаются к универсальному участку.

В отличие от фазового перехода, течение которого обеспечивается закритическим значением управляющего параметра, в разделе 1.2 исследуется режим самоорганизующейся критичности, не требующий внешнего воздействия. В своем изложении мы исходим из простейшей модели формирования лавины при движении песка по наклонной плоскости (модель *sandpile*). Найдены стационарные значения скорости течения песка и наклона его поверхности. С учетом флуктуаций указанных величин построена фазовая диаграмма, определяющая области формирования лавины, равновесное и смешанное состояния. Последнее отвечает прерывистому режиму самоорганизующейся критичности и определяется интенсивностями флуктуаций вертикальной компоненты скорости и наклона поверхности. Адекватное представление самоподобного поведения системы требует использования дробной обратной связи, существенно модифицирующей систему Лоренца. Для представления распределения по размерам лавин использована псевдотермодинамическая картина Эдвардса, в рамках которой самоорганизация приводит к отрицательной температуре. При этом используется дробная система Лоренца, где роль параметра порядка играет размер лавины, сопряженное поле сводится к неаддитивной сложности (*complexity*), а несохраняющаяся энергия является управляющим параметром. Найдена фазовая диаграмма, определяющая различные области поведения системы в зависимости от интенсивностей шумов указанных величин. В результате оказывается, что самоподобное распределение, присущее самоорганизующейся критичности, обеспечивается флуктуациями энергии движущихся песчинок. Исследование стохастической системы показывает, что это распределение представляет, с одной стороны, решение нелинейного уравнения Фоккера—Планка, описывающего поведение неаддитивной системы, а с другой — отвечает дробному уравнению Фоккера—Планка для полетов Леви. Сопоставление решений указанных уравнений приводит к установлению связей между показателем распределения по размерам лавин, фрак-

тальной размерностью фазового пространства, характеристическим показателем мультипликативного шума, числом уравнений, необходимых для представления самосогласованного поведения системы в режиме самоорганизующейся критичности, динамическим показателем и параметром неаддитивности Цаллиса.

В разделе 1.3 развивается аксиоматический подход, позволяющий представить самоорганизацию неравновесной системы как при термодинамическом, так и кинетическом превращениях. В первом случае система параметризуется внутренним параметром типа плотности сохраняющейся величины, сопряженным полем, сводящимся к дивергенции соответствующего потока, и управляющим параметром, внешнее значение которого задает стационарное состояние. Показано, что определенные таким образом сопряженное поле и управляющий параметр отвечают энтропии и внутренней энергии, и самоорганизация приводит к отрицательной температуре. При описании кинетического превращения роль параметра порядка играет поток, а сопряженное поле и управляющий параметр сводятся к градиентам химического потенциала и температуры. Увеличение последнего приводит к уменьшению энтропии, означая упорядочение системы в потоковом состоянии. Показано, что оба указанных подхода следуют из единой полевой схемы, которой отвечает наиболее простой выбор лагранжиана и диссипативной функции.

Раздел 1.4 посвящен суперсимметричному исследованию самоорганизующейся системы, лагранжиан которой представлен полями параметра порядка, амплитуды флуктуаций сопряженного поля и пары грассманово сопряженных полей, определяющих энтропию. В рамках самосогласованного подхода найдены макро- и микроскопические значения восприимчивости, а также параметры памяти и неэргодичности в зависимости от интенсивностей термического и замороженного беспорядков. Построена фазовая диаграмма, определяющая области существования упорядоченной, неупорядоченной, эргодической и неэргодической фаз. Найдено критическое значение эффективного взаимодействия, ограничивающее область самоорганизующейся критичности.

1.1 Синергетика фазового перехода

В последние годы заметно возрос интерес к кинетике фазовых переходов (см. обзоры [1, 2] и имеющиеся там ссылки). Основной предпосылкой, позволившей существенно продвинуться в описании пространственно—временной эволюции системы в ходе фазового перехода, является скейлинговая гипотеза, впервые использованная в критической области [3]. Однако если в последней масштаб изменения координаты ограничивается корреляционной длиной $\xi \rightarrow \infty$, то при описании эволюции новой фазы ее роль играет либо характерный размер L антифазного домена — при описании "лифшицевской пены" [4], либо критический размер R_c выделений — в картине коалесценции [5]. В рамках гипотезы масштабной инвариантности структурный фактор $S(\mathbf{r}, t)$ (в случае коалесценции — вероятность распределения $P(R, t)$ по размерам выделений R) представляется универсальным образом в зависимости от координаты \mathbf{r} (радиуса выделений R), измеренной в соответствующих масштабах. Условие масштабной инвариантности позволяет фиксировать временную зависимость величин $L(t), R_c(t)$ и установить асимптотики коррелятора $S(r/L(t))$ при $r \ll L$ и $r \gg L$ [1, 2] (в задаче Лифшица-Слезова [5] удастся найти не только асимптотики распределения $P(R/R_c(t))$, но и его аналитический вид). Оказалось, что вид зависимостей $S(r/L), P(R/R_c)$ не чувствителен к выбору микроскопических параметров (типа потенциала межатомного взаимодействия), а целиком определяется условием сохранения параметра порядка и размерностями d, n физического пространства и пространства параметра порядка (для моделей Изинга и Гейзенберга $n = 1$ и $n = \infty$ соответственно). Например, коротковолновая асимптотика ($kL \gg 1$) пространственного фурье-образа коррелятора $S(\mathbf{r}, t)$ имеет в случае сохраняющегося параметра порядка вид обобщенного закона Порода $S(\mathbf{k}, t) \sim L^{-n} k^{-(d+n)}$, характеризующего наличие резких границ раздела [1]. При $t \rightarrow \infty$ размер домена определяется соотношением $L^{c+d-1} \sim t$, где $c = 2$ для сохраняющегося параметра порядка и $c = 0$ для несохраняющегося, а критический радиус коагулирующей системы $R_c^d \sim t$ [1, 2].

Приведенные данные показывают, что известная универсальность феноменологической картины фазового перехода присуща не

только термодинамическому поведению, но и кинетическому (точнее, динамическому). В работе [6] было обнаружено еще одно проявление универсальности кинетической картины фазового перехода. Авторы [6] исходили из того факта, что в ходе фазового перехода величина $\eta(t)$ параметра порядка может изменяться неавтономным образом. Так, если оказываются существенными стрикционные эффекты, то упорядочение среды сопровождается появлением поля деформации, которая, как известно, играет роль вторичного эффекта, связанного с появлением самосогласованного поля, сопряженного величине параметра порядка.¹⁾ Обычно принимается, что оба указанных поля успевают следовать за изменением параметра порядка. Выполнение этого условия предполагает, что время релаксации τ_h величины $h(t)$ сопряженного поля намного меньше соответствующего значения τ_η для параметра порядка ($\tau_h \ll \tau_\eta$). Тогда нетрудно показать, что стрикционный эффект сводится к появлению дальнедействующего поля, перенормирующего величину термодинамического потенциала. При определенных условиях эта перенормировка сказывается таким образом, что происходит замедление (и даже остановка) течения фазового перехода [6]. Это обстоятельство можно трактовать как проявление своеобразного принципа Ле-Шателье, отражающего наличие отрицательной обратной связи между величинами параметра порядка и сопряженного поля.

Указанная выше универсальность кинетической картины фазового перехода проявляется, если предположить, что поведение системы определяется не только параметром порядка, но и другой термодинамической степенью свободы S , характерное время релаксации τ_S которой соизмеримо с соответствующим значением τ_η для параметра порядка. В этой связи в работе [6] предложен еще один механизм проявления принципа Ле-Шателье — за счет нагревания области, прилегающей к выделению фазы, образованному в результате резкого охлаждения системы ниже точки фазового перехода первого рода. При этом роль управляющего параметра S играет локальное значение температуры в области выделений фазы. На основе

¹⁾ Если параметр порядка отвечает спонтанной намагниченности, то сопряженное поле сводится к магнитной индукции. Для упорядочивающихся твердых растворов, где параметр порядка определяет дальний порядок в чередовании атомов разного сорта, сопряженное поле равно разности химпотенциалов компонент.

эвристических соображений в [6] получена система нелинейных дифференциальных уравнений для определения зависимостей $\eta(t)$, $S(t)$. Исследование их фазового портрета $\eta(S)$ и вида самих временных зависимостей $\eta(t)$, $S(t)$ показывает, что все фазовые траектории разбиваются на два участка. На первом величины η , S сравнительно быстро эволюционируют со временем, и он не сказывается существенным образом на кинетическом поведении системы. Оно представляется медленным изменением величин $\eta(t)$, $S(t)$ на втором участке, положение которого определяется близостью к сепаратрисе и образно обозначено в [6] как *русло большой реки*. Таким образом, в представлении фазового портрета универсальность кинетики фазового перехода проявляется как наличие сепаратрисной области (в пределе, линии), положение которой не зависит от микроскопических деталей поведения системы.

Обращает на себя внимание то обстоятельство, что аргументация [6] основана на специфических модельных соображениях, хотя выводы носят более общий характер. В этой связи в работе [7] было проведено рассмотрение, не ограниченное модельными соображениями. Его изложению посвящен раздел 1.1. Исходной посылкой нашего подхода является синергетическая концепция, в рамках которой фазовый переход реализуется в результате взаимно согласованного поведения трех степеней свободы: параметра порядка $\eta(t)$, сопряженного поля $h(t)$ и управляющего параметра $S(t)$ [8]. Как уже отмечалось, первая пара указанных переменных связана отрицательной обратной связью с третьим. Основой синергетического подхода является то обстоятельство, что положительная обратная связь другой пары $\eta(t)$, $S(t)$ с $h(t)$ приводит к самоорганизации системы, которая и представляет фазовый переход.

С математической точки зрения наиболее простая схема описания самоорганизующейся системы представляется известной схемой Лоренца [9]. Она представляет три дифференциальных уравнения, выражающие скорости $\dot{\eta}$, \dot{h} , \dot{S} изменения величин η , h , S через их значения. Характерная особенность этих выражений состоит в том, что все они содержат диссипативные слагаемые, величины которых обратно пропорциональны соответствующим временам релаксации τ_η , τ_h , τ_S . Обычно при исследовании термодинамики фазового перехода принимается адиабатическое приближение $\tau_h, \tau_S \ll \tau_\eta$,

означающее, что в ходе своей эволюции сопряженное поле $h(t)$ и управляющий параметр $S(t)$ изменяются настолько быстро, что успевают следовать за медленным изменением параметра порядка $\eta(t)$ [8]. При этом эволюция системы описывается уравнением Ландау—Халатникова, в котором роль свободной энергии играет синергетический потенциал. В результате синергетический подход сводится к феноменологической схеме фазового перехода. Отличие состоит в том, что в синергетических системах процесс самоорганизации происходит в области больших значений управляющего параметра S , а в термодинамических — в низкотемпературной. Таким образом, величина S не сводится к температуре. Кроме того, если для термодинамических систем температура среды совпадает с ее значением для термостата, то для синергетических отрицательная обратная связь между параметром порядка и сопряженным полем, отражающая принцип Ле-Шателье, понижает стационарное значение управляющего параметра по сравнению с его величиной, фиксируемой внешним воздействием.

Кинетические особенности фазового перехода, найденные на основе модельных соображений [6], легко объясняются в рамках синергетического подхода, если ослабить стандартный принцип соподчинения [8], принимая, что наибольшим временем релаксации обладает не одна, а две гидродинамические степени свободы. В результате фазовый переход представляется системой двух дифференциальных уравнений, и задача сводится к исследованию возможных сценариев превращений второго (подраздел 1.1.1) и первого (подраздел 1.1.2) родов. Существенным преимуществом синергетического подхода является то обстоятельство, что он позволяет, не обращаясь к узким модельным соображениям, учесть действие обобщенного принципа Ле-Шателье. В этом смысле полученные ниже результаты носят достаточно общий характер. Что касается использования системы Лоренца, то известно, что она выделена в синергетике как одна из простейших схем, позволяющих учесть эффект самоорганизации. В частности, гамильтониан, воспроизводящий недиссипативные слагаемые уравнений Лоренца, имеет простейший вид фрелиховского типа (см. раздел 1.4). Что касается диссипативных вкладов, то они представляются в рамках полевой схемы (раздел 1.3) удлинением производных по времени, определяющих диссипативную функцию.

1.1.1 Переход второго рода

Рассмотрим случай несохраняющегося параметра порядка, для которого можно пренебречь координатной зависимостью и система Лоренца принимает вид [8]

$$\tau_\eta \dot{\eta} = -\eta + A_\eta h, \quad (1.1)$$

$$\tau_h \dot{h} = -h + A_h \eta S, \quad (1.2)$$

$$\tau_S \dot{S} = (S_e - S) - A_S \eta h. \quad (1.3)$$

Здесь точка означает дифференцирование по времени t ; $\tau_\eta, \tau_h, \tau_S$ — времена релаксации параметра порядка η , сопряженного поля h и управляющего параметра S ; A_η, A_h, A_S — положительные константы связи; S_e — параметр внешнего воздействия. Характерная особенность системы (1.1) — (1.3) состоит в линейности уравнения (1.1) и нелинейности (1.2), (1.3). Первые слагаемые описывают релаксацию к стационарным значениям $\eta = 0, h = 0, S = S_e$, вторые — связь между различными гидродинамическими модами. Отрицательный знак перед нелинейным слагаемым (1.3) отражает действие отмеченного выше принципа Ле-Шателье, плюс перед ηS в (1.2) — положительную обратную связь между параметром порядка и управляющим параметром, которая является причиной самоорганизации.

При выполнении соотношений $\tau_h, \tau_S \ll \tau_\eta$ можно пренебречь флуктуациями величин $h(t) \approx h(\eta(t)), S(t) \approx S(\eta(t))$, полагая в (1.2), (1.3) $\dot{h} = 0, \dot{S} = 0$. В результате получаем равенства:

$$h = A_h S_e \eta (1 + \eta^2 / \eta_m^2)^{-1}, \quad (1.4)$$

$$S = S_e (1 + \eta^2 / \eta_m^2)^{-1}; \quad (1.5)$$

$$\eta_m^{-2} \equiv A_S A_h, \quad (1.6)$$

выражающие сопряженное поле и управляющий параметр через параметр порядка. При $\eta \ll \eta_m$ соотношение (1.4) носит линейный вид, характеризуемый восприимчивостью $\chi = (A_h S_e)^{-1}$. С возрастанием параметра порядка до значения $\eta = \eta_m$ зависимость $h(\eta)$ выходит на насыщение, а при $\eta > \eta_m$ проявляет спадающий характер, который

отвечает отрицательной восприимчивости $\chi \equiv d\eta/dh$ и не имеет физического смысла. Отсюда следует, что постоянная η_m , определенная равенством (1.6), имеет смысл максимального значения параметра порядка. Что касается равенства (1.5), то оно описывает спадание управляющего параметра от максимального значения S_e при $\eta = 0$ до минимальной величины $S_e/2$ при $\eta = \eta_m$. Очевидно, спадающий характер зависимости $S(\eta)$ является проявлением принципа Ле-Шателье.

Подставляя (1.4) в (1.1), приходим к уравнению типа Ландау-Халатникова

$$\tau_\eta \dot{\eta} = -\partial V/\partial \eta, \quad (1.7)$$

где синергетический потенциал имеет вид

$$V = \frac{\eta^2}{2} \left\{ 1 - \frac{S_e}{S_c} \left(\frac{\eta}{\eta_m} \right)^{-2} \ln \left[1 + \left(\frac{\eta}{\eta_m} \right)^2 \right] \right\}, \quad (1.8)$$

$$S_c \equiv (A_\eta A_h)^{-1}. \quad (1.9)$$

Если параметр внешнего воздействия S_e меньше критического значения S_c , определенного равенством (1.9), то зависимость $V(\eta)$ имеет монотонно возрастающий вид с минимумом в точке $\eta_0 = 0$ (см. рис. 1.1а). При этом система не упорядочивается. В закритической области $S_e > S_c$ синергетический потенциал приобретает минимум при ненулевом значении параметра порядка ²⁾

$$\eta_0 = \eta_m (s - 1)^{1/2}, \quad s \equiv S_e/S_c. \quad (1.10)$$

Как видно из рис. 1.1б, стационарное значение параметра порядка η_0 возрастает корневым образом при закритическом значении параметра внешнего воздействия $s > 1$. При резком переходе системы в область $s > 1$ она за время

$$\tau = \tau_\eta (s - 1)^{-1} \quad (1.11)$$

приобретает стационарное значение параметра порядка (1.10). При этом зависимость $\eta(t)$ имеет обычный дебаевский вид

$$\eta = \eta_0 (1 - e^{-t/\tau}). \quad (1.12)$$

²⁾Поскольку величина η_0 ограничена условием $\eta_0 \leq \eta_m$, то параметр внешнего воздействия s ограничен сверху значением $s_m = 2$.

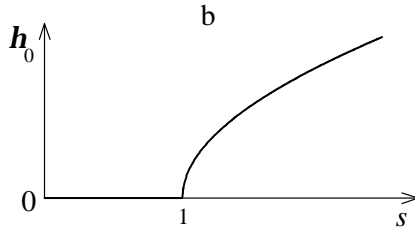
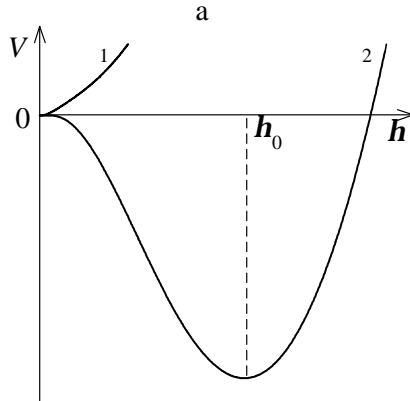


Рисунок 1.1: а — зависимость синергетического потенциала от параметра порядка для фазового перехода второго рода при различных значениях параметра накачки S_e (кривая 1 отвечает $S_e < S_c$, кривая 2 — $S_e > S_c$); б — зависимость стационарного значения параметра порядка от $s \equiv S_e/S_c$

Случай $\tau_h \ll \tau_\eta, \tau_S$.

Как и выше, в (1.2) можно положить $\dot{h} = 0$, что дает связь

$$h = A_h S \eta. \quad (1.13)$$

Учитывая ее в оставшихся уравнениях (1.1), (1.3) и используя масштабы η_m, S_c, τ_η для измерения параметра порядка, управляющего параметра и времени, приходим к системе

$$\dot{\eta} = -\eta(1 - S), \quad (1.14)$$

$$\dot{S} = \tau^{-1} [s - S(1 + \eta^2)]. \quad (1.15)$$

Ее поведение задается параметрами

$$s \equiv S_e/S_c, \quad \tau \equiv \tau_S/\tau_\eta, \quad (1.16)$$

первый из которых определяет степень неравновесности системы, второй — соотношение характерных времен релаксации управляющего параметра и параметра порядка. В пределе $\tau \ll 1$ правая часть в (1.15) приобретает настолько большие значения, что слева можно положить $\dot{S} = 0$, и после подстановки полученной зависимости $S(\eta)$ в (1.14) мы приходим к рассмотренному выше адиабатическому приближению, представляемому равенствами (1.4), (1.5), (1.8).

В общем случае стандартный анализ [10] системы (1.14), (1.15) показывает, что ее фазовый портрет характеризуется наличием двух особых точек $D(S_e, 0), O(S_c, \eta_0)$ с координатами $S = S_e, \eta = 0$ и $S = S_c, \eta = \eta_0$ соответственно, где η_0 определено равенством (1.10). Этим точкам отвечают показатели Ляпунова:

$$\lambda_D = \frac{1}{2} [(s-1) - \tau^{-1}] \left\{ 1 \pm \sqrt{1 + \frac{4\tau^{-1}(s-1)}{[(s-1) - \tau^{-1}]^2}} \right\}, \quad (1.17)$$

$$\lambda_O = -\frac{s}{2\tau} \left[1 \pm \sqrt{1 - 8\tau \frac{s-1}{s^2}} \right]. \quad (1.18)$$

Отсюда видно, что в предкритической области ($s < 1$) точка D представляет устойчивый узел, а точка O не реализуется. Это означает,

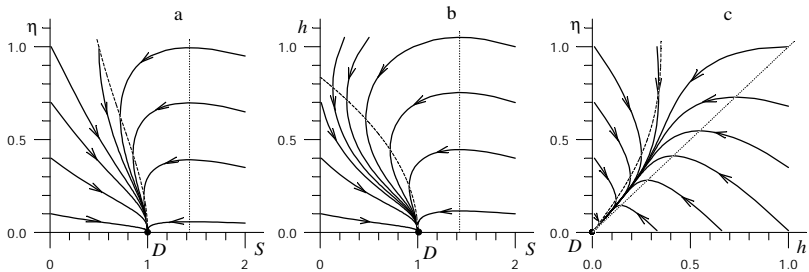


Рисунок 1.2 — Фазовые портреты неупорядоченной фазы ($S_e = 0.7S_c$) для фазового перехода второго рода: а — $\tau_h \ll \tau_\eta = \tau_S$; б — $\tau_\eta \ll \tau_h = \tau_S$; в — $\tau_S \ll \tau_h = \tau_\eta$. Примечание — здесь и на всех последующих рисунках штриховая линия указывает точки, в которых фазовые траектории имеют вертикальную касательную, пунктирная — горизонтальную

что с течением времени система эволюционирует в отвечающее точке D стационарное неупорядоченное состояние согласно фазовому портрету, приведенному на рис. 1.2а. Рост параметра $\tau = \tau_S/\tau_\eta$ приводит к закручиванию траекторий вокруг точки D , т.е. с ростом инерционности изменения управляющего параметра по сравнению с параметром порядка проявляется тенденция к возникновению колебательного режима.

Как видно из фазового портрета, приведенного на рис. 1.3, эта тенденция реализуется в полной мере при переходе в закритическую область $s > 1$, где точка D трансформируется в седло и появляется дополнительная точка O . При значениях параметра τ , ограниченных сверху величиной

$$\tau_c = \frac{s^2}{8(s-1)}, \quad (1.19)$$

последняя представляет устойчивый узел, а с его ростом до значений $\tau > \tau_c$ — устойчивый фокус.

Таким образом, в закритической области $1 < s \leq 2$ при $\tau_\eta \ll \tau_S$ возникает колебательный режим (см. рис. 1.3с), характеризуемый частотой

$$\omega = s [8\tau_S^{-2}(s-1) - 1]^{1/2} (2\tau_S)^{-1} \quad (1.20)$$

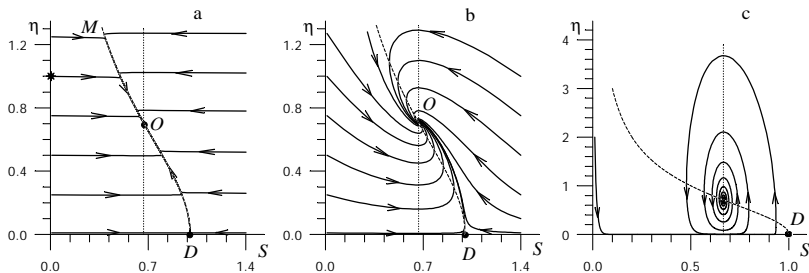


Рисунок 1.3 — Фазовые портреты упорядоченной фазы ($S_e = 1.5S_c$) для фазового перехода второго рода: а — $\tau_h \ll \tau_\eta = 10^2\tau_S$; б — $\tau_h \ll \tau_\eta = \tau_S$; в — $\tau_h \ll \tau_S = 10^2\tau_\eta$

и коэффициентом затухания

$$\alpha = s(2\tau_S)^{-1}. \quad (1.21)$$

С ростом параметра неравновесности в интервале $1 < s < 2$ величины ω , α возрастают, а критическое отношение времен релаксации (1.19) спадает. Иными словами, неравновесность системы способствует, как и следовало, появлению затухающих колебаний. Однако, как видно из рис. 1.3, в наибольшей степени проявлению колебательного режима способствует рост параметра $\tau = \tau_S/\tau_\eta \gg 1$.

Обратный предел $\tau_S \ll \tau_\eta$ отвечает адиабатическому приближению, представляющему стандартную картину фазового перехода. Согласно рис. 1.3 уменьшение параметра $\tau \rightarrow 0$ приводит к выделению на фазовом портрете системы участка MOD , к которому сбегают со временем все траектории. Как видно из временных зависимостей, приведенных на рис. 1.4а, конфигуративная точка быстро движется по траектории, расположенной за пределами участка MOD , а с попаданием на него существенно замедляется, причем эффект замедления сказывается тем сильнее, чем меньше параметр неадиабатичности τ . Очевидно, указанный участок MOD отвечает притягивающему множеству, обозначенному в [6] как *русло большой реки*. Универсальность кинетической картины фазового перехода проявляется в том, что независимо от начальных условий при $\tau \rightarrow 0$ система быстро достигает участка MOD , положение которого

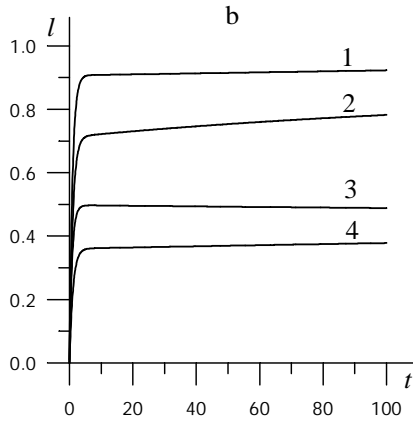
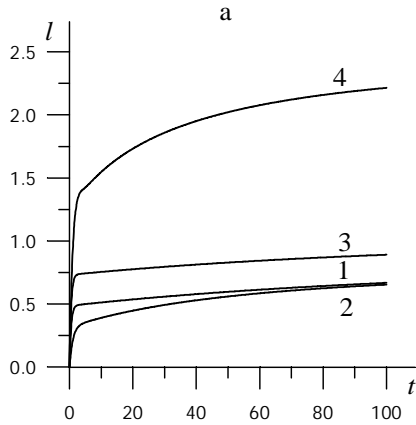


Рисунок 1.4 — Временная зависимость пути l , пройденного конфигуративной точкой по фазовой траектории: а — фазовый переход второго рода (кривая 1 отвечает фазовому портрету на рис. 1.3а, кривая 2 — рис. 1.5а, кривая 3 — рис. 1.6а и кривая 4 — рис. 1.6с); б — фазовый переход первого рода (кривая 1 отвечает фазовому портрету на рис. 1.9а, кривая 2 — рис. 1.10а, кривая 3 — рис. 1.11а и кривая 4 — рис. 1.11с). Начало отсчета l отмечено крестиком на соответствующих рисунках

не зависит от микроскопических деталей ее строения, и затем медленно эволюционирует по этой универсальной траектории.

Случай $\tau_\eta \ll \tau_h, \tau_S$.

Полагая в (1.1) $\dot{\eta} = 0$, находим связь

$$\eta = A_\eta h, \quad (1.22)$$

подстановка которой в (1.2), (1.3) дает систему

$$\dot{h} = -h(1 - S), \quad (1.23)$$

$$\dot{S} = \tau^{-1} [s - (S + h^2)], \quad (1.24)$$

где величины h, S, t измерены в единицах h_m, S_c, τ_h и введены характерные параметры:

$$\tau \equiv \tau_S / \tau_h, \quad h_m \equiv \eta_m / A_\eta = A_\eta^{-1} (A_h A_S)^{-1/2}. \quad (1.25)$$

Подобно первому случаю фазовый портрет определяется наличием особых точек $D(S_e, 0), O(S_c, h_0)$, где величина

$$h_0 = h_m (s - 1)^{1/2}, \quad (1.26)$$

определяет стационарное значение сопряженного поля. Показатели Ляпунова имеют вид

$$\lambda_D = \frac{1}{2} [(s-1) - \tau^{-1}] \left\{ 1 \pm \sqrt{1 + 4\tau^{-1} \frac{s-1}{[(s-1) - \tau^{-1}]^2}} \right\}, \quad (1.27)$$

$$\lambda_O = -\frac{1}{2\tau} \left[1 \pm \sqrt{1 - 8\tau(s-1)} \right]. \quad (1.28)$$

Как и выше, точка D при $s < 1$ представляет притягивающий узел, а при $s > 1$ — седло. Точка O реализуется только в упорядоченной области $s > 1$, где она является притягивающим узлом при малых значениях параметра τ и устойчивым фокусом, если величина τ превышает критическое значение

$$\tau_c = \frac{1}{8(s-1)}. \quad (1.29)$$

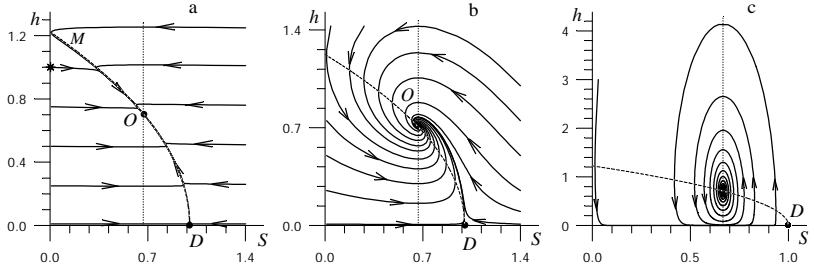


Рисунок 1.5 — Фазовые портреты упорядоченной фазы ($S_e = 1.5S_c$) для фазового перехода второго рода: а — $\tau_\eta \ll \tau_h = 10^2 \tau_S$; б — $\tau_\eta \ll \tau_h = \tau_S$; в — $\tau_\eta \ll \tau_S = 10^2 \tau_h$

Соответствующие значения для частоты колебаний и декремента затухания имеют вид

$$\omega = \frac{1}{2} [8\tau(s-1) - 1]^{1/2} \tau_S^{-1}, \quad (1.30)$$

$$\alpha = (2\tau_S)^{-1}. \quad (1.31)$$

С ростом параметра неравновесности s величина τ_c уменьшается, частота ω увеличивается, а α остается неизменным.

Проведенный анализ и вид фазовых портретов на рис. 1.5 показывают, что, как и в предыдущем случае, при больших значениях параметра τ системе присущ режим затухающих колебаний (рис. 1.5в), а с уменьшением величины τ до значений $\tau \ll 1$ достигается диссипативный режим релаксации (рис. 1.5а). Подобным же образом в адиабатическом пределе $\tau \rightarrow 0$ проявляется универсальность кинетического поведения, состоящая в выделении участка MOD на рис. 1.5а, на котором система медленно эволюционирует к стационарной точке O .

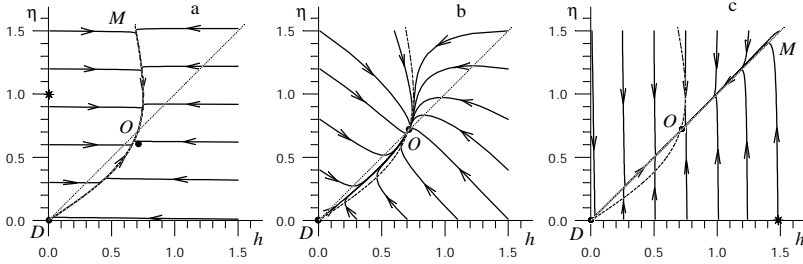


Рисунок 1.6 — Фазовые портреты упорядоченной фазы ($S_e = 1.5S_c$) для фазового перехода второго рода: а — $\tau_S \ll \tau_\eta = 10^2 \tau_h$; б — $\tau_S \ll \tau_\eta = \tau_h$; в — $\tau_S \ll \tau_h = 10^2 \tau_\eta$

Случай $\tau_S \ll \tau_\eta, \tau_h$.

Полагая в (1.3) $\dot{S} = 0$, находим

$$S = S_e - A_S \eta h, \quad (1.32)$$

и уравнения (1.1), (1.2) принимают вид

$$\dot{\eta} = -\eta + h, \quad (1.33)$$

$$\dot{h} = \tau^{-1} [s\eta - h(1 + \eta^2)], \quad (1.34)$$

где величины η, h, t измерены в единицах η_m, h_m, τ_η и введено отношение времен релаксации

$$\tau \equiv \tau_h / \tau_\eta. \quad (1.35)$$

Фазовый портрет системы имеет особые точки $D(0, 0)$ и $O(h_m \sqrt{s-1}, \eta_m \sqrt{s-1})$ (см. рис. 1.6), вторая из которых реализуется только в упорядоченной области $s > 1$. Соответствующие

показатели Ляпунова имеют вид

$$\lambda_D = -\frac{1}{2}(1+\tau^{-1}) \left[1 \pm \sqrt{1+4\tau^{-1}(1+\tau^{-1})^{-2}(s-1)} \right], \quad (1.36)$$

$$\lambda_O = -\frac{1+\tau^{-1}s}{2} \left[1 \pm \sqrt{1-8\tau \frac{s-1}{(s+\tau)^2}} \right]. \quad (1.37)$$

При $s < 1$ точка D представляет устойчивый узел, а с переходом в закритическую область $s > 1$ трансформируется в седло. Точка O , характеризующая упорядоченную фазу, при значениях параметра τ , принадлежащих интервалу (τ_-, τ_+) , где

$$\tau_{\pm} = (3s-4) \pm \sqrt{8(s-1)(s-2)}, \quad (1.38)$$

представляет притягивающий фокус, а вне его — притягивающий узел. Характерные величины частоты

$$\omega = \frac{1}{2} [8\tau(s-1) - (\tau+s)^2]^{1/2} \tau_h^{-1} \quad (1.39)$$

и коэффициента затухания

$$\alpha = (\tau+s) (2\tau_h)^{-1} \quad (1.40)$$

соизмеримы при всех значениях s, τ . Поэтому в отличие от рассмотренных выше случаев здесь колебательный режим практически не проявляется.

Согласно фазовым портретам, показанным на рис. 1.6, универсальность кинетического поведения системы проявляется как при $\tau_h \ll \tau_\eta$, так и при $\tau_h \gg \tau_\eta$. В первом случае выход на универсальный участок происходит за счет быстрого изменения сопряженного поля $h(t)$ при практически неизменном параметре порядка $\eta(t) \approx \text{const}$ (рис. 1.6а), а во втором наблюдается обратная картина — величина параметра порядка изменяется очень быстро, а сопряженное поле почти не меняется (рис. 1.6с). В промежуточной области $\tau_\eta \sim \tau_h$ универсальность проявляется только при малых начальных значениях сопряженного поля $h(0)$ и параметра порядка $\eta(0)$: $h(0) < h_0, \eta(0) < \eta_0$ (рис. 1.6б). В отличие от ранее рассмотренных случаев универсальный участок фазовых траекторий имеет не спадающий, а нарастающий характер.

1.1.2 Переход первого рода

Изложенная картина полагает, что время релаксации τ_η постоянно в ходе превращения, хотя в действительности его величина может нарастать с параметром порядка η . Покажем, что такая дисперсия приводит к трансформации фазового превращения из второго в первый род. С этой целью используем простейшую зависимость

$$\frac{1}{\tau_\eta} = \frac{1}{\tau_0} \left(1 + \frac{\kappa}{1 + (\eta/\eta_\tau)^2} \right), \quad (1.41)$$

характеризуемую положительными константами $\tau_0, \kappa, \eta_\tau$. Тогда в рамках адиабатического приближения $\tau_h, \tau_S \ll \tau_0$ система Лоренца (1.1) — (1.3) сводится к уравнению (1.7), в котором произведено переобозначение τ_η на τ_0 , а синергетический потенциал (1.8) принимает вид

$$V = \frac{\eta^2}{2} \left\{ 1 - \frac{S_e}{S_{c0}} \left(\frac{\eta}{\eta_m} \right)^{-2} \ln \left[1 + \left(\frac{\eta}{\eta_m} \right)^2 \right] \right\} + \frac{\kappa \eta_\tau^2}{2} \ln \left[1 + \left(\frac{\eta}{\eta_\tau} \right)^2 \right], \quad (1.42)$$

где $S_{c0} \equiv (A_\eta A_h)^{-1}$. Согласно рис. 1.7а при малых значениях S_e зависимость $V(\eta)$ имеет монотонно возрастающий вид, показанный кривой 1 с минимумом в точке $\eta = 0$. При значении

$$S_c^0 = S_{c0} \left[1 + \frac{\eta_\tau^2}{\eta_m^2} (\kappa - 1) + 2 \frac{\eta_\tau}{\eta_m} \sqrt{\kappa \left(1 - \frac{\eta_\tau^2}{\eta_m^2} \right)} \right] \quad (1.43)$$

появляется плато (кривая 2), которое при $S_e > S_c^0$ трансформируется в минимум, отвечающий значению параметра порядка $\eta_0 \neq 0$, и максимум, разделяющий минимумы упорядоченной и неупорядоченной фаз (кривая 3). С дальнейшим ростом параметра неравновесности S_e минимум упорядоченной фазы углубляется, а высота межфазного барьера падает, принимая нулевое значение при критическом значении

$$S_c = S_{c0}(1 + \kappa). \quad (1.44)$$

При $S_e \geq S_c$ зависимость $V(\eta)$ имеет тот же вид, что и для фазового перехода второго рода (кривая 4 на рис. 1.7а). Стационарные значе-

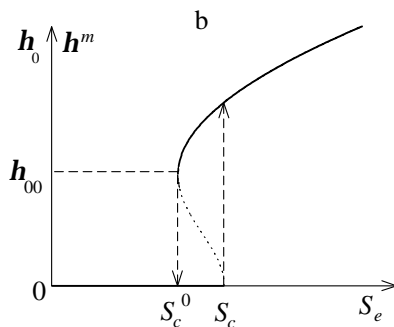
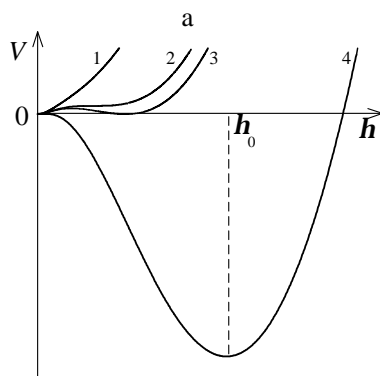


Рисунок 1.7: а — вид зависимости синергетического потенциала от параметра порядка при различных значениях S_e : 1 — $S_e < S_c^0$; 2 — $S_e = S_c^0$; 3 — $S_c^0 < S_e < S_c$; 4 — $S_e \geq S_c$; б — зависимость стационарных значений параметра порядка от параметра накачки S_e (сплошная кривая соответствует устойчивому состоянию η_0 , пунктирная — неустойчивому η^m)

ния параметра порядка имеют вид (рис. 1.7b)

$$\eta_0^m = \eta_{00} \left\{ 1 \mp \left[1 + \left(\frac{\eta_m \eta_\tau}{\eta_{00}^2} \right)^2 \frac{S_e - S_c}{S_{c0}} \right]^{1/2} \right\}^{1/2}, \quad (1.45)$$

$$\eta_{00}^2 \equiv \frac{1}{2} \left[\left(\frac{S_e}{S_{c0}} - 1 \right) \eta_m^2 - (1 + \kappa) \eta_\tau^2 \right]. \quad (1.46)$$

Верхний знак отвечает неустойчивому состоянию η^m , при котором синергетический потенциал имеет максимум, нижний — устойчивому η_0 . Как видно из рис. 1.7b, при медленном увеличении параметра неравновесности в точке $S_e = S_c$ происходит скачок параметра η_0 от нуля до $\sqrt{2}\eta_{00}$, а затем его значение возрастает плавно. При обратном спадании S_e от больших значений параметр порядка η_0 плавно уменьшается до точки $S_e = S_c^0$, $\eta_0 = \eta_{00}$, а затем скачком принимает нулевое значение. Данный гистерезис обусловлен энергетическим барьером, присущим переходу первого рода, и проявляется при величинах параметра $\alpha \equiv \eta_\tau / \eta_m$ меньше значения 1. С увеличением скорости изменения параметра неравновесности петля гистерезиса сужается.

Измеряя величины η , h , S в единицах η_m , h_m , S_c (см.(1.6), (1.25), (1.9)), рассмотрим различные предельные соотношения времен релаксации τ_0 , τ_h , τ_S . При этом в исходном уравнении (1.1) эффективное время релаксации τ_η задается равенством (1.41).

Случай $\tau_h \ll \tau_0, \tau_S$.

Полагая в (1.2) $\dot{h} = 0$, находим связь (1.13) в виде $h = S\eta$. Ее подстановка в уравнение (1.1) приводит к выражению (время измерено в единицах τ_0)

$$\dot{\eta} = -\eta \left[(1 - S) + \kappa (1 + \eta^2 / \alpha^2)^{-1} \right], \quad (1.47)$$

отличающемся от (1.14) наличием последнего слагаемого. Второе уравнение, следующее из (1.3), имеет тот же вид (1.15), что и выше.

Фазовый портрет системы (1.47), (1.15) имеет три особые точки $D(s, 0)$, $O(S_-, \eta_-)$, $S(S_+, \eta_+)$, где характерные значения S_\pm, η_\pm опре-

деляются равенствами:

$$S_{\pm} = \frac{(1 + \beta^2) \pm \sqrt{(1 + \beta^2)^2 - s(1 - \alpha^2)}}{1 - \alpha^2}, \quad (1.48)$$

$$\eta_{\pm} = \sqrt{(s - S_{\pm})/S_{\pm}}; \quad (1.49)$$

$$\beta^2 \equiv \frac{1}{2} [(s-1) - \alpha^2(1+\kappa)], \quad \alpha \equiv \eta_{\tau}/\eta_m, \quad s \equiv S_e/S_{c0}. \quad (1.50)$$

Здесь введен параметр $\beta \equiv \eta_{00}/\eta_m$, в котором величина η_{00} означает характерное значение параметра порядка (1.46). Точке D отвечает показатель Ляпунова, отличающийся от выражения (1.17) заменой разности $s - 1$ на $s - s_c$, где в соответствии с (1.44) величина $s_c = 1 + \kappa$ определяет точку спинодали. Поэтому, как и для фазового перехода второго рода, при $s < s_c$ точка D представляет устойчивый узел, а при $s > s_c$ — седло. Показатели Ляпунова точек $O(S_-, \eta_-)$, $S(S_+, \eta_+)$ выражаются через их координаты (1.48), (1.49) равенствами:

$$\begin{aligned} \lambda_{\pm} &= \lambda_0 \left(1 \pm \sqrt{1 + \Delta} \right), \\ \lambda_0 &= \frac{s - S_{\pm}}{\kappa \alpha^2 S_{\pm}} (S_{\pm} - 1)^2 - \frac{s}{2\tau S_{\pm}}, \\ \lambda_0^2 \Delta &= \frac{2}{\tau} (s - S_{\pm}) \left[\frac{s(1 - S_{\pm})^2}{\alpha^2 \kappa S_{\pm}^2} - 1 \right]. \end{aligned} \quad (1.51)$$

В интервале $S_c^0 < S < S_c$ реализации фазового перехода первого рода точка S является седлом, а O — притягивающим узлом или фокусом.

Приведенные данные показывают, что с ростом параметра неравновесности S_e фазовый портрет системы изменяется следующим образом (см. рис. 1.8). При $S_e < S_c^0$, когда зависимость (1.42) имеет монотонно возрастающий вид, точки S, O не реализуются, а D представляет устойчивый узел, отвечающий неупорядоченной фазе. При этом фазовый портрет имеет вид, присущий фазовому переходу второго рода (см. рис. 1.2а). С превышением характерного значения (1.43) в системе происходит бифуркация, состоящая в появлении

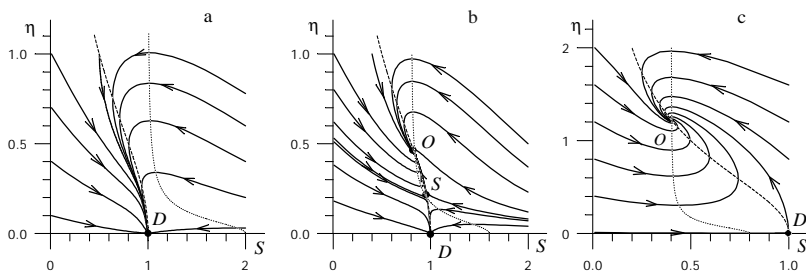


Рисунок 1.8 — Изменение вида фазовых портретов с температурой для фазового перехода первого рода ($\kappa = 1$, $\alpha = 0.1$, $\tau_h \ll \tau_\eta = \tau_S$): а — $S_e = S_{c0}$; б — $S_e = 1.25S_{c0}$; в — $S_e = 2.5S_{c0}$

седла S и устойчивого узла/фокуса O , определяемых координатами (1.48), (1.49). При увеличении параметра неравновесности S_e седло, отвечающее энергетическому барьеру на зависимости $V(\eta)$, приближается к узлу D и в точке S_c поглощает его. Дальнейшее увеличение параметра неравновесности дает картину, отвечающую упорядоченной фазе для фазового перехода второго рода.

На рис. 1.9 показано, каким образом изменяется фазовый портрет упорядоченной фазы ($S_c^0 < S_e < S_c$) с увеличением отношения времен релаксации $\tau = \tau_S/\tau_0$. Сравнивая с рис. 1.3, видим, что в окрестности точки O поведение является практически таким же, что и для фазового перехода второго рода: в адиабатическом пределе $\tau_S \ll \tau_0$ траектории быстро сбегаются к универсальному участку MOS (рис. 1.9а), а в противоположном пределе $\tau_S \gg \tau_0$ проявляется режим затухающих колебаний (рис. 1.9с). Единственное отличие состоит в появлении сепаратрисы в области малых значений параметра порядка, которое отражает наличие барьера на зависимости $V(\eta)$. Исследование временных зависимостей пути l , пройденного точкой по траектории, показывает (см. рис. 1.4б), что как и в случае фазово-

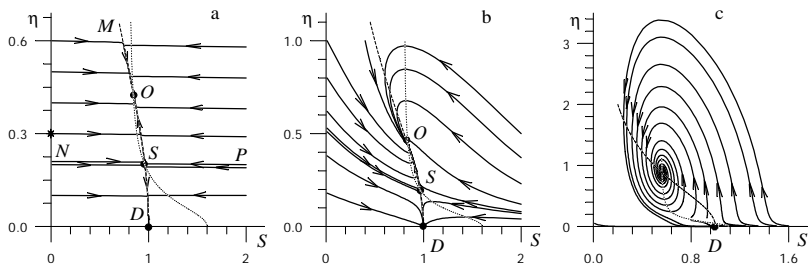


Рисунок 1.9 — Фазовые портреты для фазового перехода первого рода ($\kappa = 1, \alpha = 0.1$): а — $S_e = 1.25S_{c0}, \tau_h \ll \tau_\eta = 10^2 \tau_S$; б — $S_e = 1.25S_{c0}, \tau_h \ll \tau_\eta = \tau_S$; в — $S_e = 1.8S_{c0}, \tau_h \ll \tau_S = 10\tau_\eta$

го перехода второго рода здесь происходит замедление вблизи *русла большой реки MOS*, отвечающего окрестности минимума упорядоченной фазы.

Найденные особенности кинетического поведения системы могут быть представлены на основе вида зависимости $V(\eta, S)$ синергетического потенциала от величин η, S , параметризующих поведение системы. При этом следует исходить из того факта, что в ходе своей эволюции она проводит основное время в окрестности экстремумов зависимости $V(\eta, S)$. Поскольку время релаксации вдоль каждой из осей η, S обратно пропорционально кривизне зависимости $V(\eta, S)$ вдоль соответствующей оси³⁾, то условие $\tau_S \ll \tau_\eta$ означает, что зависимость $V(\eta, S)$ изменяется намного быстрее вдоль оси S , чем вдоль η . В результате оказывается, что поверхность функции $V(\eta, S)$ имеет узкий желоб вдоль универсальной траектории, определяемой зависимостью $S(\eta)$ вида (1.5). Как видно из рис. 1.9а, в него

³⁾ Это следует из того факта, что указанная кривизна обратно пропорциональна соответствующей восприимчивости, которая, в свою очередь, пропорциональна отвечающему ей времени релаксации [11].

система быстро скатывается вдоль оси S , отвечающей большой кривизне. Именно наличие этого желоба обеспечивает универсальный характер кинетического поведения, поскольку вблизи экстремумов зависимость $V(\eta, S)$ всегда имеет вид параболы

$$V \approx V(\eta_0, S_0) + \frac{\chi_\eta^{-1}}{2} (\eta - \eta_0)^2 + \frac{\chi_S^{-1}}{2} (S - S_0)^2, \quad (1.52)$$

где значения η_0, S_0 определяют положение экстремума, а восприимчивости χ_η, χ_S — его кривизну.

В связи со сказанным может показаться, что в пределе $\tau_0 \ll \tau_S$, противоположном адиабатическому, зависимость $V(\eta, S)$ также должна приобретать желоб, и становится непонятной природа режима затухающих колебаний, представленного на рис. 1.9с. Однако следует помнить, что вблизи точки минимума зависимости $V(\eta, S)$ восприимчивости χ_η, χ_S в равенстве (1.52) связаны со временами релаксации τ_η, τ_S различными соотношениями $\chi_S \propto \tau_S, \chi_\eta \propto \tau_0 |s - s_c|^{-1}$. Поскольку $|s - s_c| \ll 1$, то, несмотря на малость τ_0 , кривизна $\chi_\eta^{-1} \propto \tau_0^{-1} |s - s_c|$ параболы (1.52) вдоль оси η оказывается сравнимой с кривизной $\chi_S^{-1} \propto \tau_S^{-1}$ зависимости $V(\eta, S)$ вдоль оси S . Иными словами, в пределе $\tau_0 \ll \tau_S$ зависимость $V(\eta, S)$ имеет вблизи минимума упорядоченной фазы вид параболоида с кривизнами, имеющими малые (и соизмеримые) значения вдоль осей η, S . В результате конфигуративная точка, скатываясь в минимум, может совершать вращение по поверхности этого параболоида. Очевидно, такое вращение и представляет затухающие колебания, показанные на рис. 1.9с.

Следует иметь в виду, что описанное критическое возрастание восприимчивости χ_η в соотношении (1.52) носит существенно термодинамический характер [12] и не проявляется вблизи максимума зависимости $V(\eta, S)$. Именно по этой причине не происходит закручивания сепаратрисы в пределе $\tau_0 \ll \tau_S$ (см. рис. 1.9с).

Случай $\tau_0 \ll \tau_h, \tau_S$.

С аналитической точки зрения данный случай представляется наиболее трудоемким, поскольку подстановка эффективного времени релаксации (1.41) в исходное уравнение (1.1), где следует положить

$\dot{\eta} = 0$, приводит не к линейной связи (1.22), а к кубическому уравнению (см. [11, 12]). Его решение удобно записать в виде

$$3\eta = h + \eta_+(h) + \eta_-(h), \quad (1.53)$$

где введены функции

$$\eta_{\pm}(h) = \left\{ h (h^2 + h_1^2) \pm 3\alpha \sqrt{3 \left[(h^2 + h_2^2)^2 + h_3^4 \right]} \right\}^{1/3} \quad (1.54)$$

и постоянные h_1 — h_3 , определенные равенствами:

$$\begin{aligned} h_1^2 &\equiv \frac{9}{2}\alpha^2(2 - \kappa), & h_2^2 &\equiv \frac{1}{8}\alpha^2 [36(2 - \kappa) - (8 - \kappa)^2], \\ h_3^2 &\equiv \frac{1}{8}\alpha^2 \sqrt{\kappa(8 - \kappa)^3}, & \alpha &\equiv \eta_{\tau}/\eta_m. \end{aligned} \quad (1.55)$$

Подстановка связи (1.53) в уравнения (1.2), (1.3) приводит их к виду (ср. с (1.23), (1.24))

$$\dot{h} = -h + \frac{1}{3}S [h + \eta_+(h) + \eta_-(h)], \quad (1.56)$$

$$\tau \dot{S} = (s - S) - \frac{1}{3}h [h + \eta_+(h) + \eta_-(h)], \quad (1.57)$$

где время измерено в единицах τ_h и введено отношение времен релаксации $\tau \equiv \tau_S/\tau_h$.

Хотя аналитически здесь не удастся найти ни особых точек, ни отвечающих им показателей Ляпунова, численное исследование фазового портрета (см. рис. 1.10) показывает, что поведение системы совпадает с исследованным в предыдущем разделе. По сравнению с соответствующим фазовым портретом второго рода (см. рис. 1.5) можно отметить, как и в предыдущем случае, появление сепаратрисы в области значений S, h , отвечающей энергетическому барьеру, разделяющему упорядоченную и неупорядоченную фазы.

Рассуждая по аналогии с предыдущим случаем, нетрудно видеть, что при $\tau_S \ll \tau_h$, когда максимальным образом проявляется универсальность кинетического поведения системы (см. рис. 1.10а), зависимость $V(h, S)$ имеет узкий желоб вдоль универсального участка

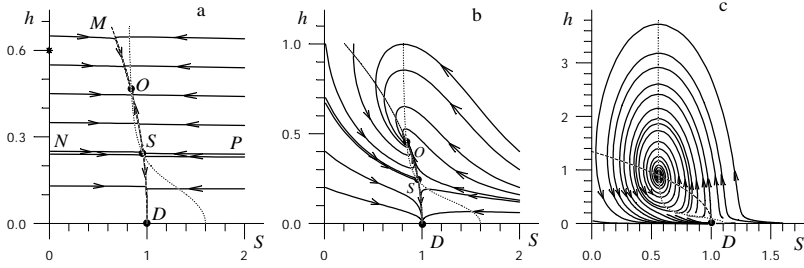


Рисунок 1.10 — Фазовые портреты для фазового перехода первого рода ($\kappa = 1, \alpha = 0.1$): а — $S_e = 1.25S_{c0}, \tau_\eta \ll \tau_h = 10^2\tau_S$; б — $S_e = 1.25S_{c0}, \tau_\eta \ll \tau_h = \tau_S$; в — $S_e = 1.8S_{c0}, \tau_\eta \ll \tau_S = 10\tau_h$

траекторий. Наличие режима затухающих колебаний в противоположном пределе $\tau_S \gg \tau_h$ (рис. 1.10в) указывает на критическое возрастание восприимчивости $\chi_h \propto \tau_h |s - s_c|^{-1}$, отвечающей сопряженному полю. Очевидно, исходной причиной этого возрастания является критический рост восприимчивости $\chi_\eta \propto \tau_0 |s - s_c|^{-1}$, отвечающей параметру порядка. Наличие жесткой функциональной связи (1.53) между величинами параметра порядка и сопряженного поля (для фазового перехода второго рода она принимает линейный вид (1.22)) и обеспечивает рост восприимчивости сопряженного поля.

Случай $\tau_S \ll \tau_0, \tau_h$.

Полагая в (1.3) $\dot{S} = 0$, получаем связь (1.32) в безразмерном виде $S = s - \eta h$. Ее подстановка в (1.2) дает уравнение (1.34), а (1.1) принимает вид (ср. с (1.33))

$$\dot{\eta} = -\eta \left[1 + \kappa (1 + \eta^2/\alpha^2)^{-1} \right] + h. \quad (1.58)$$

Фазовый портрет системы (1.34), (1.58) характеризуется наличием трех особых точек $D(0, 0)$, $O(h_+, \eta_+)$, $S(h_-, \eta_-)$, где значения η_{\pm} , h_{\pm} задаются равенствами:

$$\eta_{\pm} = \left[\beta^2 \pm \sqrt{\beta^4 + \alpha^2(s - 1 - \kappa)} \right]^{1/2}, \quad (1.59)$$

$$h_{\pm} = \frac{s\eta_{\pm}}{1 + \eta_{\pm}^2}, \quad (1.60)$$

параметры α, β, s определены в (1.50). Показатель Ляпунова особой точки D определяется выражением (1.36), где вместо $1 + \tau^{-1}$, $s - 1$ следует подставить $s_c + \tau^{-1}$, $s - s_c$, $s_c \equiv 1 + \kappa$. При $s < s_c$ эта точка является устойчивым узлом, а при $s \geq s_c$ — седлом. Показатели Ляпунова точек $O(h_+, \eta_+)$, $S(h_-, \eta_-)$ выражаются через их координаты (1.59), (1.60) равенствами:

$$\begin{aligned} \lambda_{\pm} &= \lambda_0 \left(1 \pm \sqrt{1 + \Delta} \right), \\ \lambda_0 &= \frac{(h_{\pm} - \eta_{\pm})^2}{\alpha^2 \kappa} - \frac{1}{2} \left(\frac{1 + \eta_{\pm}^2}{\tau} + \frac{h_{\pm}}{\eta_{\pm}} \right), \\ \lambda_0^2 \Delta &= \frac{(1 - \eta_{\pm}^2) h_{\pm}}{\tau \eta_{\pm}} - \frac{1 + \eta_{\pm}^2}{\tau} \left[\frac{h_{\pm}}{\eta_{\pm}} - \frac{2(h_{\pm} - \eta_{\pm})^2}{\alpha^2 \kappa} \right]. \end{aligned} \quad (1.61)$$

В интервале $S_c^0 < S < S_c$ реализации фазового перехода первого рода точка S является седлом, а O — устойчивым узлом или фокусом.

Численное определение фазового портрета приводит к картине, показанной на рис. 1.11. Из сравнения с соответствующим портретом для фазового перехода второго рода (см. рис. 1.6) видно, что, как и выше, единственное усложнение состоит в появлении дополнительной сепаратрисы в области малых значений h, η .

При исследовании фазового перехода второго рода в подразделе 1.1.1 отмечалось, что отличительной особенностью данного случая является то обстоятельство, что универсальность кинетического поведения системы проявляется не только в пределе $\tau_h \ll \tau_0$ (рис. 1.11а), но и в противоположном случае $\tau_h \gg \tau_0$ (рис. 1.11с), где, казалось бы, можно ожидать появления колебаний. Это связано с

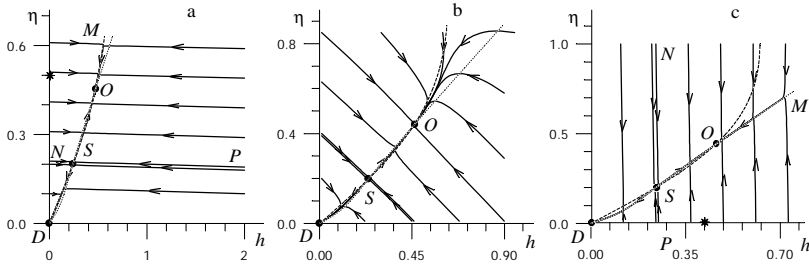


Рисунок 1.11 — Фазовые портреты для фазового перехода первого рода ($\kappa = 1, \alpha = 0.1, S_e = 1.25S_{c0}$): a — $\tau_S \ll \tau_\eta = 10^2 \tau_h$; b — $\tau_S \ll \tau_\eta = \tau_h$; c — $\tau_S \ll \tau_h = 10^2 \tau_\eta$

тем обстоятельством, что кривизны парабол вдоль осей h, η определяются значениями $\chi_h^{-1} \propto \tau_h^{-1}|s - s_c|, \chi_\eta^{-1} \propto \tau_0^{-1}|s - s_c|$ обратных восприимчивостей, которые одинаковым образом изменяются с температурой. Поэтому, несмотря на температурную зависимость восприимчивостей χ_h, χ_η , при $\tau_h \gg \tau_0$ сохраняется соотношение $\chi_h^{-1} \ll \chi_\eta^{-1}$, означающее, что кривизна зависимости $V(\eta, h)$ вдоль оси h намного меньше, чем вдоль η . Поэтому на рис. 1.11 с траектории, по которым конфигуративная точка быстро скатывается в *русло большой реки*, направлены практически вдоль оси η .

Отметим, что из выражения (1.61), несмотря на его громоздкость, можно найти формулы, определяющие границы интервала (τ_-, τ_+) отношений времен релаксации $\tau = \tau_h/\tau_0$, внутри которого точка $O(h_+, \eta_+)$ является устойчивым фокусом (см. (1.38)). Однако они имеют очень громоздкий вид и поэтому не приводятся.

1.1.3 Кинетическая картина фазового превращения

Проведенное исследование показывает, что система уравнений Лоренца (1.1) — (1.3) позволяет представить основные особенности фазового перехода. Термодинамическое описание достигается использованием зависимости $V(\eta)$ синергетического потенциала от величины параметра порядка. В случае фазового перехода второго рода эта зависимость имеет вид (1.8), и ее характер определяется параметром внешнего воздействия $s \equiv S_e/S_c$: при $s < 1$ имеем монотонно возрастающую зависимость $V(\eta)$ с минимумом в точке $\eta_0 = 0$, а при $s > 1$ минимум отвечает упорядоченной фазе, характеризуемой параметром порядка (1.10). Переход к случаю фазового перехода первого рода достигается, если положить, что время релаксации параметра порядка приобретает зависимость от его величины η согласно равенству (1.41). Тогда функция $V(\eta)$ имеет вид (1.42), где в сравнении с (1.8) введены два новых параметра κ, η_τ . Согласно (1.44) первый из них определяет перенормировку критического значения управляющего параметра, а величина второго задает отношение $\alpha \equiv \eta_\tau/\eta_m$. Зависимость $V(\eta)$ имеет энергетический барьер, разделяющий минимумы упорядоченной и неупорядоченной фаз, только при условии $\alpha < 1$. В этом случае в интервале (S_c^0, S_c) , определяемом равенствами (1.43), (1.44), фазовый переход протекает по механизму первого рода, а при $S_e > S_c$ — подобно второму. Равновесное значение параметра порядка определяется равенствами (1.45), (1.46).

Как отмечалось выше, существенное отличие синергетических переходов от термодинамических состоит в том, что стационарное значение управляющего параметра S_0 не совпадает со значением S_e , задаваемым внешним воздействием. Для перехода второго рода это значение сводится к критической величине S_c , определяемой равенством (1.9). В случае перехода первого рода реализуется значение S_- (см. (1.48)), отвечающее минимуму зависимости $V(\eta)$. Поскольку величины S_c, S_- представляют минимальные значения управляющего параметра, начиная с которых происходит упорядочение, то указанный факт означает, что отрицательная обратная связь между параметром порядка и сопряженным полем, отражаемая последним слагаемым (1.3), приводит к настолько сильному понижению величины управляющего параметра, которое только на пределе обес-

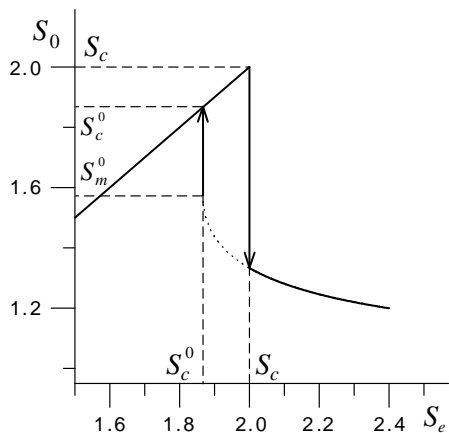


Рисунок 1.12 — Зависимость стационарного значения управляющего параметра S_0 от внешнего воздействия S_e

печивает самоорганизацию. Интересно отметить, что стационарное значение S_0 совпадает с параметром внешнего воздействия S_e в интервале $0 < S_e < S_c^0$ (рис. 1.12). При $S_e > S_c^0$ величина S_e плавно убывает от значения

$$S_m^0 = S_{c0} \left[1 + \alpha \sqrt{\kappa / (1 - \alpha^2)} \right] \quad (1.62)$$

при $S_e = S_c^0$ до S_{c0} при $S_e \rightarrow \infty$. При квазистатическом росте S_e от 0 до S_c стационарное значение управляющего параметра линейно возрастает в том же интервале. После скачка вниз при $S_e = S_c$ величина S_0 плавно убывает согласно зависимости (1.48) для S_- . При обратном уменьшении S_e величина S_0 совершает скачок в точке S_c^0 от значения S_m^0 до S_c^0 . Поскольку в актуальной области параметров

α, κ , ограниченной значением

$$\kappa_{min} = \frac{\alpha^2}{1 - \alpha^2}, \quad (1.63)$$

значение S_m^0 меньше S_c^0 , то в интервале (S_c^0, S_c) стационарное значение S_0 всегда меньше S_e .

Кинетическая картина фазового перехода представляется фазовыми портретами, показанными на рис. 1.2, 1.3, 1.5, 1.6, 1.8 — 1.11 и временной зависимостью пути, пройденного точкой по траектории (рис. 1.4). В случае перехода второго рода (рис. 1.2 — 1.6) фазовый портрет имеет при $S_e < S_c$ притягивающий узел D , отвечающий неупорядоченной фазе; при $S_e > S_c$ он трансформируется в седло, и появляется дополнительный узел/фокус O , соответствующий упорядоченной фазе. В отличие от этого на фазовом портрете первого рода (рис. 1.8 — 1.11) при $S_e = S_c^0$ происходит бифуркация, в результате которой появляются седло S , отвечающее энергетическому барьеру на зависимости $V(\eta)$, и притягивающий узел/фокус O , соответствующий упорядоченной фазе; при этом притягивающий узел D неупорядоченной фазы остается неизменным. С ростом управляющего параметра в интервале (S_c^0, S_c) седло S стремится к узлу D , поглощая его в точке S_c , а узел/фокус O смещается в сторону возрастания величин параметра порядка и сопряженного поля.

Тип особой точки O , отвечающей упорядоченной фазе, зависит от соотношения времен релаксации $\tau_\eta, \tau_h, \tau_S$.⁴⁾ При их несоизмеримости можно выделить шесть характерных режимов:

$$\begin{aligned} \text{a) } & \tau_h \ll \tau_S \ll \tau_\eta, \\ \text{b) } & \tau_\eta \ll \tau_S \ll \tau_h, \\ \text{c) } & \tau_S \ll \tau_h \ll \tau_\eta, \\ \text{d) } & \tau_S \ll \tau_\eta \ll \tau_h; \\ \text{e) } & \tau_h \ll \tau_\eta \ll \tau_S, \\ \text{f) } & \tau_\eta \ll \tau_h \ll \tau_S. \end{aligned} \quad (1.64)$$

⁴⁾Для перехода первого рода под величиной τ_η следует понимать время релаксации τ_0 , входящее в зависимость (1.41).

Как показывает проведенный анализ, в случаях (а) — (d) точка O является притягивающим узлом, и по истечении короткого времени траектория системы выходит на универсальный участок (*русло большой реки*), положение которого определяется внешними условиями (величиной S_e). В этом и состоит обнаруженная в [6] универсальность кинетической картины фазового перехода. Как видно из приведенных фазовых портретов, *русло большой реки* расположено в параметрическом пространстве η, h, S таким образом, что при проектировании на плоскости $S - \eta, S - h$ оно имеет вид монотонно спадающей кривой типа MOD на рис. 1.3а (переход второго рода) или MOS на рис. 1.9а (переход первого рода). Проекция на плоскость h, η близка к биссектрисе (см. рис. 1.6а, 1.11а). Кроме того, в случае перехода первого рода появляется универсальный участок NSP , отвечающий переходу системы через энергетический барьер (рис. 1.8 — 1.11). Из приведенных фазовых портретов можно видеть, что при указанной несоизмеримости времен релаксации в режимах (а) — (d) выход на универсальный участок происходит по почти прямолинейным траекториям, которые практически параллельны осям, соответствующим наименьшим временам релаксации. Так, в режиме (а) точка сначала очень быстро движется по прямой, параллельной оси h , затем переходит на участок, параллельный оси S , и движется по нему со скоростью в τ_S/τ_h меньшей, чем перед этим, но превышающей скорость последующего движения по универсальному участку в τ_η/τ_S раз. После этого происходит выход на универсальный участок.

При соотношениях времен релаксации, отвечающих случаям (е), (f), система испытывает затухающие колебания в плоскости, соответствующей двум наибольшим их значениям. Характерно, что для обоих этих случаев наибольшее значение имеет время τ_S , отвечающее управляющему параметру. Как отмечалось в подразделе 1.1.2, причиной возникновения колебаний является критическое возрастание времен τ_η, τ_h согласно соотношению типа (1.11). Вблизи критической точки s_c оно обеспечивает соизмеримость величин $\tau_\eta|s-s_c|^{-1}, \tau_S$ (в случае (е)) и $\tau_h|s-s_c|^{-1}, \tau_S$ (в случае (f)), в результате чего связь между соответствующими параметрами η, S и h, S принимает резонансный характер. Что касается эволюции вдоль осей h и η , отвечающих в случаях (е), (f) наименьшим временам, то она сохраня-

ет тот же характер, что и при выходе на универсальный режим: система со скоростью в τ_S/τ_h (случай (е)) и τ_S/τ_η (случай (f)) раз большей, чем частота колебаний, переходит в соответствующую плоскость по перпендикулярной оси.

Подобно анализу, проведенному для случая $\tau_h \ll \tau_0, \tau_S$ в подразделе 1.1.2, описанные особенности кинетического поведения могут быть представлены на основе анализа зависимости $V(\eta, h, S)$ синергетического потенциала от полного набора параметров η, h, S . Поскольку основной вклад в универсальное поведение системы дают окрестности экстремумов этой зависимости, характеризуемые координатами η_0, h_0, S_0 , то в квадратичном приближении можно записать

$$V \approx V(\eta_0, h_0, S_0) + \frac{\chi_\eta^{-1}}{2} (\eta - \eta_0)^2 + \frac{\chi_h^{-1}}{2} (h - h_0)^2 + \frac{\chi_S^{-1}}{2} (S - S_0)^2, \quad (1.65)$$

где $\chi_\eta, \chi_h, \chi_S$ — восприимчивости, определяющие кривизну зависимости $V(\eta, h, S)$ вдоль соответствующих осей. С учетом пропорциональности восприимчивостей соответствующим временам релаксации по аналогии с (1.11) имеем

$$\chi_\eta \propto \tau_\eta |s - s_c|^{-1}, \quad \chi_h \propto \tau_h |s - s_c|^{-1}, \quad \chi_S \propto \tau_S. \quad (1.66)$$

Характерно, что величины χ_η, χ_h восприимчивостей параметра порядка и сопряженного поля неограниченно возрастают вблизи критической точки s_c , а значение χ_S , отвечающее управляющему параметру, не зависит от параметра внешнего воздействия. Поэтому для трехмерного параболоида (1.65) иерархия времен релаксации (1.64) не всегда обеспечивает несоизмеримость кривизн параболоида (1.65) вдоль различных осей. В частности, в критической области могут реализоваться соотношения:

$$\begin{aligned} \text{a)} & \chi_h^{-1} \gg \chi_S^{-1} \gg \chi_\eta^{-1}, \\ \text{b)} & \chi_\eta^{-1} \gg \chi_S^{-1} \gg \chi_h^{-1}, \\ \text{c)} & \chi_S^{-1} \gg \chi_h^{-1} \gg \chi_\eta^{-1}, \\ \text{d)} & \chi_S^{-1} \gg \chi_\eta^{-1} \gg \chi_h^{-1}; \\ \text{e)} & \chi_h^{-1} \gg \chi_\eta^{-1} \sim \chi_S^{-1}, \\ \text{f)} & \chi_\eta^{-1} \gg \chi_h^{-1} \sim \chi_S^{-1} \end{aligned} \quad (1.67)$$

и в режимах (е), (f) кривизны параболы (1.65) становятся попарно соизмеримыми. Это означает, что вблизи минимума упорядоченной фазы зависимость $V(\eta, h, S)$ приобретает в плоскостях S, η и S, h вид параболоида вращения с кривизной, имеющей намного меньшее значение, чем вдоль перпендикулярных осей (h и η соответственно). В результате конфигуративная точка не только скатывается к минимуму этого параболоида, но и совершает вращение по его поверхности. Именно это вращение ответственно за найденные выше затухающие колебания в плоскостях S, η (случай (е)) и S, h (случай (f)).

Отметим, что критическое уменьшение кривизны сказывается только вблизи минимума упорядоченной фазы и не имеет места в окрестности энергетического барьера. Поэтому на фазовых портретах, приведенных на рис. 1.9с, 1.10с, несмотря на закручивание траекторий вблизи точки O , в окрестности седла S сепаратриса с изменением отношения времен релаксации свой вид не меняет.

Что касается режимов (а) — (d), то здесь критическое поведение системы не нарушает иерархичность (1.67) в соотношении кривизн χ^{-1} , обусловленную неравенствами (1.64) между временами релаксации τ , и система быстро выходит на универсальный режим. Так, например, в режиме (а), где наибольшей является кривизна χ_h^{-1} , а наименьшей χ_η^{-1} , конфигуративная точка очень быстро скатывается по поверхности зависимости $V(\eta, h, S)$ вдоль оси h , менее быстро — вдоль S и затем плавно движется по универсальному участку траектории. Иными словами, в режимах (а) — (d) поверхность зависимости $V(\eta, h, S)$ имеет вид узкого желоба, дно которого отвечает универсальной траектории. То обстоятельство, что она не параллельна оси, отвечающей наименьшей кривизне χ^{-1} , означает зависимость от соответствующего параметра экстремальных значений вдоль других осей. Например, в режиме (а) экстремальные значения $h_0(\eta)$, $S_0(\eta)$ сопряженного поля и управляющего параметра за время τ_S приобретают функциональную зависимость типа (1.4), (1.5).

Как известно [13], замечательное свойство системы Лоренца состоит в том, что она описывает режим странного аттрактора, в котором универсальная траектория представляет фрактальное множество, характеризуемое дробной размерностью (см. [14]). Легко заметить, что обнаруженные в режимах (е), (f) двумерные затухающие колебания отвечают срезам странного аттрактора плоскостями S, η и

S, h (но не сводятся к ним). Для перехода от этих колебаний в режим странного аттрактора следует включить движение вдоль перпендикулярной оси (h — в режиме (е) и η — в режиме (f)). Как видно из соотношений (1.64), это может быть достигнуто только в случае соизмеримости времен релаксации $\tau_h \sim \tau_\eta$. Таким образом, переход в режим странного аттрактора следует ожидать при выполнении условий:

$$\begin{aligned} \tau_h &\sim \tau_\eta \ll \tau_S, \\ \chi_h &\sim \chi_\eta \sim \chi_S. \end{aligned} \tag{1.68}$$

При изменении отношения $\tau \equiv \tau_h/\tau_\eta$, в пределе $\tau \ll 1$ странный аттрактор вырождается в колебания в плоскости S, η , а в противоположном пределе $\tau \gg 1$ они переходят в плоскость S, h . Если же уменьшать отношения $\tau_S/\tau_\eta, \tau_S/\tau_h$, то уменьшается частота колебаний в соответствующей плоскости.

Обсудим в заключение характер принятых приближений. Прежде всего следует иметь в виду, что система Лоренца описывает индуцированные шумом переходы, при которых упорядочение возникает под стохастическим воздействием внешней среды [15]. Примером такого рода превращений могут служить фазовые переходы, обусловленные ростом давления, которое играет роль управляющего параметра (см. [16]). В термодинамических системах интенсивность шума определяется температурой и энтропией. Однако поскольку процесс самоорганизации отвечает большим значениям управляющего параметра S , то он сводится скорее к энтропии, чем температуре.

Другим существенным ограничением является то обстоятельство, что мы исследовали пространственно однородные системы, хотя в случае сохраняющегося параметра порядка в ходе фазового перехода всегда образуется неоднородная структура [1, 2]. При этом следует разделять два принципиально разных режима — бинадальный и спинадальный. В термодинамических системах первый отвечает закритической области температур, второй — подкритической. Переход между ними представляет потерю эргодичности стохастической системы в бинадальной области, связанную с появлением резких межфазных (антифазных) границ [17]. В спинадальной области, где координатная зависимость параметров системы является плавной, ее учет не вызывает особых затруднений. Действительно, если

перейти из координатного представления в волновое, то оказывается достаточным ввести в затравочные времена релаксации множители $(1 + \xi^2 \mathbf{k}^2)^{-1}$, зависящие от волнового вектора \mathbf{k} , где ξ — корреляционная длина, отвечающая данному параметру. В бинодальной области, кроме ξ , появляются дополнительные масштабы L , характеризующие макроструктуру, и ситуация намного усложняется [1, 2]. Ее рассмотрение представляет отдельную задачу.

1.2 Самоорганизуемая критичность

Рассмотрение, проведенное в предыдущем разделе, показывает, что внешнее воздействие может приводить к самоорганизации, в результате которой неравновесная система переходит в упорядоченное состояние. Как известно из теории фазовых переходов, такое состояние образуется критическим образом — упорядоченная фаза развивается как самоподобная структура, в которой отсутствует характерный масштаб [18]. Формально свойство самоподобия выражается однородностью функции распределения $P(x)$ по амплитуде x гидродинамической моды, ответственной за упорядочение:

$$P(x/x_c) = x_c^\alpha P(x). \quad (1.69)$$

Согласно (1.69) изменение масштаба x_c разрешения случайной величины x приводит к мультипликативному изменению вероятности ее реализации P , характеризуемому показателем α . Вводя масштабированную переменную $y \equiv x/x_c$ и функцию распределения $\mathcal{P}(y) \equiv y^\alpha P(y)$, можно переписать (1.69) в виде

$$P(x) = x^{-\alpha} \mathcal{P}(y), \quad (1.70)$$

из которого следует основное свойство самоподобных систем: в пределе больших и малых значений стохастической переменной x , когда функцию $\mathcal{P}(y)$ можно положить постоянной, распределение $P(x)$ принимает степенную форму.

Как и все фазовые переходы, процесс самоорганизации требует интенсивного внешнего воздействия. В последнее время, однако, обнаружено множество систем, в которых самоорганизация протекает

спонтанным образом. Наиболее ярким проявлением такого поведения, известного как самоорганизуемая критичность (СОК), являются землетрясения и снежные лавины. Кроме того, режим СОК проявляется при течении сыпучих материалов по наклонной поверхности (известная модель sandpile) [19] — [22], естественном отборе в биологических системах [23], лесных пожарах, протекании жидкости в пористых средах и т. д. [24]. Существенная особенность СОК состоит в прерывистом характере процесса, отвечающем режиму перемежаемости: основное время диссипация препятствует спонтанному накоплению энергии, и система находится в предкритическом состоянии; спонтанным образом может возникнуть нескомпенсированная накачка энергии, которая приводит к самоорганизации; после этого в течение короткого времени происходит разрядка запасенной энергии, о которой говорят как о лавине, размером s . Такое поведение самоорганизующейся системы определяется функцией распределения типа (1.70):

$$P(s) = s^{-\tau} \mathcal{P}(x), \quad x \equiv s/s_c. \quad (1.71)$$

Здесь критический размер s_c связан с размером системы L и характерным временем $t_c \sim L^z$ соотношениями $s_c \sim L^D \sim t_c^{D/z}$, где D — фрактальная размерность; z — динамический показатель. Согласно [25] типичные значения указанных показателей составляют $\tau = 3/2$, $D = 4$, $z = 2$. С другой стороны, скейлинговые соотношения, дополненные равенством восприимчивости и среднего размера лавины, приводят к выражениям [25]:

$$\tau = 1 + \frac{z}{D}, \quad \tau = 2 \left(1 - \frac{1}{D} \right). \quad (1.72)$$

Одним из наиболее разработанных методов, позволяющих представить основные особенности СОК, является полевая схема [25], [26], в рамках которой роль параметра порядка играет плотность активных узлов ρ_a , а управляющий параметр сводится к сохраняющемуся полю плотности энергии ζ . Режим СОК представляется как результат конкуренции между интенсивностями накачки энергии h и диссипации ϵ . На поведении системы критическим образом сказывается наличие закона сохранения: энергия сохраняется в случае $h = \epsilon = 0$, а в модели sandpile накачивается в систему, обеспечивая

стационарный режим при $\epsilon > h$, $h \rightarrow 0^+$, $\epsilon \rightarrow 0^+$. Первый случай отвечает критическому состоянию [25], [26], в котором неоднородность начального распределения энергии приводит к немарковскому слагаемому и пространственной зависимости параметров задачи. При размерности, превышающей критическое значение $d_c = 4$, этот случай сводится к картине фазового перехода Ландау, в рамках которой $\rho_a \sim (\zeta - \zeta_c)$ для активного состояния ($\zeta > \zeta_c$) и $\rho_a = 0$ — для поглощающего ($\zeta < \zeta_c$). Принципиально иная картина складывается в системах, отвечающих модели sandpile, которая предполагает такую накачку энергии $h \rightarrow 0^+$, что ее плотность достигает критического значения ζ_c . В этом случае средняя плотность активных узлов имеет вид $\langle \rho_a \rangle = h/\epsilon$, так что восприимчивость $\chi_0 \equiv \partial \langle \rho_a \rangle / \partial h$ оказывается равной $\chi_0 = \epsilon^{-1}$. В результате функция отклика принимает на больших расстояниях r вид $\chi(r) \sim r^{2-d} e^{-r/\xi}$, где d — размерность пространства; $\xi \sim \epsilon^{-1/2}$ — корреляционная длина, не сводящаяся к характерному размеру $L \sim \epsilon^{-1/\mu}$. Поведение системы, определяемое условиями стационарности и трансляционной инвариантности [26], характеризуется набором критических показателей $\beta = \gamma = \delta = 1$, $\mu = 2$, $\nu = 1/2$, $\eta = 0$, присущих теории среднего поля [25].

Касаясь других подходов, отметим, что большинство из них было приложено к наиболее популярной и простой модели sandpile, которая исследована как аналитически [27], [28], так и численно [19] — [22], [27] — [32]. Аналитическое представление сводится, как правило, к полевым методам, первый из которых [33] основан на нелинейном уравнении диффузии. Однако использование однопараметрического подхода не позволяет учесть основную особенность самоорганизующихся систем — самосогласованный характер динамики лавин, обусловленный обратной связью между открытой системой и окружающей средой. Более содержательную картину дает использование двухпараметрической схемы [20] — [22], [34]. Это достигается с помощью калибровочных полей (типа скорости движения песка и высоты его поверхности) либо материальных полей, сводящихся к числу движущихся песчинок (размеру лавины) и т. д. Использование теории среднего поля показывает, что самоподобный режим динамики сыпучей среды отвечает адиабатическому поведению, при котором характерное время изменения параметра порядка значительно превышает соответствующий масштаб управляющего параметра. Пол-

ная картина самоорганизации, изложенная в предыдущем разделе, требует использования трехпараметрического подхода.

Настоящий раздел посвящен полевому представлению СОК в рамках стандартного подхода [35], использующего как калибровочные, так и материальные компоненты. Показано, что при исследовании процесса формирования одиночной лавины следует использовать первые из этих компонент, роль которых играют составляющие скорости и наклон сыпучей поверхности (см. подразделы 1.2.1 — 1.2.3). Если же нас интересует полная картина СОК, сводящаяся к распределению по размерам лавин, то следует рассматривать материальное поле, представляющее число движущихся песчинок (подразделы 1.2.4 и 1.2.5). На основе наглядных представлений в подразделе 1.2.1 развита самосогласованная теория стационарного потокового состояния, которая сводит задачу формирования одиночной лавины к случаю сохраняющейся энергии в подходе [26]. Подраздел 1.2.2 посвящен учету аддитивных шумов для компонент скорости и наклона песка. Показано, что возрастание интенсивности флуктуаций приводит к появлению лавины даже в отсутствие накачки энергии, причем шум управляющего параметра играет критическую роль. Флуктуационный режим такого рода соответствует случаю $h \rightarrow 0^+$ [26], при котором распределение параметра порядка имеет степенной вид с целочисленным показателем. Поскольку в действительности этот показатель является дробным, то в подразделе 1.2.3 проведено обобщение системы Лоренца, позволяющее естественным образом описать реальную картину образования лавины. Согласно подразделу 1.2.4 данное обобщение позволяет также представить поведение ансамбля лавин. Это достигается на основе подхода Эдвардса [36], [37], который по аналогии с обычной термодинамикой описывает распределение песчинок по энергиям неаддитивной системы [38]. Такое представление достигается использованием дробной системы Лоренца, где роль параметра порядка играет размер лавины, сопряженное поле сводится к неаддитивной сложности (complexity), а несохраняющаяся энергия является управляющим параметром. Найдена фазовая диаграмма, определяющая различные области поведения системы в зависимости от интенсивностей шумов указанных величин. В результате оказывается, что распределение (1.71), присущее СОК, обеспечивается флуктуациями энер-

гии движущихся песчинок. Исследование стохастической системы в подразделе 1.2.5 показывает, что это распределение представляет, с одной стороны, решение нелинейного уравнения Фоккера–Планка, описывающего поведение неаддитивной системы [38], а с другой — отвечает дробному уравнению Фоккера–Планка для полетов Леви, характеризующихся динамическим показателем $z \neq 2$ [39]. Сопоставление решений указанных уравнений приводит к установлению нетривиальных связей между показателем τ в распределении (1.71), фрактальной размерностью D фазового пространства, характеристическим показателем мультипликативного шума, числом уравнений, необходимых для представления самосогласованного поведения системы в режиме СОК, динамическим показателем z и параметром неаддитивности Цаллиса.

Сведения, необходимые для использования дробных интеграла и производной, а также производной Джексона, собраны в приложении А.

1.2.1 Формирование стационарной лавины

Пусть в произвольный момент времени t наклонная поверхность песка задается зависимостью $y = y_t(x)$. Тогда течение песка представляется горизонтальной и вертикальной компонентами скорости $\dot{x} \equiv \partial x / \partial t$, $\dot{y} \equiv \partial y / \partial t$ и наклоном поверхности $y' \equiv \partial y / \partial x$. В предположении о диссипативном характере релаксация указанных степеней свободы описывается дебаевскими уравнениями:

$$\frac{d\dot{x}}{dt} = -\frac{\dot{x}}{\tau_x}, \quad (1.73)$$

$$\frac{d\dot{y}}{dt} = -\frac{\dot{y}}{\tau_y^{(0)}}, \quad (1.74)$$

$$\frac{dy'}{dt} = \frac{y'_e - y'}{\tau_S}, \quad (1.75)$$

где τ_x , $\tau_y^{(0)}$ и τ_S — времена релаксации компонент скорости и наклона соответственно. Согласно (1.73) — (1.75) в состоянии покоя составляющие скорости $\dot{x} = \dot{y} = 0$, а равновесный наклон $y' = y'_e \neq 0$

играет роль управляющего параметра, значение которого задается внешними условиями.

Поскольку движение песчинок вдоль разных направлений не является независимым, уравнение (1.73) следует дополнить величиной $f = \dot{y}/\gamma$, представляющей силу жидкого трения вдоль оси y (γ — кинетический коэффициент). В результате получаем

$$\tau_x \ddot{x} = -\dot{x} + a^{-1} \dot{y}, \quad (1.76)$$

где $a \equiv \gamma/\tau_x$. Согласно уравнению диффузии $\dot{y} = Dy''$, характеризующему коэффициентом D , сила трения определяется кривизной сыпучей поверхности:

$$f = (D/\gamma)y''. \quad (1.77)$$

В стационарном потоковом состоянии $\ddot{x} = 0$ решение уравнения (1.76) определяет касательную $y = ax + \text{const}$, так, что сила трения $f = \tau_x^{-1} \dot{x}$ пропорциональна горизонтальной компоненте скорости песка. Учитывая зависимость (1.77) и используя цепное правило дифференцирования $dy'/dt = \dot{y}' + y''\dot{x}$, из (1.75) получаем уравнение для изменения наклона:

$$\tau_S \dot{y}' = (y'_e - y') - (\tau_S/D) \dot{x} \dot{y}. \quad (1.78)$$

Подобным образом можно найти уравнение для вертикальной компоненты скорости:

$$\tau_y \ddot{y} = -\dot{y} + \frac{\tau_y}{\tau_x} y' \dot{x}, \quad \frac{1}{\tau_y} \equiv \frac{1}{\tau_y^{(0)}} \left(1 + \frac{y'_e \tau_y^{(0)}}{a \tau_x} \right). \quad (1.79)$$

Определяя уравнения, мы пренебрегли вкладами высших порядков по пространственно—временным производным и ввели перенормированное время релаксации τ_y , зависящее от наклона y'_e , задаваемого внешними условиями.

Уравнения (1.76), (1.78), (1.79) составляют основу для самосогласованного описания течения песка. Их отличительная особенность состоит в том, что перед нелинейными членами в (1.78), (1.79), стоят разные знаки, тогда как (1.76) линейно. Последнее означает, что на начальной стадии лавина начинает распространяться вдоль

касательной $y = ax + \text{const}$. Отрицательный знак перед последним членом в уравнении (1.78) можно рассматривать как проявление принципа Ле–Шателье — поскольку рост наклона способствует формированию лавины, то компоненты скорости \dot{x} и \dot{y} противодействуют его увеличению. Положительная обратная связь \dot{x} и y' с \dot{y} в уравнении (1.79) является причиной самоорганизации, приводящей к образованию лавин.

В безразмерном виде уравнения (1.76), (1.78), (1.79) сводятся к системе Лоренца:

$$\dot{u} = -u + v, \quad (1.80)$$

$$\epsilon \dot{v} = -v + uS, \quad (1.81)$$

$$\delta \dot{S} = (S_e - S) - uv, \quad (1.82)$$

где введены параметры $\epsilon \equiv \tau_y/\tau_x$; $\delta \equiv \tau_S/\tau_x$; масштабированные величины $u \equiv (\tau_y/\tau_x)^{1/2}(\tau_S/D)^{1/2}\dot{x}$, $v \equiv (\tau_y/\tau_x)^{1/2}(\tau_S/D)^{1/2}\dot{y}/a$ и $S \equiv (\tau_y/\tau_x)y'/a$ представляют компоненты скорости и наклон, точка означает производную по безразмерному времени t/τ_x . В общем случае система (1.80) — (1.82) не имеет аналитического решения, но при $\epsilon \ll 1$, $\delta \ll 1$ можно использовать адиабатическое приближение, в рамках которого левые части уравнений (1.81), (1.82) полагаются равными нулю. В результате приходим к зависимости S и v от горизонтальной скорости u :

$$S = \frac{S_e}{1 + u^2}, \quad v = \frac{S_e u}{1 + u^2}. \quad (1.83)$$

С ростом u в интервале от 0 до 1 наклон S монотонно спадает, а скорость v увеличивается (при $u > 1$ имеем $dv/du < 0$, и поток песка становится турбулентным). Подстановка второго равенства (1.83) в (1.80) дает уравнение Ландау–Халатникова

$$\dot{u} = -\frac{\partial E}{\partial u} \quad (1.84)$$

с кинетической энергией

$$E = \frac{u^2}{2} - \frac{S_e}{2} \ln(1 + u^2). \quad (1.85)$$

При $S_e < 1$ зависимость $E(u)$ является монотонно возрастающей, стационарная скорость $u_0 = 0$, и лавина не образуется. Такое состояние отвечает поглощающей структуре, исследованной в [26]. Если наклон S_e превышает критическое значение $S_c = 1$, кинетическая энергия имеет минимум, отвечающий компонентам скорости $u_0 = v_0 = (S_e - 1)^{1/2}$ и наклону $S_0 = 1$.

Представленный сценарий отвечает сверхкритическому режиму формирования лавин, который соответствует фазовому переходу второго рода [34]. Это следует из разложения кинетической энергии (1.85) по степеням u^2 , которое приводит к формуле Ландау. В результате для критических показателей получаем значения $\gamma = 1$, $\delta = 3$, $\nu = 1/2$, которые совпадают с результатами теории среднего поля [25]. Однако показатель $\beta = 1/2$ в два раза меньше, чем в [25], поскольку использованный нами параметр порядка (скорость) не сводится к числу активных узлов.

Формирование лавин представляет субкритический режим самоорганизации, которому отвечает фазовый переход первого рода. Для учета этого обстоятельства предположим, что эффективное время релаксации $\tau_x(u)$ увеличивается от значения $\tau_x(1 + m)^{-1}$, $m > 0$ до τ_x согласно равенству

$$\frac{\tau_x}{\tau_x(u)} = 1 + \frac{m}{1 + u^2/u_\tau^2}, \quad (1.86)$$

где $0 < u_\tau < 1$. Тогда кинетическая энергия (1.85) приобретает слабое

$$\Delta E = \frac{m u_\tau^2}{2} \ln \left(1 + \frac{u^2}{u_\tau^2} \right), \quad (1.87)$$

а стационарные значения скорости принимают вид:

$$u_0^m = u_{00} \left[1 \mp \sqrt{1 + u_\tau^2 u_{00}^{-4} (S_e - S_c)} \right]^{1/2}, \quad (1.88)$$

$$2u_{00}^2 \equiv (S_e - 1) - S_c u_\tau^2, \quad S_c \equiv 1 + m,$$

где верхний знак соответствует неустойчивому состоянию u^m , при котором кинетическая энергия $E + \Delta E$ имеет максимум, нижний — устойчивому u_0 . Соответствующие значения стационарного наклона

равны

$$S_{\pm} = \frac{1 + u_{00}^2 \pm \sqrt{(1 + u_{00}^2)^2 - (1 - u_{\tau}^2) S_e}}{1 - u_{\tau}^2}. \quad (1.89)$$

Устойчивому состоянию отвечает меньшее значение S_- , которое плавно спадает от величины

$$S_m^0 = 1 + u_{\tau} \sqrt{m/(1 - u_{\tau}^2)} \quad (1.90)$$

при

$$S_e = S_c^0, \quad S_c^0 \equiv (1 - u_{\tau}^2) (S_m^0)^2, \quad (1.91)$$

до предельного значения $S_- = 1$ при $S_e \rightarrow \infty$. Зависимости u_0 , u^m , S_0 от S_e представлены на рис. 1.7, 1.12, где под параметром порядка η следует понимать скорость u . Их поведение рассмотрено в предыдущем разделе.

Согласно изложенной картине формирование лавин представляет ярко выраженное гистерезисное явление: среда, изначально находящаяся в покое, начинает движение только при наклоне, превышающем критическое значение $S_c = 1 + m$, тогда как наклон, отвечающий остановке лавины, имеет гораздо меньшее значение S_c^0 (см. (1.90), (1.91)). Максимальным образом гистерезис проявляется в пределе $\tau_S/\tau_x \rightarrow 0$, а с увеличением параметра адиабатичности $\delta \equiv \tau_S/\tau_x$ петля гистерезиса сужается. Что касается использованного выше условия малости отношения $\tau_y/\tau_x \equiv \epsilon$, то его рост приводит к изменению фазового портрета только на стадии быстрого изменения величин, тогда как универсальный участок не изменяется (см. подраздел 1.1.2).

1.2.2 Флуктуационное формирование лавины

Исследуем влияние аддитивных шумов на составляющие скорости u , v и наклон S . С этой целью введем в правые части уравнений (1.80) — (1.82) стохастические слагаемые $I_u^{1/2}\xi$, $I_v^{1/2}\xi$, $I_S^{1/2}\xi$ (здесь интенсивности I_u , I_v , I_S измерены в единицах $(\tau_x/\tau_y)(D/\tau_S)$, $a^2(\tau_x/\tau_y)(D/\tau_S)$, $a^2(\tau_x/\tau_y)$ соответственно; $\xi(t)$ — δ -коррелированная стохастическая переменная) [40]. Тогда в

рамках адиабатического приближения уравнения (1.81), (1.82) приводят к временным зависимостям:

$$v(t) = \bar{v} + \tilde{v}\xi(t), \quad S(t) = \bar{S} + \tilde{S}\xi(t); \quad (1.92)$$

$$\begin{aligned} \bar{v} &\equiv S_e u d(u), & \tilde{v} &\equiv \sqrt{I_v + I_S u^2} d(u), \\ \bar{S} &\equiv S_e d(u), & \tilde{S} &\equiv \sqrt{I_S + I_v u^2} d(u), & d(u) &\equiv (1 + u^2)^{-1}. \end{aligned} \quad (1.93)$$

В этих уравнениях детерминистические составляющие сводятся к равенствам (1.83), а флуктуационные следуют из известного свойства аддитивности дисперсий гауссовских случайных величин [40]. Таким образом, синергетический принцип соподчинения преобразует аддитивные шумы вертикальной составляющей скорости v и наклона S в мультипликативные. В результате выражения (1.80), (1.92), (1.93) приводят к уравнению Ланжевена

$$\dot{u} = f(u) + \sqrt{I(u)} \xi(t), \quad f \equiv -\frac{\partial E}{\partial u}, \quad (1.94)$$

где сила f задается энергией E , определяемой равенством (1.85), а эффективная интенсивность шума выражается равенством

$$I(u) \equiv I_u + (I_v + I_S u^2) d^2(u), \quad (1.95)$$

следующим из указанного свойства аддитивности интенсивностей шумов. Во избежание недоразумений следует отметить, что подстановка равенств (1.92), (1.93) в (1.80) приводит к стохастической добавке

$$\left[I_u^{1/2} + \left(I_v^{1/2} + I_S^{1/2} u \right) d(u) \right] \xi(t), \quad (1.96)$$

квадрат амплитуды которой отличается от эффективной интенсивности шума (1.95). Более того, непосредственное использование адиабатического приближения в уравнениях (1.81), (1.82) дает флуктуационные добавки зависимостей (1.92) в виде $\tilde{v} \equiv (I_v^{1/2} + I_S^{1/2} u) d(u)$, $\tilde{S} \equiv (I_S^{1/2} - I_v^{1/2} u) d(u)$, отличающемся от выражений (1.93). Последняя из этих добавок явно нефизическая, поскольку дает полную компенсацию флуктуаций наклона \tilde{S} при горизонтальной составляющей

скорости $u = \sqrt{I_S/I_v}$. Формальной причиной указанного противоречия является неприменимость обычных методов анализа к уравнению Ланжевена [40].

Уравнение Ланжевена (1.94) имеет набор случайных решений, распределение по которым задается соответствующим уравнением Фоккера-Планка:

$$\frac{\partial P(u, t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial u} \left\{ -f(u)P(u, t) + \frac{\partial}{\partial u} [I(u)P(u, t)] \right\}. \quad (1.97)$$

В стационарном состоянии вероятность распределения $P(u, t)$ не зависит от времени, и выражение, стоящее в фигурных скобках правой части (1.97), сводится к нулю. В результате приходим к стационарному распределению

$$P(u) = Z^{-1} \exp\{-U(u)\}, \quad (1.98)$$

где Z — нормировочная постоянная. Эффективная энергия

$$U(u) = \ln I(u) - \int_0^u \frac{f(u')}{I(u')} du', \quad f \equiv -\frac{\partial E}{\partial u}, \quad (1.99)$$

определяется затравочным значением (1.85) и интенсивностью шума (1.95). Комбинируя эти выражения, можно найти явный вид зависимости $U(u)$, однако она весьма громоздка, чтобы приводить ее здесь. Уравнение, определяющее положение экстремумов этой зависимости и задаваемого ею распределения $P(u)$, имеет вид

$$x^3 - S_e x^2 - 2I_S x + 4(I_S - I_v) = 0, \quad x \equiv 1 + u^2. \quad (1.100)$$

Таким образом, вид распределения $P(u)$ не зависит от интенсивности шума I_u горизонтальной составляющей скорости u и определяется величиной наклона S_e и интенсивностями шумов I_v, I_S вертикальной составляющей v и наклона S . Поэтому без потери общности можно положить $I_u = 0$, и равенства (1.85), (1.95), (1.99) приводят к выражению для эффективной энергии

$$U(u) = \frac{1}{2} \left[\frac{u^4}{2} + (2 - S_e - i)u^2 + (1 - i)(1 - S_e - i) \ln(i + u^2) \right] + I_S \ln[g_S^2(u) + i g_v^2(u)], \quad i \equiv I_v / I_S. \quad (1.101)$$

Согласно (1.100) эффективная энергия (1.101) имеет минимальное значение в точке $u=0$, если наклон S_e не превышает критическое значение

$$S_c = 1 + 2I_S - 4I_v, \quad (1.102)$$

которое возрастает с увеличением интенсивности флуктуаций наклона и уменьшается с ростом интенсивности флуктуаций вертикальной скорости. При этом песок покоится. Условия образования лавины легко найти в простом случае $I_v = 0$, когда горизонтальная скорость приобретает вид

$$u_{\pm}^2 = \frac{1}{2} \left[S_e - 3 + \sqrt{(3 - S_e)^2 + 4(2S_e - 3 + 2I_S)} \right], \quad (1.103)$$

вытекающий из (1.100) после исключения корня $u^2 = 0$. Минимальное значение этой скорости

$$u_c^2 = \frac{1}{2} \left[(S_e - 3) - \sqrt{(S_e + 7)(S_e - 1)} \right] \quad (1.104)$$

достигается на прямой (1.102), где $I_v = 0$. При $S_e < 4/3$ корни u_c являются комплексными, а при $S_e > 4/3$ — действительными, причем $u_+ = -u_-$. Таким образом, в критической точке

$$S_e = 4/3, \quad I_S = 1/6 \quad (1.105)$$

происходит образование лавины. При выполнении условия (1.102) корень $u = 0$ отвечает минимуму эффективной энергии (1.101) для $S_e < 4/3$, тогда как при $S_e > 4/3$ он соответствует максимуму, а корни u_{\pm} — симметричным минимумам.

Найдем условия существования корней u_{\pm} . Полагая дискриминант уравнения (1.100) равным нулю, получаем выражения:

$$I_S = 0, \quad I_S^2 - I_S \left[\frac{27}{2} \left(1 - \frac{S_e}{3} \right) - \frac{S_e^2}{8} \right] + \frac{S_e^3}{2} = 0, \quad (1.106)$$

последнее из которых дает зависимость

$$2I_S = \left[\frac{27}{2} \left(1 - \frac{S_e}{3} \right) - \frac{S_e^2}{8} \right] \pm \left\{ \left[\frac{27}{2} \left(1 - \frac{S_e}{3} \right) - \frac{S_e^2}{8} \right]^2 - 2S_e^3 \right\}^{1/2}. \quad (1.107)$$

Она отвечает колоколообразной кривой $S_e(I_S)$, которая пересекает горизонтальную ось в точках $I_S = 0$ и $I_S = 27/2$ и имеет максимальное значение $S_e = 2$ при

$$I_S = 2. \quad (1.108)$$

При $I_v = 0$ эта кривая касается прямой (1.102) в точке (1.105).

Рассмотрим теперь общий случай, когда существенными оказываются оба мультипликативных шума — $I_v, I_S \neq 0$. При этом величины I_S, S_e, u^2, U заменяются перенормированными значениями $\tilde{I} \equiv I_S/a^2, \tilde{S}_e \equiv S_e/a, \tilde{u}^2 = (1 + u^2)/a - 1, \tilde{U}/\tilde{I}$, где $a = 1 - i$; $i \equiv I_v/I_S < 1$. В результате действие шума вертикальной скорости v сводится к перенормировке экстремального значения горизонтальной составляющей u величиной $(a^{-1} - 1)^{1/2}$ так, что область расхожимости $\tilde{u} \approx 0$ становится недоступной.

С учетом указанных замен условие экстремума обобщенной энергии (1.101) приводит к равенству $u = 0$ и уравнению (1.100). Его анализ показывает, что условие существования нулевого решения определяется выражением (1.102), а трикритическая точка имеет координаты

$$S_e = \frac{4}{3}(1 - I_v), \quad I_S = \frac{1}{6}(1 + 8I_v). \quad (1.109)$$

При фиксированных значениях интенсивности I_v фазовая диаграмма имеет вид, показанный на рис. 1.13, где линии 1, 2 отвечают потере устойчивости системы (выше прямой 1 — устойчиво потоковое состояние, ниже кривой 2 — равновесное, а между ними расположена двухфазная область). При $I_v < 1/4$ ситуация подобна случаю $I_v = 0$: лавина возникает только при флуктуациях наклона I_S , превышающих критическое значение (см. рис. 1.13а). С ростом флуктуаций вертикальной скорости до $I_v > 1/4$ ситуация изменяется коренным образом: даже в отсутствие флуктуаций наклона I_S становится возможным спонтанное образование лавины (см. рис. 1.13б). Согласно (1.109) трикритическая точка попадает на ось I_S при интенсивности $I_v = 1$, а с превышением критического значения $I_v = 2$ стационарное состояние равновесия вообще пропадает (рис. 1.13с).

Проведенное рассмотрение показывает, что диссипативная динамика течения песка по наклонной поверхности представляется схемой Лоренца, в рамках которой горизонтальная и вертикальная со-

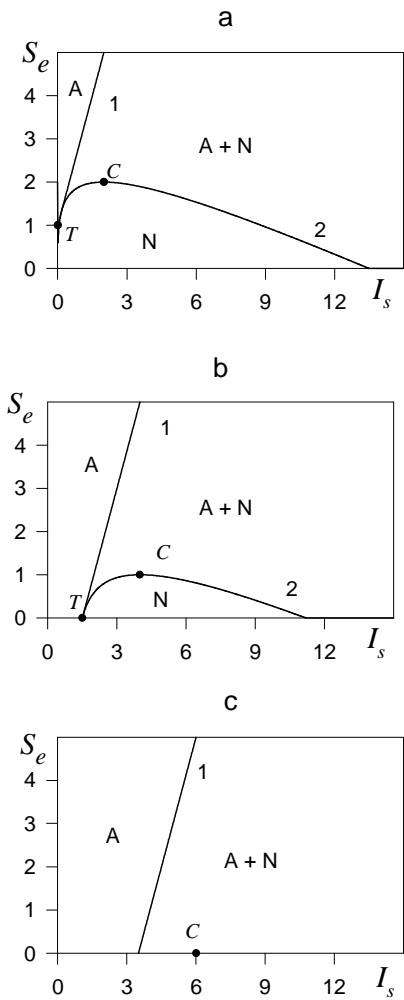


Рисунок 1.13 — Фазовые диаграммы при постоянных значениях I_v : а — $I_v = 0$; б — $I_v = 1$; в — $I_v = 2$. Кривые 1 и 2 определяют границы устойчивости равновесного (N) и потокового (A) состояний

ставляющие скорости играют роль параметра порядка и сопряженного поля, а наклон поверхности является управляющим параметром. Исследование, проведенное в подразделе 1.2.1, показывает, что для формирования лавины в отсутствие шума наклон y'_c , задаваемый внешними условиями, должен превышать критическое значение

$$y'_c = (\tau_x \tau_y)^{-1/2} \gamma. \quad (1.110)$$

В результате наиболее предрасположенными к образованию стационарной лавины оказываются сыпучие среды, обладающие малыми значениями кинетического коэффициента γ и большими временами релаксации τ_x , τ_y скорости течения. В отсутствие шума формирование лавины представляет фазовый переход, обусловленный внешним воздействием, которое обеспечивает наклон, превышающий значение (1.110).

При включении аддитивных шумов стохастическое влияние горизонтальной скорости оказывается несущественным, а флуктуации вертикальной скорости и наклона приобретают мультипликативный характер. Для безразмерных интенсивностей шумов граница области образования лавин задается равенством

$$I_S = -\frac{1}{2} + 2I_v, \quad (1.111)$$

следующим из (1.100) при $x = 1$ ($u = 0$) и $S_e = 0$. Таким образом, в отсутствие флуктуаций наклона лавина образуется, если интенсивность шума вертикальной скорости превышает значение

$$I_{v0} = \frac{1}{4} \frac{D\gamma^2}{\tau_x \tau_y \tau_S}, \quad (1.112)$$

отвечающее точке O на рис. 1.14. В общем случае формированию лавины способствуют флуктуации как вертикальной скорости, так и наклона поверхности песка, интенсивности которых ограничены условием (1.111). Смешанное состояние возникает при достижении значений:

$$I_{v1} = \frac{D\gamma^2}{\tau_x \tau_y \tau_S}, \quad I_{S1} = \frac{3}{2} \frac{\gamma^2}{\tau_x \tau_y}, \quad (1.113)$$

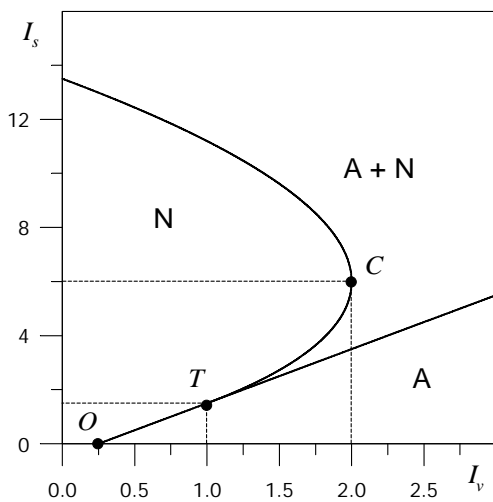


Рисунок 1.14 — Фазовая диаграмма при $S_e = 0$ и $I_s, I_v \neq 0$
 (T — трикритическая точка; C — критическая точка)

отвечающих трикритической точке T на рис. 1.14. Если же интенсивность шума вертикальной скорости превышает еще большее значение

$$I_{v2} = 2 \frac{D\gamma^2}{\tau_x \tau_y \tau_S}, \quad (1.114)$$

соответствующее флуктуациям наклона $I_{S2} = 6\gamma^2/\tau_x \tau_y$ (точка C на рис. 1.14), то устойчивое состояние равновесия становится невозможным.

Следует иметь в виду, что режим СОК отвечает скорее не токовому состоянию, а перемежаемости в образовании и коллапсе лавин, которой соответствует область сосуществования фаз N и A , представляющих равновесное и потоковое состояния на рис. 1.13, 1.14. Согласно проведенному анализу указанная перемежаемость реализуется в области, ограниченной прямой (1.111) и кубической параболой:

$$I_v = I_S \left[1 - \left(\frac{2}{27} \right)^{1/2} \sqrt{I_S} \right], \quad (1.115)$$

где использованы безразмерные величины I_v , I_S . Соответствующая фазовая диаграмма, показанная на рис. 1.14, имеет весьма нетривиальный вид (особенно в области $I_{v1} \leq I_v \leq I_{v2}$).

1.2.3 Дробная система Лоренца

Для дальнейшего исследования самоорганизующейся системы следует найти распределение вероятности (1.98), вид которого определяется эффективной энергией (1.99). В случае $I_u, I_S \ll I_v$ получаем выражение

$$P(u) \approx I_v^{-1} (1 + u^2)^2 \exp \left\{ I_v^{-1} \int f(u) (1 + u^2)^2 du \right\},$$

$$f(u) \equiv -u + S_e u / (1 + u^2), \quad (1.116)$$

существенно отличное от однородной функции (1.71), отвечающей самоподобной системе. Флуктуации наклона $I_S \gg I_u, I_v$ приводят

к распределению требуемого вида:

$$P(u) \approx I_S^{-1} \left(\frac{1+u^2}{u} \right)^2 \exp \left\{ I_S^{-1} \int \frac{f(u)(1+u^2)^2}{u^2} du \right\} \sim u^{-2}. \quad (1.117)$$

Таким образом, рост интенсивности флуктуаций наклона приводит к установлению самоподобного режима, которому отвечает однородная функция, характеризуемая целым показателем 2.

Однако в общем случае этот показатель должен быть не целым, а дробным (так, в распределении (1.71) имеем $\tau \approx 3/2$). Во избежание такого ограничения заменим параметр порядка u в нелинейных слагаемых уравнений (1.80) — (1.82) степенным множителем u^a с показателем $0 \leq a \leq 1$. Тогда с учетом стохастических добавок основные уравнения принимают вид:

$$\begin{aligned} \dot{u} &= -u + v + \sqrt{I_u} \xi(t), \\ \epsilon \dot{v} &= -v + u^a S + \sqrt{I_v} \xi(t), \\ \delta \dot{S} &= (S_e - S) - u^a v + \sqrt{I_S} \xi(t), \end{aligned} \quad (1.118)$$

где использованы безразмерные переменные. Физический смысл проведенной замены состоит в том, требование самоподобия достигается в рамках предположения о дробном характере положительной и отрицательной обратных связей. Тогда условие адиабатичности $\epsilon, \delta \ll 1$ немедленно приводит к уравнению Ланжевена (ср. с (1.94))

$$\dot{u} = f_a(u) + \sqrt{I_a(u)} \xi(t), \quad (1.119)$$

где сила $f_a(u)$ и интенсивность шума $I_a(u)$ определяются равенствами:

$$\begin{aligned} f_a(u) &\equiv -u + S_e u^a d_a(u), \\ I_a(u) &\equiv I_u + (I_v + I_S u^{2a}) d_a^2(u), \quad d_a(u) \equiv (1 + u^{2a})^{-1}. \end{aligned} \quad (1.120)$$

Соответствующее распределение (ср. с (1.98))

$$P_a(u) = \frac{Z^{-1}}{I_a(u)} \exp \{ -E_a(u) \}, \quad (1.121)$$

где Z — статистическая сумма, задается эффективным потенциалом

$$E_a(u) \equiv - \int_0^u \frac{f_a(u')}{I_a(u')} du'. \quad (1.122)$$

Точки экстремума этого распределения определяются уравнением:

$$2aI_S u^{2a} + (1+u^{2a})^2 u^{1-a} [S_e - u^{1-a} (1+u^{2a})] = 2a(I_S - 2I_v), \quad (1.123)$$

согласно которому граница области образования лавин

$$I_S = 2I_v \quad (1.124)$$

отвечает условию $u = 0$. Критические значения параметров состояния определяются условием $|\frac{du}{dS_e}| = \infty$, приводящим к уравнению:

$$\begin{aligned} u^{2(1-a)} (1+u^{2a})^2 [(2+a^{-1}) + (a^{-1}-1) u^{-2a}] - \\ \frac{1}{2} S_e u^{1-a} (1+u^{2a}) [(3+a^{-1}) + (a^{-1}-1) u^{-2a}] = 2aI_S. \end{aligned} \quad (1.125)$$

Выражения (1.123) — (1.125) обобщают равенства (1.100), (1.111), (1.115), отвечающие случаю $a = 1$.

Анализ приведенных выражений показывает, что результаты подраздела 1.2.2, где $a = 1$, мало изменяются при переходе к общему случаю $0 \leq a \leq 1$. Наиболее существенное изменение наблюдается для зависимости стационарной скорости u_0 от наклона S_e : с уменьшением показателя $a < 1$ значение u_0 становится отличным от нуля на всем интервале изменения S_e (см. рис. 1.15). Увеличение интенсивности шума вертикальной скорости I_v приводит к монотонному росту u_0 , тогда как при возрастании I_S образуется барьер вблизи точки $u = 0$. При этом зависимость $u_0(S_e)$ теряет монотонный вид при значениях I_S , отвечающих области выше прямой (1.124) (см. рис. 1.16). Как и в отсутствие шума (рис. 1.7), нижние ветви кривых отвечают неустойчивым значениям параметра порядка, а верхние — устойчивым. Согласно рис. 1.17 область отсутствия лавин расположена при промежуточных значениях параметров состояния S_e, I_v, I_S . Фазовая диаграмма, определяющая состояния системы в

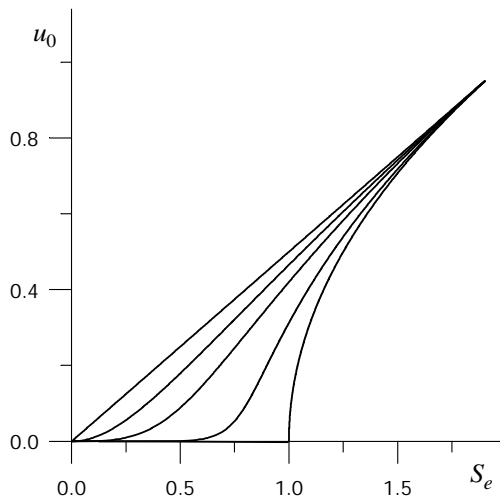


Рисунок 1.15 — Зависимость стационарной скорости u_0 от параметра S_e при $\alpha = 0; 0.5; 0.7; 0.9; 1.0$ (соответствующие кривые расположены сверху вниз)

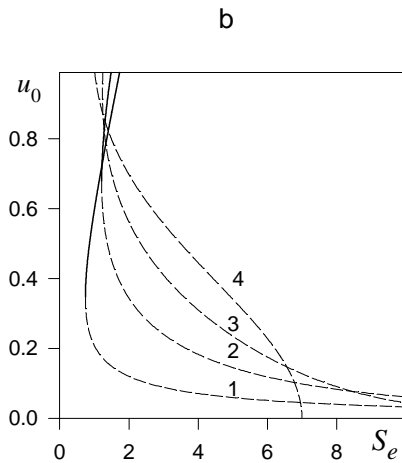
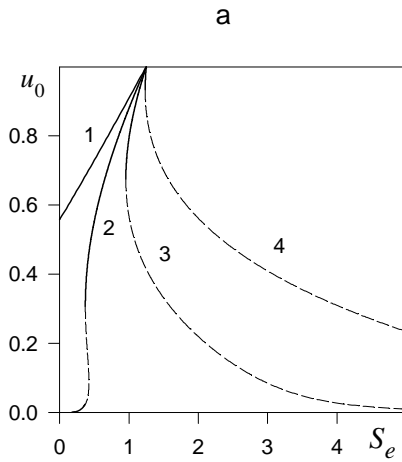


Рисунок 1.16 — Зависимость стационарной скорости u_0 от параметра S_e :
 а — при $a = 0.75$, $I_v = 1$ (кривые 1 — 4 соответствуют $I_S = 1, 2, 3, 5$);
 б — при $I_v = 1$, $I_S = 5$ (кривые 1 — 4 отвечают $a = 0.25; 0.5; 0.75; 1.0$)

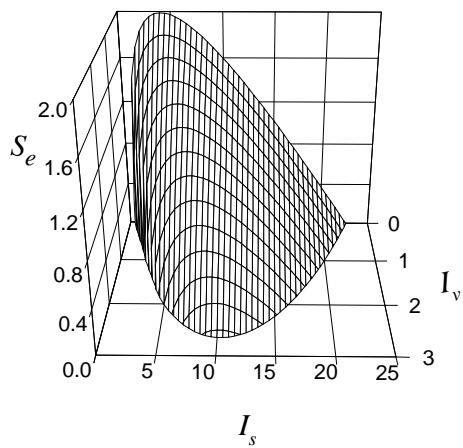


Рисунок 1.17 — Трехмерная фазовая диаграмма (область отсутствия лавин расположена под поверхностью)

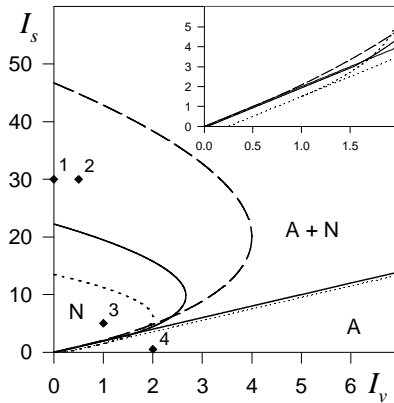


Рисунок 1.18 — Фазовая диаграмма системы при $S_e = 0$, $I_s, I_v \neq 0$, $a = 0.5; 0.75; 1.0$ (пунктирная, сплошная и штриховая кривые соответственно). Точки отвечают кривым 1 — 4 на рис. 1.20

зависимости от интенсивностей шумов I_v, I_s , имеет вид, подобный случаю $a = 1$, однако при $a \neq 1$ прямая (1.111) трансформируется в (1.124) (ср. рис. 1.18 и 1.14). Согласно рис. 1.19 рост шума вертикальной скорости I_v увеличивает область образования лавин.

1.2.4 Самоподобное распределение лавин

Выше мы исследовали процесс формирования одиночной лавины. Перейдем теперь к рассмотрению самоподобного ансамбля лавин, характеризуемого распределением (1.71). Следуя методу, изложенному в подразделе 1.2.2, мы будем учитывать шумы всех степеней свободы, а также дробную обратную связь, введенную в подразделе 1.2.3. Основой нашего рассмотрения является система Лоренца, однако теперь синергетические параметры характеризуют не сыпучую среду, а ансамбль лавин, который в рамках подхода Эдвардса [36],

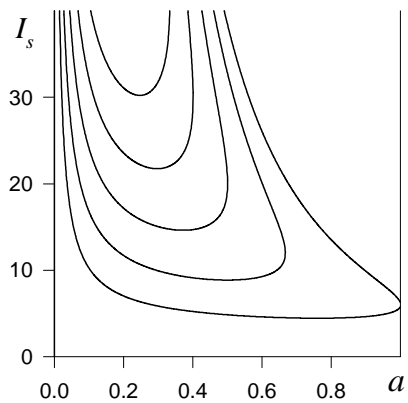


Рисунок 1.19 — Фазовая диаграмма в плоскости $I_S - a$ при $I_v = 2; 3; 4; 5; 6$
 (соответствующие кривые, ограничивающие область отсутствия лавин,
 расположены снизу вверх)

[37], обобщенного на неаддитивную систему, представляется по аналогии с термодинамической системой. Это позволяет описать изменение размера лавины, неаддитивной сложности (complexity) и кинетической энергии сыпучей среды. В рамках синергетического подхода указанные степени свободы играют роль параметра порядка, сопряженного поля и управляющего параметра соответственно.

Предыдущее рассмотрение показывает, что синергетический принцип соподчинения и дробный характер обратной связи обуславливают мультипликативный характер шума. Далее мы увидим, что это является причиной неаддитивности термодинамической системы, так что, следуя Цаллису [38], необходимо производить усреднение со степенью $q \neq 1$. Так, кинетическая энергия движения среды определяется выражением

$$\zeta_q \equiv \sum_i \zeta_i p_i^q, \quad (1.126)$$

где p_i — вероятность движения i -й частицы с энергией ζ_i ; $q \neq 1$ — положительный параметр Цаллиса. Мерой беспорядка является сложность (complexity) системы, которая по аналогии с энтропией Цаллиса [38] задается равенством

$$\Sigma_q \equiv -\frac{\sum_i p_i^q - 1}{q - 1}. \quad (1.127)$$

Последним параметром, замыкающим полный набор степеней свободы синергетической системы, является размер лавины s .

Следуя неоднократно использованной схеме Лоренца, представим самосогласованное поведение системы набором уравнений (ср. с (1.118)):

$$\begin{aligned} \tau_s \dot{s} &= -s + a_s \Sigma_q + \sqrt{I_s} \xi(t), \\ \tau_\Sigma \dot{\Sigma}_q &= -\Sigma_q + a_\Sigma s^{\tau/2} \zeta_q + \sqrt{I_\Sigma} \xi(t), \\ \tau_\zeta \dot{\zeta}_q &= (\zeta^e - \zeta_q) - a_\zeta s^{\tau/2} \Sigma_q + \sqrt{I_\zeta} \xi(t). \end{aligned} \quad (1.128)$$

Здесь $\tau_s, \tau_\Sigma, \tau_\zeta$ — времена релаксации соответствующих величин, a_s, a_Σ, a_ζ — положительные параметры обратной связи, I_s, I_Σ, I_ζ — соответствующие интенсивности шума, τ — положительный показатель, ζ^e — кинетическая энергия, задаваемая внешним воздействием. Характерная особенность первого из этих уравнений состоит в

том, что оно приводит к линейной связи между размером лавины s и сложностью Σ_q в отсутствие шума. С другой стороны, два последних уравнения (1.128) содержат нелинейные связи между термодинамическими величинами ζ_q , Σ_q и размером лавины s . С удалением от стационарного состояния отрицательная обратная связь размера лавины и сложности с энергией приводит, в соответствии с принципом Ле–Шателье, к уменьшению энергии. С другой стороны, положительная связь размера лавины и энергии со сложностью обуславливает рост последней, что, в свою очередь, является причиной самоорганизации ансамбля лавин.

Переходя к анализу системы (1.128), удобно ввести безразмерные величины, относя время t к масштабу τ_s , а переменные s , Σ_q , ζ_q , I_s , I_Σ , I_ζ к значениям:

$$s^{sc} \equiv (a_\Sigma a_\zeta)^{-\frac{1}{\tau}}, \quad \Sigma_q^{sc} \equiv a_s^{-1} (a_\Sigma a_\zeta)^{-\frac{1}{\tau}}, \quad \zeta_q^{sc} \equiv a_s^{-1} a_\Sigma^{-(\frac{1}{\tau} + \frac{1}{2})} a_\zeta^{-(\frac{1}{\tau} - \frac{1}{2})};$$

$$I_s^{sc} \equiv (a_\Sigma a_\zeta)^{-\frac{2}{\tau}}, \quad I_\Sigma^{sc} \equiv a_s^{-2} (a_\Sigma a_\zeta)^{-\frac{2}{\tau}}, \quad I_\zeta^{sc} \equiv a_s^{-2} a_\Sigma^{-(\frac{2}{\tau} + 1)} a_\zeta^{-(\frac{2}{\tau} - 1)} \quad (1.129)$$

соответственно. В результате система (1.128) принимает вид:

$$\begin{aligned} \dot{s} &= -s + \Sigma_q + \sqrt{I_s} \xi(t), \\ \vartheta \dot{\Sigma}_q &= -\Sigma_q + s^{\tau/2} \zeta_q + \sqrt{I_\Sigma} \xi(t), \\ \theta \dot{\zeta}_q &= (\zeta^e - \zeta_q) - s^{\tau/2} \Sigma_q + \sqrt{I_\zeta} \xi(t), \end{aligned} \quad (1.130)$$

где введены отношения времен релаксации:

$$\vartheta \equiv \tau_\Sigma / \tau_s, \quad \theta \equiv \tau_\zeta / \tau_s. \quad (1.131)$$

Равенства (1.130) принимают вид (1.118) при замене величин s , Σ_q , ζ_q , $\tau/2$, ϑ , θ на u , v , S , a , ϵ , δ соответственно.

Как известно [25], системы, проявляющие режим СОК, подразделяются на два больших класса: детерминистические системы, подверженные случайному воздействию внешней среды (сюда относятся модели движения межфазной границы в случайной среде, модель эволюции Бэка–Снеппена и т. п.), и системы со стохастической динамикой (землетрясения, лесные пожары и т. п.) Использование уравнений (1.130) позволяет естественным образом представить оба указанных класса. Как видно из анализа, проведенного в подразделе

1.1.3, первый из этих классов реализуется в отсутствие флуктуаций ($I_s, I_\Sigma, I_\zeta = 0$) при условии, что время релаксации управляющего параметра (энергии) превосходит соответствующие времена других степеней свободы (сложности и размера лавины): $\tau_\zeta \geq \tau_\Sigma, \tau_s$; кроме того, параметр внешнего воздействия ζ^e должен превосходить критическое значение $\zeta_c = 1$. Тогда система (1.130) представляет странный аттрактор, отвечающий режиму СОК первого класса. Включение флуктуаций ($I_s, I_\Sigma, I_\zeta \neq 0$) обеспечивает стохастическое поведение, которое даже в отсутствие внешнего воздействия ($\zeta^e = 0$) может вызвать самоорганизацию. Таким образом, этот случай отвечает режиму СОК второго класса.

Учитывая, что проблема странного аттрактора Лоренца хорошо исследована [13], ограничимся рассмотрением стохастической системы, для которой справедливы адиабатические условия $\vartheta, \theta \ll 1$. Тогда два последних уравнения (1.130) приводят к зависимостям (ср. с (1.92)):

$$\Sigma_q(t) = \bar{\Sigma}_q + \tilde{\Sigma}_q \xi(t), \quad \zeta_q(t) = \bar{\zeta}_q + \tilde{\zeta}_q \xi(t), \quad (1.132)$$

где детерминистические и флуктуационные составляющие определяются равенствами типа (1.93):

$$\begin{aligned} \bar{\Sigma}_q &\equiv \zeta^e s^{\tau/2} d_\tau(s), & \tilde{\Sigma}_q &\equiv \sqrt{I_\Sigma + I_\zeta s^\tau} d_\tau(s); \\ \bar{\zeta}_q &\equiv \zeta^e d_\tau(s), & \tilde{\zeta}_q &\equiv \sqrt{I_\zeta + I_\Sigma s^\tau} d_\tau(s), & d_\tau(s) &\equiv (1 + s^\tau)^{-1}. \end{aligned} \quad (1.133)$$

Благодаря действию синергетического принципа соподчинения флуктуации сложности и энергии, изначально имеющие аддитивный характер, становятся мультипликативными. Использование детерминистических составляющих сложности и энергии позволяет увидеть, что эффективная температура Эдвардса $T \equiv \partial \bar{\zeta}_q / \partial \bar{\Sigma}_q$ принимает отрицательные значения (см. подраздел 1.3.1).

Приведенный режим самоорганизации отвечает обычному фазовому переходу системы, подверженной внешнему воздействию $\zeta^e > \zeta_c$. Для представления режима СОК подставим равенства (1.132), (1.133) в первое уравнение (1.130), что приводит к уравнению Ланжевена типа (1.94). Тогда в полной аналогии с рассмотрением, про-

веденным в подразделе 1.2.3, приходим к стохастическому уравнению (1.119), в котором эффективная сила и интенсивность шума задаются равенствами (1.120), где вместо u , v , S , a следует взять s , Σ_q , ζ_q , $\tau/2$ соответственно. Таким образом, приходим к выводу, что влияние случайного разброса размеров лавин не существенно, тогда как флуктуации энергии и сложности сказываются критическим образом. Количественная картина влияния этих флуктуаций дается фазовой диаграммой, показанной на рис. 1.18, где вместо I_S , I_v следует взять интенсивности I_ζ , I_Σ , характеризующие ансамбль лавин. Режим СОК реализуется в двухфазной области А+Н, которая ограничена прямой (1.124) и колоколообразной кривой (1.115). Согласно рис. 1.19, где вместо I_S , a следует взять I_ζ , $\tau/2$, разброс сложности расширяет интервал значений τ , характеризующий распределение лавин в режиме СОК.

Явный вид этого распределения задается равенствами (1.120) — (1.122):

$$P(s) = \frac{Z^{-1}}{I(s)} \exp \left\{ \int_e^s \frac{f(s')}{I(s')} ds' \right\};$$

$$f(s) \equiv -s + \zeta^e s^{\tau/2} d_\tau(s), \quad (1.134)$$

$$I(s) \equiv I_s + (I_\Sigma + I_\zeta s^\tau) d_\tau^2(s), \quad d_\tau(s) \equiv (1 + s^\tau)^{-1}.$$

В режиме СОК энергия внешнего воздействия $\zeta^e = 0$ и распределение (1.134) принимает вид, показанный на рис. 1.20 для различных соотношений между интенсивностями флуктуаций энергии и сложности. Степенная зависимость, присущая режиму СОК, реализуется при $s \ll 1$ и $I_s, I_\Sigma \ll I_\zeta$. В этом случае распределение (1.134) сводится к каноническому виду (1.71), где функция $\mathcal{P}(s)$ имеет вид

$$\mathcal{P}(s) = \frac{d_\tau^{-2}(s)}{Z} \exp \left\{ -I_\zeta^{-1} \int_e^s \frac{d_\tau^{-2}(s')}{(s')^{\tau-1}} ds' \right\},$$

$$d_\tau(s) \equiv (1 + s^\tau)^{-1}. \quad (1.135)$$

Отличие этой функции от постоянной величины определяется оценкой $s^{2-\tau}$, которая возрастает с уменьшением показателя τ и ростом лавин до предельно большого размера $s \sim 1$, т. е. в области,

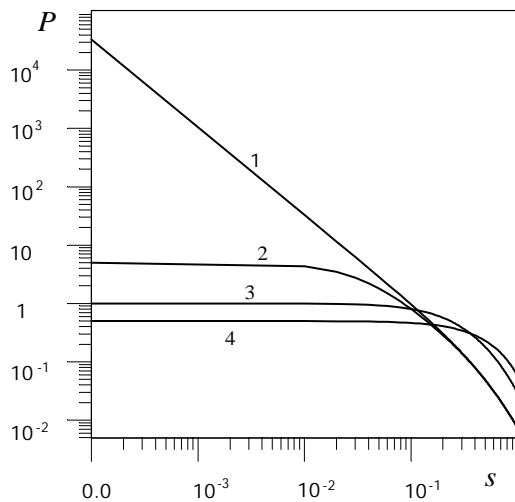


Рисунок 1.20 — Функция распределения (1.134) при $\tau = 1.5$ и режимах, показанных точками на рис. 1.18: 1 — $I_v = 0$, $I_S = 30$ (СОК); 2 — $I_v = 0.5$, $I_S = 30$ (А+Н); 3 — $I_v = 1$, $I_S = 5$ (Н); 4 — $I_v = 2$, $I_S = 0.5$ (А)

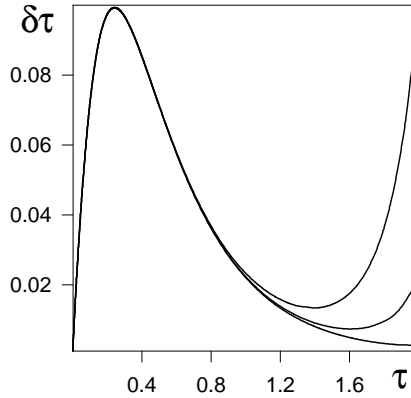


Рисунок 1.21 — Отклонение $\delta\tau$ наклона кривой 1 в линейной области на рис. 1.20 от показателя τ в зависимости от его значения (интенсивности $I_S = 10, 50, 10^3$ отвечают кривым, расположенным снизу вверх)

удаленной от режима СОК. Количественным образом это выражает рис. 1.21, где показана разность $\delta\tau$ между наклоном зависимости (1.134) в линейной области и самим параметром τ при разных его значениях. В соответствии с приведенной оценкой отклонение $\delta\tau$ принимает максимальное значение $\delta\tau < 10^{-1}\tau$ только при малых значениях параметра $\tau < 1$ и больших интенсивностях шума $I_S \sim 10^3$.

1.2.5 Неаддитивный ансамбль лавин

Характерная особенность функции (1.135) состоит в том, что в случае $s \ll 1$, $I_s, I_\Sigma \ll I_\zeta$, отвечающем режиму СОК, она выражается

через интеграл $\mathcal{I}_{-s}^{2-\tau}$ дробного порядка $2 - \tau$ (см. приложение А):

$$\mathcal{P}(s) = \frac{d_{\tau}^{-2}(s)}{Z} \exp \left\{ - \frac{\Gamma(2 - \tau)}{I_{\zeta}} \mathcal{I}_{-s}^{2-\tau} d_{\tau}^{-2}(s) \right\}, \quad (1.136)$$

где $\Gamma(x)$ — гамма-функция. С другой стороны, известно [39], что выражение такого типа представляется решением дробного уравнения Фоккера–Планка

$$\mathcal{D}_t^{\omega} \mathcal{P}(s, t) = \mathcal{D}_{-s}^{\varpi} \left\{ s \mathcal{P}(s, t) + \frac{I_{\zeta}}{\Gamma(\varpi)} \mathcal{D}_{-s}^{\varpi} [d_{\tau}^2 \mathcal{P}(s, t)] \right\}, \quad (1.137)$$

где дробная производная \mathcal{D}_x^{ϖ} (см. (А.4)) представляет операцию, обратную дробному интегралу (А.3). Умножая равенство (1.137) на $s^{2\varpi}$ и усредняя по s , для средней величины дробного порядка α

$$|s| \equiv \langle s^{\alpha} \rangle^{\frac{1}{\alpha}}, \quad \langle s^{\alpha} \rangle \equiv \int_{-\infty}^{\infty} s^{\alpha} \mathcal{P}(s, t) ds, \quad \alpha > 0, \quad (1.138)$$

получаем

$$|s|^z \sim t, \quad z = \frac{2\varpi}{\omega}, \quad (1.139)$$

где $\alpha \equiv 2\varpi$; z — динамический показатель. Здесь мы учли только диффузионный вклад, который играет определяющую роль в пределе больших времен. Комбинирование равенств (1.136), (1.139) и (А.3) приводит к соотношениям $2 - \tau = \varpi = z\omega/2$, согласно которым

$$\tau = 2 - \frac{z\omega}{2}. \quad (1.140)$$

Сравнивая это выражение с (1.72), получаем

$$\omega z = \frac{4}{D}. \quad (1.141)$$

Приближение среднего поля приводит к значениям $\omega = 1$, $D = 4$, отвечающим динамическому показателю $z = 1$. Согласно определению (1.139) такой показатель означает баллистическое поведение,

совершенно отличное от режима СОК. С другой стороны, дробное уравнение Фоккера—Планка (1.137) приводит к диффузионному режиму, отвечающему $z = 2$ только при аномальном значении показателя временной производной $\omega = 1/2$.

Очевидная причина указанных противоречий состоит в неправомерном использовании обычных скейлинговых соотношений (1.72) для дробной системы Лоренца (1.130), обладающей фрактальным фазовым пространством. Для подсчета размерности этого пространства учтем, что каждой из стохастических степеней свободы s , Σ_q и ζ_q , число которых $n = 3$, отвечает сопряженный импульс, так, что гладкое фазовое пространство должно иметь размерность $D = 2n$. Такое пространство реализуется в простейшем случае отсутствия обратной связи, когда определяющий ее показатель $a = 0$ и шум является аддитивным. С ростом показателя $a > 0$, величина которого задает эффективную силу и интенсивность шума в равенствах (1.120), обратная связь усиливается, и флуктуации приобретают мультипликативный характер. Согласно [41] при этом фазовое пространство становится фрактальным, и его размерность уменьшается в $(1 - a)$ раз. В результате размерность пространства, в котором происходит эволюция самоорганизующейся системы, сводится к значению

$$D = 2n(1 - a), \quad (1.142)$$

где для системы Лоренца $n = 3$. Подстановка этого выражения в (1.141) в простейшем случае одной степени свободы ($n = 1$) и аддитивного шума ($a = 0$) дает связь $\omega z = 2$, которая в отличие от полученного выше соотношения $\omega z = 1$ приводит к результату теории среднего поля $\omega = 1$, $z = 2$. В общем случае равенства (1.140) — (1.142) дают окончательный результат

$$\tau = 2 \left[1 - \frac{1}{2n(1 - a)} \right]. \quad (1.143)$$

Соответствующие зависимости изображены на рис. 1.22а,б, из которых видно, что с ростом числа степеней свободы n показатель τ монотонно возрастает от минимального значения $\tau=1$ при $n=(1-a)^{-1}$ до максимального $\tau = 2$ в пределе $n \rightarrow \infty$; при этом рост показателя

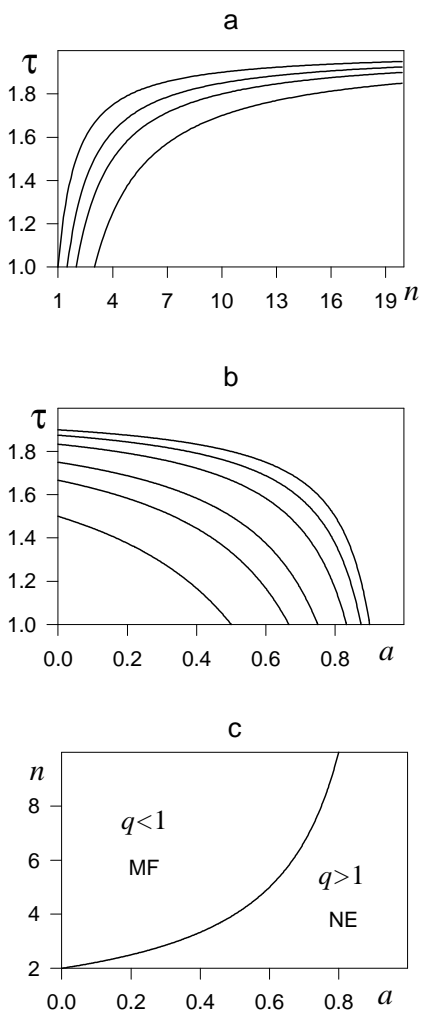


Рисунок 1.22 — Зависимости показателя τ : а — от числа уравнений n (значения $a = 0, \frac{1}{3}, \frac{1}{2}, \frac{2}{3}$ отвечают кривым, расположенным сверху вниз); б — от показателя a (значения $n = 2, 3, 4, 6, 8, 10$ отвечают кривым, расположенным снизу вверх); с — фазовая диаграмма, определяющая области применимости теории среднего поля (MF) и неаддитивности (NE)

a смещает зависимость $\tau(n)$ в область больших n , уменьшая величину τ .

Из этого видно, что равенство (1.143) позволяет воспроизвести результаты различных подходов (см. [42]). Теории среднего поля отвечает показатель $\tau = 3/2$, и равенство (1.143) выражает число самосогласованных стохастических уравнений, необходимых для представления СОК при различных значениях показателя обратной связи:

$$n = \frac{2}{1 - a}. \quad (1.144)$$

Согласно рис. 1.22с это число неограниченно нарастает от минимального значения $n_c = 2$, отвечающего отсутствию связи и аддитивному шуму ($a = 0$). Такой случай рассматривался в работах [20] — [22], [25], [34], где использовалось двухпараметрическое представление самоорганизующейся системы. Включение обратной связи приводит к конечному значению $a > 0$, и нетривиальное представление СОК требует увеличения числа необходимых степеней свободы: так, полевая схема [26], представляющая проблему направленной перколяции ($a = 1/2$), воспроизводит результаты теории среднего поля при размерностях, превышающих критическое значение $d_c = 4$; нетривиальное использование системы Лоренца ($n = 3$) [7], [43] требует более слабой обратной связи $a = 1/3$ (см. ниже).

Рассмотрим теперь связь введенных показателей с параметром неаддитивности q , задающим выражения (1.126), (1.127) [38]. Эволюция неаддитивной системы представляется нелинейным уравнением Фоккера—Планка

$$\mathcal{D}_t^\omega P(s, t) = \mathcal{D}_{-s}^2 P^q(s, t), \quad (1.145)$$

где показатели $\omega > 0$, $q > 0$ не являются целыми, а \mathcal{D}_t^ω — дробная производная и единицы измерения выбраны таким образом, чтобы избавиться от эффективного коэффициента диффузии [44], [45]. Для самоподобной нормированной функции распределения:

$$P(s, t) = s_c^{-1} \mathcal{P}(x); \quad s_c \equiv s_c(t), \quad x \equiv s/s_c \quad (1.146)$$

получаем

$$s_c^q \sim t^\omega, \quad \mathcal{P}^{q-1} \sim x. \quad (1.147)$$

С другой стороны, использование дробного уравнения Фоккера-Планка (ср. с (1.137))

$$\mathcal{D}_t^\omega P(s, t) = \mathcal{D}_{-s}^{2\varpi} P(s, t) \quad (1.148)$$

приводит к зависимостям

$$s_c^{2\varpi} \sim t^\omega, \quad \mathcal{P}^{2\varpi-1} \sim x, \quad (1.149)$$

сравнение которых с (1.147) дает связь

$$q = 2\varpi. \quad (1.150)$$

Поскольку средняя величина $|s|$ в (1.138) для самоподобных систем сводится к масштабу s_c , то из равенств (1.139), (1.147) и (1.149) следует

$$q = z\omega. \quad (1.151)$$

Комбинирование этого равенства с (1.141), (1.142) приводит к окончательному выражению для параметра неаддитивности:

$$q = \frac{2}{n(1-a)}. \quad (1.152)$$

Максимальное значение $q = 2/n$ достигается в системах, не обладающих обратной связью ($a = 0$). При числе степеней свободы $n < 2$ ($n = 1$) такие системы являются субаддитивными — параметр $q > 1$ и полная энтропия составляющих термодинамической системы меньше суммы энтропий этих составляющих. Противоположная ситуация реализуется в супераддитивных системах, обладающих параметром $q < 1$, величина которого обеспечивается таким ростом числа степеней свободы $n > 2$, что становится действительной картина среднего поля. Включение обратной связи приводит к росту показателя $a > 0$, который, в свою очередь, обеспечивает увеличение параметра q . При этом граница $q = 1$ перехода от супераддитивных систем, к которым применима теория среднего поля, к субаддитивным, где она теряет силу, определяется той же зависимостью (1.144), которая определяет классическое значение показателя $\tau = 3/2$. В

частности, дробная система Лоренца теряет аддитивность, если показатель обратной связи отличается от значения $a = 1/3$.

Изложенная картина отвечает режиму супердиффузии, который обеспечивается полетами Леви, представляющими произвольные (включая бесконечные) смещения блуждающей частицы [46]. Согласно уравнению Фоккера-Планка (1.137) такой процесс характеризуется показателями $\omega = 1$ и $\varpi \leq 1$, первый из которых представляет порядок производной по времени и является целым, второй — дробную производную по координате частицы. Последний из этих показателей приводит к основной характеристике полетов Леви: динамическому показателю $z \equiv 2\varpi/\omega \leq 2$ (см. последнее из равенств (1.139)). Этот показатель определяется индексом Леви α , величина которого задает вероятность смещения \mathbf{x} :

$$p(\mathbf{x}) \sim |\mathbf{x}|^{-(D+\alpha)}, \quad (1.153)$$

где D — фрактальная размерность. Оказывается, что при $\alpha < 2$ динамический показатель z сводится к индексу Леви ($z = \alpha < 2$), а при $\alpha \geq 2$ отвечает обычной диффузии ($z = 2$) [47].

При полетах Леви блуждания совершаются непрерывно во времени, но дискретно в пространстве. Совершенно иная ситуация наблюдается в процессе субдиффузии, когда смещения частицы непрерывны, но благодаря действию ловушек происходят в дискретные моменты времени, в связи с чем показатель соответствующей производной $\omega < 1$ становится дробным. На микроскопическом уровне такой процесс может быть представлен распределением Цаллиса [38], [48]:

$$p(\mathbf{x}) \propto [1 + \beta(q-1)|\mathbf{x}|^2]^{-\frac{1}{q-1}}, \quad \beta = \text{const} > 0, \quad (1.154)$$

где параметр неаддитивности $q - 1$ задается фрактальными свойствами фазового пространства и связан с показателем Леви α равенством

$$q = 1 + \frac{2}{D + \alpha}. \quad (1.155)$$

Преимущество выражения (1.154) состоит в том, что в сравнении с экспоненциальным распределением при всех показателях $\alpha > 0$ оно

приводит к конечному значению q -взвешенного среднего Цаллиса:

$$\langle \mathbf{x}^2 \rangle_q \equiv \int \mathbf{x}^2 p^q(\mathbf{x}) d^D x, \quad (1.156)$$

где подынтегральная функция изменяется как $x^{-(1+\alpha)}$. В результате закон случайных блужданий принимает вид

$$\langle \mathbf{x}^2 \rangle_q \sim t^\omega, \quad \omega = \begin{cases} q - 1 & \alpha, q < 2, \\ 1 - (q - 1)\frac{D}{2} & \alpha \geq 2, q > 1. \end{cases} \quad (1.157)$$

В отличие от закона супердиффузии (1.149), где $\varpi < 1$, $\omega = 1$, при субдиффузии имеем обратные соотношения $\varpi = 1$, $\omega < 1$, и последнее равенство (1.139) дает динамический показатель $z > 2$.

В общем случае $\varpi, \omega \neq 1$, подстановка (1.157) в (1.151) приводит к связям

$$z = \begin{cases} \frac{q}{1 - \frac{D}{2}(q-1)} & 1 < q \leq q_D, \\ \frac{q}{q-1} & q_D \leq q \leq 2, \end{cases} \quad (1.158)$$

где введено граничное значение параметра неаддитивности

$$q_D \equiv \frac{4 + D}{2 + D}. \quad (1.159)$$

Отметим во избежание недоразумений, что в отличие от равенств (1.72), (1.140), (1.141), которые относятся как к реальному фазовому пространству, так и конфигурационному⁵⁾, полученные выше соотношения (1.157) — (1.159) отвечают только реальному фазовому пространству. Подобно ренормгрупповым методам это выражается в том, что эффективное значение (1.142) представляет геометрические свойства конфигурационного пространства, а не реальный процесс диффузии.

Ответим наконец на вопрос: почему мы везде предпочитаем использовать систему Лоренца, а не какую-либо другую схему самоорганизации (например, систему Рёсслера и т. д.)? Анализ этого вопроса посвящен раздел 1.4, где в рамках суперсимметричного поле-

⁵⁾Его оси представляют переменные уравнений движения системы.

вого подхода будет показано, что система Лоренца отвечает уравнению Ланжевена, представляющему простейшую стохастическую систему. С другой стороны, оказывается, что микроскопическое представление системы Лоренца осуществляется простейшим гамильтонианом бозон—фермионной системы. На первый взгляд может показаться, что на феноменологическом уровне роль эффективного гамильтониана может играть синергетический потенциал, зависимый от полного набора степеней свободы. Однако в классическом представлении такая зависимость не может учесть различные правила коммутации разных степеней свободы. Преимущество суперсимметричной схемы и микроскопического подхода состоит в том, что они открывают такую возможность. Укажем, что в общей постановке такая ситуация сводится к известной проблеме промежуточной статистики (см. [49]).

1.3 Синергетика самоорганизующейся системы

Использование синергетической схемы Лоренца позволило естественным образом обобщить кинетику фазового перехода (раздел 1.1) и всесторонне исследовать режим самоорганизующейся критичности (раздел 1.2). Далее мы покажем, что синергетический подход позволяет в рамках единой схемы представить термодинамику и кинетику самоорганизующихся систем. Основным препятствием к объединению синергетической и термодинамической картин является следующее обстоятельство: считается, что процесс самоорганизации, представляемый первым из этих подходов, должен приводить к уменьшению энтропии, являющейся мерой беспорядка; с другой стороны, термодинамика основывается на втором начале, согласно которому энтропия может только возрасти или оставаться постоянной. Это противоречие преодолевалось за счет предположения, что процесс самоорганизации протекает в открытой (неравновесной) подсистеме, представляющей часть закрытой системы, которая и подчиняется второму началу термодинамики. Однако пример фазовых переходов, индуцированных шумом, показывает [15], что термодинамическое превращение, реализуемое в процессе само-

организации, не всегда сводится к упорядочению (даже в широком смысле этого слова), а следовательно, и уменьшению энтропии. С другой стороны, само по себе предположение о спадании энтропии за счет открытого характера подсистемы не дает ответа о механизме самоорганизации.

Наша цель состоит в дальнейшем выяснении природы самоорганизации в связи с нарушением законов сохранения. Будет показано, что процесс термодинамической самоорганизации приводит к отрицательной температуре, росту энтропии и уменьшению внутренней энергии. Таким образом, он вовсе не сводится к упорядочению, и уместно говорить не о параметре порядка, а о внутреннем параметре, дополняющем набор термодинамических параметров состояния. Что касается процесса кинетической самоорганизации, то здесь рост внешнего воздействия приводит к уменьшению стационарного значения энтропии, означая упорядочение.

Как видно из рассмотрения, проведенного в разделах 1.1, 1.2, результатом самоорганизации является метастабильное состояние, отвечающее минимуму синергетического потенциала, в котором подсистема может находиться настолько долго, пока подвержена внешнему воздействию. Характерная особенность синергетического состояния состоит в том, что оно стационарно, но неравновесно. В зависимости от условий сохранения возможны два режима самоорганизации:

- термодинамический — характеризуется спонтанным значением внутреннего параметра, который при переходе к закрытой системе сводится к плотности сохраняющейся величины;
- кинетический — реализуется, если плотность не сохраняется даже для закрытой системы, а самоорганизация приводит к спонтанному потоку, сопряженному этой плотности.

Первый режим представляет кинетику фазового перехода с несохраняющимся параметром порядка, для второго остается невыясненной физическая природа стационарного кинетического состояния, в котором поток сохраняет конечное значение. Настоящий раздел посвящен развитию аксиоматической теории самоорганизующихся систем, которая позволяет единым образом представить оба этих режима.

Первый из них рассматривается в подразделе 1.3.1 на основе простейшей схемы Лоренца. В рамках такого представления процесс самоорганизации параметризуется следующими величинами: внутренним параметром, который при переходе к закрытой подсистеме представляет плотность сохраняющейся величины; сопряженным полем, сводящимся к градиенту соответствующего потока; управляющим параметром, величина которого обусловлена внешним воздействием и определяет состояние системы. В рамках адиабатического приближения показано, что введенные таким образом сопряженное поле и управляющий параметр отвечают энтропии и внутренней энергии соответственно. В результате самоорганизация приводит к отрицательной температуре, величина которой монотонно падает с ростом управляющего параметра.

Подраздел 1.3.2 посвящен исследованию кинетического состояния, которое характеризуется стационарным потоком и возникает под действием градиентов химического потенциала и температуры, играющих роль сопряженного поля и управляющего параметра. Показано, что рост градиента температуры приводит к росту энтропии в подкритическом режиме и ее уменьшению в кинетическом состоянии, которое, таким образом, играет роль упорядоченного.

Характерная особенность подходов, на которых основывается рассмотрение в подразделах 1.3.1 и 1.3.2, заключается в использовании известной схемы Лоренца. В пользу такого выбора говорит уже то обстоятельство, что он приводит к стандартным соотношениям термодинамики и физической кинетики. Вместе с тем в подразделе 1.3.3 показано, что оба подхода следуют из единой лагранжевой схемы для набора двухкомпонентных полей, который состоит из плотности и сопряженного потока, энтропии и градиента химического потенциала, внутренней энергии и градиента температуры. Показано, что лагранжиан и диссипативная функция, приводящие к системе Лоренца, имеют простейший вид: первый содержит квадратичное и кубическое слагаемые, вторая — только квадратичные вклады удлиненных производных по времени.

1.3.1 Термодинамическое превращение

Рассмотрим систему, определенную полями плотности $\rho(\mathbf{r}, t)$ и скорости $\mathbf{V}(\mathbf{r}, t)$, пространственно–временную зависимость которых удобно представить разложениями

$$\rho \equiv \rho_0 [1 + \eta(\mathbf{r}, t)]; \quad \mathbf{V} \equiv V_0 [\mathbf{1} + \mathbf{v}(\mathbf{r}, t)], \quad \mathbf{1} \equiv \frac{\mathbf{V}_0}{V_0}. \quad (1.160)$$

Здесь $\rho_0, \mathbf{V}_0 = \text{const}$ — усредненные значения, $\eta(\mathbf{r}, t), \mathbf{v}(\mathbf{r}, t)$ — переменные составляющие в безразмерном виде. Выражения для потока и энергии

$$\mathbf{Q} \equiv \rho \mathbf{V}, \quad E \equiv \frac{\rho}{2} \mathbf{V}^2 \quad (1.161)$$

представляются следующим образом:

$$\mathbf{Q} \equiv Q_0[(1 + \eta)\mathbf{1} + \mathbf{q}(\mathbf{r}, t)], \quad E \equiv E_0[(1 + \eta) + 2q(\mathbf{r}, t) + \epsilon(\mathbf{r}, t)]; \quad (1.162)$$

$$Q_0 \equiv \rho_0 V_0, \quad E_0 \equiv \frac{Q_0^2}{2\rho_0}.$$

Статистическое состояние системы задается внутренними составляющими

$$\mathbf{q} \equiv (1 + \eta)\mathbf{v}, \quad \epsilon \equiv \frac{\mathbf{q}^2}{1 + \eta}. \quad (1.163)$$

Для замкнутой системы плотность ρ является сохраняющейся величиной, значение которой определяется уравнением непрерывности

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \mathbf{Q} = 0, \quad \nabla \equiv \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}}. \quad (1.164)$$

Под внешним воздействием система становится открытой и приобретает неравновесный характер. Это выражается в появлении двух вкладов противоположного знака в уравнении (1.164). Первый играет роль диссипативного стока $-(\eta/\tau)$, характеризуемого временем

релаксации τ . Второй представляет источник, который для закрытой системы сводится к обычному выражению

$$s \equiv -\lambda \nabla \mathbf{q}; \quad \lambda \equiv V_0 \tau, \quad V_0 \equiv \frac{Q_0}{\rho_0}, \quad (1.165)$$

определяемому безразмерным потоком \mathbf{q} . В результате уравнение непрерывности принимает вид

$$\tau \dot{\eta} = -\eta + s, \quad (1.166)$$

где точка означает производную по времени. В стационарном состоянии $\dot{\eta} = 0$ это уравнение дает равенство источника s вариации плотности η .

Для определения уравнения эволюции источника будем исходить из условия, что в стационарном состоянии это уравнение должно сводиться к соотношению Онзагера

$$\mathbf{q} = -\lambda \nabla \eta, \quad (1.167)$$

благодаря которому выражение (1.165) принимает вид

$$s = \lambda^2 \nabla^2 \eta. \quad (1.168)$$

С другой стороны, в стационарном состоянии $s = \eta$, и зависимость $\eta(\mathbf{r}, t)$ определяется уравнением Пуассона

$$\lambda^2 \nabla^2 \eta = \eta. \quad (1.169)$$

С учетом указанных условий постулируем уравнение эволюции источника s в следующем виде:

$$\tau_s \dot{s} = -s + \epsilon \eta. \quad (1.170)$$

Здесь первое слагаемое в правой части описывает процесс релаксации, характеризуемый временем τ_s , во втором введен параметр ϵ , принимающий в стационарном состоянии ($\dot{s} = 0$, $\eta = s$) значение $\epsilon = 1$.

Согласно теореме Рюэля–Таккенса [8] (см. также подраздел 1.2.5) нетривиальная картина самоорганизации достигается лишь в

том случае, если число степеней свободы, параметризующих эволюцию системы, составляет не менее трех. В этой связи уместно предположить, что управляющий параметр $\epsilon(t)$ сводится к константе $\epsilon = 1$ только в предельном случае $t \rightarrow \infty$, а при конечных временах изменяется в соответствии со значениями внутреннего параметра $\eta(t)$ и сопряженного поля $s(t)$. Однако если в автономном режиме величины $\eta(t)$, $s(t)$ достигают нулевых значений, то управляющий параметр $\epsilon(t)$ стремится при $t \rightarrow \infty$ к конечной величине $\epsilon_e \neq 0$, задаваемой внешним воздействием. В результате уравнение его эволюции записывается в виде

$$\tau_\epsilon \dot{\epsilon} = (\epsilon_e - \epsilon) - \eta s, \quad (1.171)$$

где первое слагаемое представляет дебаевскую релаксацию со временем τ_ϵ , второе учитывает влияние внутреннего параметра и сопряженного поля.

Будучи эквивалентными системе Лоренца (см. подраздел 1.3.3), уравнения (1.166), (1.170), (1.171) представляют эволюцию системы, течение которой определяется внешним воздействием ϵ_e и временами релаксации τ_η , τ_s , τ_ϵ . Характерная особенность этих уравнений состоит в том, что выражение (1.166) является линейным, тогда как нелинейные слагаемые в (1.170), (1.171) имеют противоположные знаки. С физической точки зрения это означает, что на начальном этапе безразмерное значение отклонения плотности η сводится к источнику s , определяемому выражением (1.165), а затем становится существенной обратная связь, отражаемая нелинейными вкладками. Отрицательный знак перед последним слагаемым в уравнении (1.171) является проявлением принципа Ле–Шателье, согласно которому рост вариации плотности η и источника s приводит к спадающему управляющему параметру ϵ , которое, в свою очередь, препятствуют самоорганизации. Напротив, положительная обратная связь величин η и ϵ с s в уравнении (1.170) способствует росту сопряженного поля s , а следовательно, и процессу самоорганизации.

В общем случае система (1.166), (1.170), (1.171) не имеет аналитического решения, однако при соотношении времен релаксации $\tau_s, \tau_\epsilon \ll \tau_\eta$ можно воспользоваться адиабатическим приближением, согласно которому сопряженное поле и управляющий параметр следуют за изменением внутреннего параметра. Это позволяет прене-

бречь левыми частями уравнений (1.170), (1.171), которые приводят к следующим зависимостям:

$$s = \frac{\epsilon_e \eta}{1 + \eta^2}, \quad \epsilon = \frac{\epsilon_e}{1 + \eta^2}. \quad (1.172)$$

Из них видно, что при изменении внутреннего параметра в физической области $\eta \in [0, 1]$ сопряженное поле s увеличивается, а управляющий параметр ϵ монотонно спадает (в области $\eta > 1$ имеем $ds/d\eta < 0$, и процесс самоорганизации становится неустойчивым). Предположим, что такое поведение означает рост энтропии s и спадание внутренней энергии ϵ . Тогда зависимость

$$s = \sqrt{\epsilon(\epsilon_e - \epsilon)}, \quad (1.173)$$

следующая из равенств (1.172), приводит к выражению

$$T = - \left(1 - \frac{\epsilon_e}{2\epsilon}\right)^{-1} \sqrt{\frac{\epsilon_e}{\epsilon} - 1}, \quad (1.174)$$

для температуры

$$T \equiv \frac{\partial \epsilon}{\partial s}. \quad (1.175)$$

Согласно рис. 1.23а определенная таким образом температура монотонно увеличивается с ростом энергии от значения $T = 0$ при $\epsilon = 0$ до $T = \infty$ при $\epsilon = \epsilon_e/2$. Затем величина T скачком спадает до значения $T = -\infty$ и опять монотонно нарастает до начального значения $T = 0$ при $\epsilon = \epsilon_e$. Таким образом, в области $0 \leq \epsilon < \epsilon_e/2$ эволюция системы имеет диссипативный характер, а с ростом энергии до значений $\epsilon_e/2 < \epsilon \leq \epsilon_e$ происходит уменьшение энтропии, которое приводит к отрицательной температуре (1.174), означающей процесс самоорганизации.

Подставляя первое равенство (1.172) в (1.166), приходим к уравнению Ландау-Халатникова

$$\dot{\eta} = -\frac{\partial V}{\partial \eta}, \quad (1.176)$$

вид которого определяется синергетическим потенциалом

$$V = \frac{\eta^2}{2} - \frac{\epsilon_e}{2} \ln(1 + \eta^2). \quad (1.177)$$

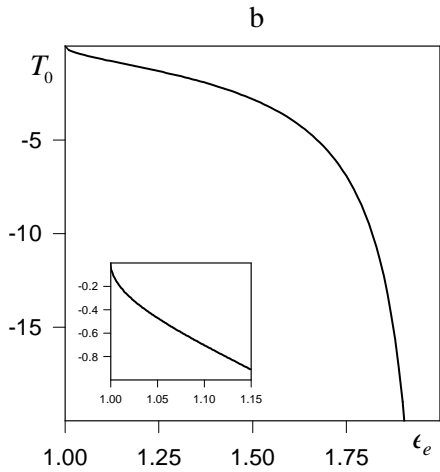
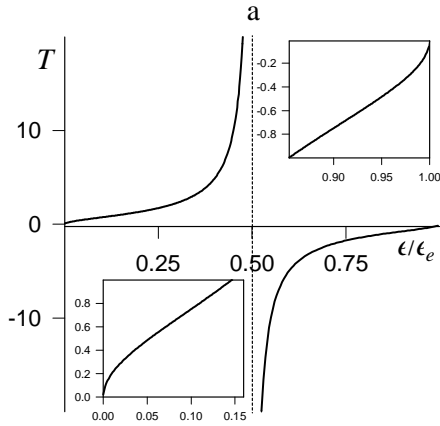


Рисунок 1.23 — Зависимость температуры от энергии: а — нестационарное значение; б — стационарное

Согласно рис. 1.1 при $\epsilon_e < 1$ зависимость $V(\eta)$ имеет монотонно возрастающий вид, отвечающий кривой 1, и стационарное значение внутреннего параметра $\eta_0 = 0$. Если внешнее воздействие столь велико, что обеспечивает энергию ϵ_e , превышающую критическое значение $\epsilon_c = 1$, то синергетический потенциал приобретает минимум (см. кривую 2), отвечающий стационарным значениям вариации плотности и энтропии

$$\eta_0 = s_0 = \sqrt{\epsilon_e - 1}, \quad (1.178)$$

которые корневым образом возрастают с увеличением внутренней энергии ϵ_e , отсчитанной от критического значения $\epsilon_c = 1$. При этом стационарное значение энергии сводится к критическому ($\epsilon_0 = 1$), а температура (1.174) принимает стационарное значение

$$T_0 = -\frac{\sqrt{\epsilon_e - 1}}{1 - \epsilon_e/2}, \quad (1.179)$$

являющееся отрицательным в критической области $1 \leq \epsilon_e < 2$. В результате стационарная температура монотонно уменьшается с увеличением внешнего воздействия от $T_0 = 0$ при $\epsilon_e = 1$ до $T_0 = -\infty$ при $\epsilon_e = 2$ (рис. 1.23b). Таким образом, удаление от равновесия приводит к усилению процесса самоорганизации.

1.3.2 Кинетическое превращение

Проведенное рассмотрение показывает, что диссипативная динамика самоорганизующейся системы может быть описана моделью Лоренца, в рамках которой вариация плотности η играет роль внутреннего параметра, источник (1.165), сводящийся к энтропии s , представляет поле, сопряженное внутреннему параметру, а внутренняя энергия ϵ является управляющим параметром. Характерно, что при этом основным (внутренним) параметром самоорганизации является вариация плотности $\eta(\mathbf{r}, t)$. Вместе с тем известно множество физических систем, для которых роль внутреннего параметра играет поток \mathbf{q} [50] — [52]. Предположим, что процесс самоорганизации таких систем представляется системой Лоренца (ср. с (1.166), (1.170), (1.171)):

$$\tau_{\mathbf{q}} \dot{\mathbf{q}} = -\mathbf{q} + \mathbf{f}, \quad (1.180)$$

$$\tau_f \dot{\mathbf{f}} = -\mathbf{f} + \mathbf{1}_f(\mathbf{q}\mathbf{g}), \quad (1.181)$$

$$\tau_g \dot{\mathbf{g}} = (\mathbf{g}_e - \mathbf{g}) - \mathbf{1}_g(\mathbf{q}\mathbf{f}). \quad (1.182)$$

Здесь \mathbf{f} , \mathbf{g} — сопряженная сила и управляющий параметр, физический смысл которых подлежит выяснению; τ_q , τ_f , τ_g — соответствующие времена релаксации; $\mathbf{1}_f$ и $\mathbf{1}_g$ — единичные векторы вдоль направлений \mathbf{f} и \mathbf{g} , $\mathbf{g}_e \equiv g_e \mathbf{1}_e$ — значение управляющего параметра, задаваемое внешним воздействием. В стационарном состоянии, когда $\dot{\mathbf{q}} = 0$, сила \mathbf{f} сводится к потоку \mathbf{q} . Можно полагать, что в общем случае $\dot{\mathbf{q}} \neq 0$ она будет иметь вид обобщенного соотношения Онзагера (ср. с (1.167))

$$\mathbf{f} = -\lambda \nabla \mu, \quad (1.183)$$

где термодинамический потенциал μ сводится в стационарном случае к химическому. В результате можно сделать вывод, что вектор \mathbf{f} представляет обобщенную термодинамическую силу.

Для определения физического смысла вектора \mathbf{g} будем, как и ранее, исходить из адиабатического условия $\tau_f, \tau_g \ll \tau_q$. Оно приводит к связям

$$\mathbf{f} = \frac{g_e(\mathbf{1}_e \mathbf{1}_q) \mathbf{1}_f q}{1 + (\mathbf{1}_g \mathbf{1}_q)(\mathbf{1}_f \mathbf{1}_q) \mathbf{q}^2}, \quad \mathbf{g} = \frac{\mathbf{1}_e + g_e(\mathbf{1}_g \mathbf{1}_f)[[\mathbf{1}_g \mathbf{1}_e] \mathbf{1}_q] \mathbf{q}^2}{1 + (\mathbf{1}_g \mathbf{1}_q)(\mathbf{1}_f \mathbf{1}_q) \mathbf{q}^2}, \quad (1.184)$$

где круглые и квадратные скобки означают скалярное и векторное произведения соответственно. Эти равенства сводятся к виду (1.172), если вектор \mathbf{g} не изменяет своего направления, т. е. при условии $\mathbf{1}_g \mathbf{1}_e = 1$. Оно выполняется в простейшем одномерном случае, когда равенства (1.184) приводят к уравнению состояния (ср. с (1.173))

$$f = \sqrt{g(g_e - g)}. \quad (1.185)$$

С его учетом производная

$$\frac{\partial f}{\partial g} \equiv -s \quad (1.186)$$

принимает вид (ср. с (1.174))

$$s = \left(1 - \frac{g_e}{2g}\right) \left(\frac{g_e}{g} - 1\right)^{-\frac{1}{2}}. \quad (1.187)$$

Согласно рис. 1.24а с ростом g в области $0 < g < g_e$ эта производная монотонно увеличивается от $-\infty$ до ∞ , принимая значение $s = 0$ при $g = g_e/2$. Это означает, что величина, определенная равенством (1.186), представляет удельную энтропию, которая бесконечно возрастает, когда управляющий параметр $g_e/2 \leq g < g_e$ стремится к значению g_e , определенному внешним воздействием. Соответственно управляющий параметр \mathbf{g} приобретает смысл градиента температуры, взятого с обратным знаком:

$$\mathbf{g} \equiv -\lambda \nabla T. \quad (1.188)$$

В стационарном состоянии $\dot{\mathbf{q}} = 0$ для потока, термодинамической силы и градиента температуры получаем

$$q_0 = f_0 = \sqrt{g_e - 1}, \quad g_0 = 1. \quad (1.189)$$

С другой стороны, с ростом градиента температуры в критической области $1 < g_e < 2$ стационарное значение удельной энтропии (ср. с (1.179))

$$s_0 = \frac{1 - g_e/2}{\sqrt{g_e - 1}} \quad (1.190)$$

монотонно спадает от ∞ до 0 (см. рис. 1.24b). Таким образом, система уравнений (1.180) — (1.182), которая представляет самосогласованную эволюцию потока \mathbf{q} , термодинамической силы \mathbf{f} и обращенного градиента температуры \mathbf{g} , показывает, что закритическое значение $g_e > 1$ управляющего параметра приводит к уменьшению энтропии, означающему самоорганизацию системы.

1.3.3 Лагранжев формализм

Несмотря на популярность системы Лоренца, попытки получить ее аксиоматическим путем до последнего времени оставались безуспешными. Микроскопическое исследование на основе бозон-фермионного гамильтониана Дике и феноменологическое рассмотрение в рамках суперсимметричной теории поля [53] показывают (см.

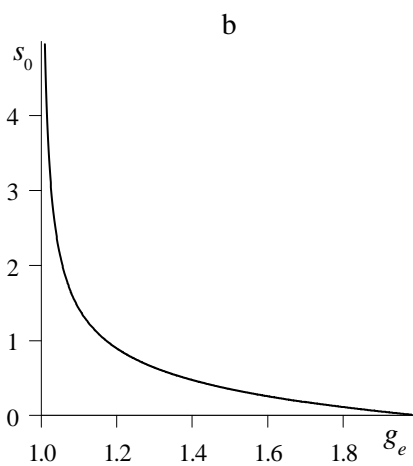
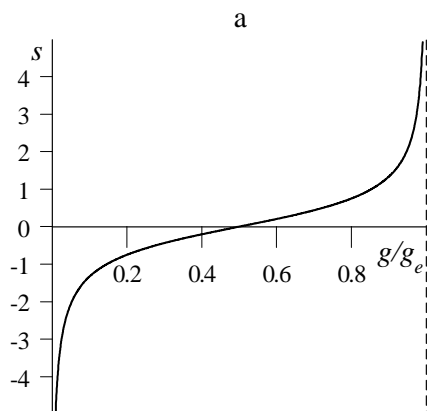


Рисунок 1.24 — Зависимость энтропии от градиента температуры:
 а — нестационарное значение; б — стационарное

раздел 1.4), что это обусловлено различной коммутационной природой внутреннего параметра, сопряженного поля и управляющего параметра — два последних являются антикоммутирующими, а остальные коммутируют между собой. С учетом этого обстоятельства введем двухкомпонентные поля

$$\begin{aligned} \vec{\phi} &= \begin{pmatrix} \eta \\ \mathbf{q} \end{pmatrix}, \quad \vec{\mathcal{F}} = \begin{pmatrix} s \\ \mathbf{f} \end{pmatrix}, \quad \vec{\mathcal{C}} = \begin{pmatrix} \varepsilon \\ \delta \end{pmatrix}; \\ \vec{\mathcal{F}}\vec{\mathcal{C}} &\equiv -\vec{\mathcal{C}}\vec{\mathcal{F}}, \quad \mathbf{f} \equiv -\lambda\nabla\mu, \end{aligned} \quad (1.191)$$

первое из которых играет роль материального, второе имеет компонентами сопряженные силы, а последнее — параметры состояния (параметры δ , ε подлежат определению). Поведение системы задается лагранжианом

$$\mathcal{L} = \mathcal{L}_0 + \mathcal{L}_{int}, \quad (1.192)$$

сводящимся к затравочной составляющей

$$\mathcal{L}_0 = \vec{\phi}\vec{\mathcal{F}}\vec{\mathcal{C}}_e, \quad \vec{\mathcal{C}}_e \equiv \begin{pmatrix} \epsilon_e \\ \mathbf{g}_e \end{pmatrix} \quad (1.193)$$

и вкладу взаимодействия

$$\mathcal{L}_{int} = -\vec{\phi}\vec{\mathcal{F}}\vec{\mathcal{C}}. \quad (1.194)$$

Соответственно диссипативная функция

$$\mathcal{R} = \mathcal{R}_m + \mathcal{R}_f \quad (1.195)$$

определяется материальной компонентой

$$\mathcal{R}_m = \frac{1}{2}(\vec{\mathcal{C}}_e\vec{\mathcal{D}}_\phi\vec{\phi})^2 \quad (1.196)$$

и полевыми составляющими

$$\mathcal{R}_f = \frac{1}{2}(\vec{\mathcal{D}}_{\mathcal{F}}\vec{\mathcal{F}})^2 + \frac{1}{2}(\vec{\mathcal{D}}_{\mathcal{C}}\vec{\mathcal{C}})^2, \quad (1.197)$$

где введены обозначения

$$\vec{\mathcal{D}}_z \equiv \vec{\tau}_z \frac{\partial}{\partial t} + \vec{1}, \quad z = \vec{\phi}, \vec{\mathcal{F}}, \vec{\mathcal{C}}; \quad (1.198)$$

$$\vec{\tau}_\phi \equiv \begin{pmatrix} \tau \\ \tau_{\mathbf{q}} \end{pmatrix}, \quad \vec{\tau}_{\mathcal{F}} \equiv \begin{pmatrix} \tau_s \\ \tau_{\mathbf{f}} \end{pmatrix}, \quad \vec{\tau}_{\mathcal{C}} \equiv \begin{pmatrix} \tau_\epsilon \\ \tau_{\mathbf{g}} \end{pmatrix}, \quad \vec{1} \equiv \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix},$$

основанные на использовании производных $\vec{\mathcal{D}}_z$, удлинение которых учитывает дебаевскую релаксацию на временах $\vec{\tau}_z$, $z = \vec{\phi}, \vec{\mathcal{C}}, \vec{\mathcal{F}}$. Тогда уравнения Эйлера

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial z} - \mathcal{D}_z \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\mathcal{D}_z z)} = \frac{\partial \mathcal{R}}{\partial (\mathcal{D}_z z)}, \quad z \equiv \vec{\phi}, \vec{\mathcal{F}}, \vec{\mathcal{C}}, \quad (1.199)$$

приводят к выражениям

$$\begin{aligned} \vec{\mathcal{C}}_e \vec{\mathcal{D}}_\phi \vec{\phi} &= \vec{\mathcal{F}} \vec{\mathcal{C}}_e - \vec{\mathcal{F}} \vec{\mathcal{C}}, \\ \vec{\mathcal{D}}_{\mathcal{F}} \vec{\mathcal{F}} &= \vec{\mathcal{C}}_e \vec{\phi} - \vec{\phi} \vec{\mathcal{C}}, \\ \vec{\mathcal{D}}_{\mathcal{C}} \vec{\mathcal{C}} &= \vec{\phi} \vec{\mathcal{F}}, \end{aligned} \quad (1.200)$$

где второе равенство учитывает антикоммутиационное соотношение для полей $\vec{\mathcal{F}}, \vec{\mathcal{C}}$. Уравнения (1.200) сводятся к виду

$$\begin{aligned} \tau \dot{\eta} &= -\eta + (1 - \varepsilon/\epsilon_e) s, \\ \tau_s \dot{s} &= -s + \epsilon_e \eta - \eta \varepsilon, \\ \tau_\epsilon \dot{\varepsilon} &= -\varepsilon + \eta s; \end{aligned} \quad (1.201)$$

$$\begin{aligned} \tau_{\mathbf{q}} \dot{\mathbf{q}} &= -\mathbf{q} + (1 - \delta/g_e) \mathbf{f}, \\ \tau_{\mathbf{f}} \dot{\mathbf{f}} &= -\mathbf{f} + \mathbf{1}_{\mathbf{f}} (\mathbf{g}_e \mathbf{q}) - \mathbf{1}_{\mathbf{f}} (\delta \mathbf{q}), \\ \tau_{\mathbf{g}} \dot{\delta} &= -\delta + \mathbf{1}_{\delta} (\mathbf{q} \mathbf{f}), \end{aligned} \quad (1.202)$$

который принимает стандартную форму [8], если учесть определения (1.191) и сохранить только линейные члены в уравнениях, содержащих $\dot{\eta}$, $\dot{\mathbf{q}}$. Уравнения (1.201), (1.202) сводятся к виду (1.166), (1.170), (1.171) и (1.180) — (1.182) соответственно, если выполняются соотношения

$$\varepsilon \equiv \epsilon_e - \epsilon, \quad \delta \equiv \mathbf{g}_e - \mathbf{g}; \quad \mathbf{g} \equiv -\lambda \nabla T. \quad (1.203)$$

Таким образом, параметры ε , δ , введенные в (1.191), задают отклонения внутренней энергии и градиента температуры от значений ϵ_e , \mathbf{g}_e , фиксированных внешним воздействием.

Другое отличие состоит в том, что уравнения (1.201) отвечают синергетическому потенциалу

$$V = \frac{\eta^2}{2} + \frac{\epsilon_e}{2}(1 + \eta^2)^{-1}, \quad (1.204)$$

существенно отличному от (1.177). При закритическом значении энергии $\epsilon_e > 1$ минимум этой зависимости отвечает точке $\eta_0^2 = \sqrt{\epsilon_e} - 1$, соответствующей стационарному значению синергетического потенциала $V(\eta_0) = \sqrt{\epsilon_e} - 1/2$, которое меньше начального $V(0) = \epsilon_e/2$. Однако необходимо иметь в виду, что в рамках феноменологического подхода полученные выражения носят асимптотический характер и совпадают только в окрестности критической точки $\epsilon_e = 1$. Поэтому изначально мы использовали более простой подход, в рамках которого нелинейные слагаемые в первых уравнениях систем (1.201), (1.202) были опущены.

1.4 Суперсимметричная теория самоорганизующейся системы

Как и в разделе 1.1, будем основываться на синергетическом обобщении термодинамической теории фазовых переходов. Основная черта этой теории состоит в том, что в замкнутой системе (термостате) выделяется подсистема, сводящаяся к гидродинамической моде, амплитуда которой представляет параметр порядка [12]. При этом принимается, что термостат влияет на величину параметра порядка η , определяющего состояние выделенной подсистемы, как термически — посредством изменения управляющего параметра S , так и непосредственным образом — через изменение поля h , сопряженного параметру порядка (для магнетика величины η , h , S сводятся к намагниченности, напряженности магнитного поля и энтропии). Характерная особенность термодинамического подхода состоит в том, что постулируется одностороннее влияние термостата на упорядочи-

вающуюся подсистему, но не наоборот — изменение параметра порядка η не влияет на параметры состояния термостата h , S . В рамках синергетического подхода связь между открытой подсистемой и термостатом принимается двусторонней, и управляющий параметр S и сопряженное поле h оказываются функциями параметра порядка η . Эта связь проявляется при кинетическом описании фазового перехода в разделе 1.1. Так, стандартная картина, отвечающая диссипативной динамике Ландау—Халатникова, реализуется в адиабатическом приближении, когда время релаксации параметра порядка намного превосходит соответствующие времена для сопряженного поля и управляющего параметра [7]. При этом весьма удобным оказывается использование системы Лоренца, впервые предложенной для описания турбулентных потоков в атмосфере [9].

Здесь мы покажем (см. подразделы 1.4.1, 1.4.2 и приложение В), что система Лоренца отвечает простейшему лагранжиану суперсимметричного поля, компоненты которого представляют величины η , h , S . В отличие от обычной полевой теории стохастической системы [35], где грассмановы компоненты суперполя играют вспомогательную роль переменных, не обладающих физическим смыслом, в рассматриваемом случае они задают управляющий параметр S . С другой стороны, объединение переменных η , h , S в вектор суперсимметричного пространства является отражением самосогласованного поведения синергетической системы (в отличие от статистической полевой схемы [35], где суперполе представляет не более чем удобное техническое средство). Исследование корреляторов суперполя, проводимое в подразделе 1.4.3, показывает, что в эргодическом состоянии компоненты таких корреляторов не являются независимыми: наличие суперсимметрии обуславливает выполнение флуктуационно—диссипационной теоремы, связывающей указанные компоненты [35]. С включением замороженного беспорядка происходит потеря эргодичности, нарушающая суперсимметрию. Это приводит к появлению в корреляторах сингулярных добавок, задающих параметры q , Δ памяти и неэргодичности. Используемый метод позволяет определить зависимость величин q , Δ от интенсивностей термического и замороженного беспорядков и таким образом выяснить условия самоорганизации. Последний подраздел 1.4.4 посвящен обсуждению полученных результатов. Показано, что параметр, определяющий пере-

ход в режим необратимого времени, задается квадратом отношения времени квантовой флуктуации к макроскопическому времени изменения параметра порядка. Найдено критическое значение эффективного взаимодействия, ограничивающее область упорядоченного состояния.

1.4.1 Микроскопическое представление системы Лоренца

Изложим сначала микроскопическую схему, представляющую процесс самоорганизации. С этой целью рассмотрим систему, состоящую из бозонного и фермионного газов, взаимодействие между которыми характеризуется потенциалом v . В представлении вторичного квантования бозонам отвечают операторы b_l^+, b_l , удовлетворяющие коммутационному соотношению $[b_l, b_m^+] = \delta_{lm}$, где l, m — номера узлов. Двухуровневая фермионная подсистема представляется операторами $a_{l\alpha}^+, a_{l\alpha}$, $\alpha = 1, 2$, для которых выполняется антикоммутационное соотношение $\{a_{l\alpha}, a_{m\beta}^+\} = \delta_{lm}\delta_{\alpha\beta}$. Распределение бозонов определяется числами заполнения $b_{\mathbf{k}}^+ b_{\mathbf{k}}$ в \mathbf{k} —представлении, отвечающем фурье—образам по узлам решетки l . Для представления фермиевской подсистемы, кроме чисел заполнения $n_{l\alpha} \equiv a_{l\alpha}^+ a_{l\alpha}$, следует ввести оператор $d_l \equiv a_{l1}^+ a_{l2}$, определяющий поляризацию относительно разделения по уровням $\alpha = 1, 2$. В результате поведение системы представляется гамильтонианом Дике

$$H = \sum_{\mathbf{k}} \left\{ (E_1 n_{\mathbf{k}1} + E_2 n_{\mathbf{k}2}) + \omega_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}}^+ b_{\mathbf{k}} + \frac{i}{2} v (b_{\mathbf{k}}^+ d_{\mathbf{k}} - d_{\mathbf{k}}^+ b_{\mathbf{k}}) \right\}, \quad (1.205)$$

где использовано \mathbf{k} —представление, $E_{1,2}$ — энергии фермиевских уровней, $\omega_{\mathbf{k}}$ — закон дисперсии бозонов, мнимая единица перед слагаемым, представляющим взаимодействие v , отражает свойство эрмитовости, постоянная Планка $\hbar = 1$.

Гейзенберговские уравнения движения, отвечающие гамильтони-

ану (1.205), имеют вид

$$\dot{b}_{\mathbf{k}} = -i\omega_{\mathbf{k}}b_{\mathbf{k}} + (v/2)d_{\mathbf{k}}, \quad (1.206)$$

$$\dot{d}_{\mathbf{k}} = -i\Delta d_{\mathbf{k}} + (v/2)b_{\mathbf{k}}(n_{\mathbf{k}2} - n_{\mathbf{k}1}), \quad (1.207)$$

$$\dot{n}_{\mathbf{k}1} = (v/2)(b_{\mathbf{k}}^+ d_{\mathbf{k}} + d_{\mathbf{k}}^+ b_{\mathbf{k}}), \quad (1.208)$$

$$\dot{n}_{\mathbf{k}2} = -(v/2)(b_{\mathbf{k}}^+ d_{\mathbf{k}} + d_{\mathbf{k}}^+ b_{\mathbf{k}}), \quad (1.209)$$

где точка означает дифференцирование по времени и введено расстояние между уровнями $\Delta \equiv E_2 - E_1$. В условиях резонанса первые слагаемые в правых частях уравнений (1.206), (1.207), содержащие частоты $\omega_{\mathbf{k}}$, Δ , могут быть исключены за счет выделения множителей $\exp(-i\omega_{\mathbf{k}}t)$, $\exp(-i\Delta t)$ во временных зависимостях $b_{\mathbf{k}}(t)$, $d_{\mathbf{k}}(t)$. С другой стороны, если учесть диссипацию, то эти частоты приобретают мнимые добавки $-i/\tau_{\eta}$, $-i/\tau_h$, характеризующиеся временами релаксации τ_{η} , τ_h (условия $\text{Im } \omega_{\mathbf{k}} < 0$, $\text{Im } \Delta < 0$ отражают принцип причинности). В результате уравнения (1.206), (1.207) приобретают диссипативные слагаемые $-b_{\mathbf{k}}/\tau_{\eta}$, $-d_{\mathbf{k}}/\tau_h$, где τ_{η} — время релаксации распределения бозонов, τ_h — время поляризации фермионов. Можно полагать, что процесс диссипации должен сказываться и на заселенностях $n_{\mathbf{k}\alpha}(t)$ фермиевских уровней. Однако поскольку задаваемые внешней накачкой значения $n_{\mathbf{k}\alpha}^e \neq 0$ (причем $n_{\mathbf{k}2}^e > n_{\mathbf{k}1}^e$), то диссипативные слагаемые в (1.208), (1.209) имеют более сложный вид $-(n_{\mathbf{k}\alpha} - n_{\mathbf{k}\alpha}^e)/\tau_S$, $\alpha = 1, 2$, где τ_S — время релаксации распределения фермионов по уровням.

Введем макроскопические величины:

$$\begin{aligned} \eta_{\mathbf{k}} &\equiv \langle b_{\mathbf{k}}^+ \rangle = \langle b_{\mathbf{k}} \rangle, & h_{\mathbf{k}} &\equiv \langle d_{\mathbf{k}} \rangle = \langle d_{\mathbf{k}}^+ \rangle, \\ S_{\mathbf{k}} &\equiv \langle n_{\mathbf{k}2} - n_{\mathbf{k}1} \rangle, & S_{e\mathbf{k}} &\equiv \langle n_{\mathbf{k}2}^e - n_{\mathbf{k}1}^e \rangle, \end{aligned} \quad (1.210)$$

где угловые скобки означают усреднение. Тогда в пренебрежении корреляцией в распределении частиц по квантовым состояниям уравнения Гейзенберга (1.206) — (1.209), дополненные диссипативными слагаемыми, приводят к системе Лоренца (1.1) — (1.3). При этом использовано одномодовое приближение, позволяющее опустить зависимость от волнового вектора \mathbf{k} , и введены константы связи, определенные соотношениями $2A_{\eta} \equiv v\tau_{\eta}$, $2A_h \equiv v\tau_h$, $A_S \equiv 2v\tau_S$.

Уравнения (1.1) — (1.3) содержат семь констант — параметр накачки S_e , три времени релаксации τ и три константы связи A . Однако последние задаются единственным параметром взаимодействия $v > 0$, так что остаются независимыми только пять констант. Поскольку четыре из них определяют масштабы величин η , h , S , t , то существенную роль может играть лишь параметр накачки S_e , величина которого определяет поведение системы [7, 8].

Для анализа полученных уравнений введем масштабы η_m, h_m, S_c , определяющие изменения параметра порядка η , сопряженного поля h и управляющего параметра S (см. (1.6), (1.9), (1.25)):

$$\begin{aligned} \eta_m^{-2} &\equiv A_h A_S = \tau_h \tau_S v^2, & h_m^{-1} &\equiv A_\eta / \eta_m = (\tau_\eta / 2) (\tau_h \tau_S)^{1/2} v^2, \\ S_c^{-1} &\equiv A_\eta A_h = 2^{-2} \tau_\eta \tau_h v^2. \end{aligned} \quad (1.211)$$

Тогда использование нормированных величин η, h, S приводит систему Лоренца к простейшему виду (ср. с (1.166), (1.170), (1.171)):

$$\tau_\eta \dot{\eta} = -\eta + h, \quad (1.212)$$

$$\tau_h \dot{h} = -h + \eta S, \quad (1.213)$$

$$\tau_S \dot{S} = (S_e - S) - \eta h. \quad (1.214)$$

Релаксация системы в стационарное состояние обеспечивается отрицательной обратной связью параметра порядка η и сопряженного поля h с управляющим параметром S . Ее наличие отражается последним членом (1.214), который препятствует нарастанию параметров состояния термостата $S(\eta)$, $h(\eta)$. Положительная связь величин η, S с h в (1.213) приводит к противоположному влиянию упорядочивающейся подсистемы на параметры термостата $h(\eta)$, $S(\eta)$. Отметим, что если изменить оба знака перед нелинейными слагаемыми в (1.213), (1.214), то восприимчивость $\chi = d\eta/dh$ становится отрицательной, и система теряет устойчивость.

Таким образом, процесс самоорганизации определяется конкуренцией отрицательной связи параметра порядка η и поля h с управляющим параметром S и положительной связи η и S с h . Далее мы увидим, что величина S сводится к энтропии и поэтому ее спадание, присущее зависимости управляющего параметра от параметра порядка, отражает неконсервативность самоорганизующейся системы,

которая нарушает второе начало термодинамики. Что касается нарастающего характера соответствующей зависимости $h(\eta)$ для поля, то она является формальной причиной самоорганизации, поскольку помимо параметра порядка η основное уравнение (1.212) содержит именно поле h , а не управляющий параметр S .

Приведенная картина отвечает фазовому превращению второго рода. Переход к первому роду достигается, если принять, что время релаксации параметра порядка τ_η становится функцией его значения η [7, 8]. Соответствующая картина самоорганизации изложена в разделе 1.1.

1.4.2 Суперсимметричный лагранжев формализм

В подразделе 1.1.1 мы в рамках адиабатического приближения пренебрегли флуктуациями сопряженного поля h и управляющего параметра S , что позволило свести систему Лоренца (1.212) – (1.214) к уравнению Ландау–Халатникова (1.7). Для построения лагранжева формализма следует совершить обратный переход, включая в (1.7) действие флуктуаций ζ . Тогда с учетом неоднородности исходное выражение сводится к уравнению Ланжевена [40]:

$$\dot{\eta}(\mathbf{r}, t) - \nabla^2 \eta(\mathbf{r}, t) = f(\mathbf{r}, t) + \zeta(\mathbf{r}, t), \quad (1.215)$$

где \mathbf{r} — координата, измеренная в единицах корреляционной длины ξ ; t — время, отнесенное к масштабу τ_η ; сила $f = -V_0'(\eta)$; $V_0' \equiv \partial V_0 / \partial \eta$ определяется выражением $V_0(\eta)$ для затравочного потенциала, отнесенного к интенсивности флуктуаций T . Слагаемое $-\nabla^2 \eta$ учитывает пространственную неоднородность в рамках модели Гинзбурга–Ландау. Выражение (1.215) записано для несохраняющегося параметра порядка, в противном случае члены $-\nabla^2 \eta$, f приобретают дополнительный оператор $-\nabla^2$ [41, 54]. Флуктуационное слагаемое нормировано условиями белого шума

$$\langle \zeta(\mathbf{r}, t) \rangle = 0, \quad \langle \zeta(\mathbf{r}, t) \zeta(\mathbf{r}', t') \rangle = T \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta(t - t'), \quad (1.216)$$

которые отвечают усреднению по распределению Гаусса с дисперсией T .

Для построения лагранжиана, отвечающего уравнению Ланжевена (1.215), воспользуемся стандартной полевой схемой [35], основанной на рассмотрении производящего функционала

$$Z\{\eta(\mathbf{r}, t)\} = \left\langle \prod_{(\mathbf{r}, t)} \delta(\dot{\eta} - \nabla^2 \eta - f - \zeta) \det \left| \frac{\delta \zeta}{\delta \eta} \right| \right\rangle, \quad (1.217)$$

который представляет обобщение статистической суммы. Здесь континуальное произведение берется по полному набору координат \mathbf{r} и времени t , δ -функция учитывает уравнение Ланжевена (1.215), детерминант представляет якобиан перехода от ζ к η . Следуя стандартной схеме [35], для δ -функции используем преобразование Фурье, приводящее к появлению поля $\varphi(\mathbf{r}, t)$, а для детерминанта — интегральное представление через грассманово сопряженные поля $\psi(\mathbf{r}, t)$, $\bar{\psi}(\mathbf{r}, t)$. Тогда равенство (1.217) принимает стандартный вид

$$Z\{\eta\} = \int P\{\eta, \varphi, \bar{\psi}, \psi\} D\varphi D\psi D\bar{\psi}, \quad P \propto e^{-S}, \quad S \equiv \int \mathcal{L}(\eta, \varphi, \bar{\psi}, \psi) d\mathbf{r} dt, \quad (1.218)$$

где лагранжиан

$$\mathcal{L} = \varphi(\dot{\eta} - \nabla^2 \eta) - \bar{\psi}(\dot{\psi} - \nabla^2 \psi) - \frac{\varphi^2}{2} + \varphi V_0'(\eta) - V_0''(\eta) \bar{\psi} \psi \quad (1.219)$$

измерен в единицах интенсивности шума T . Уравнения Эйлера выражаются следующим образом:

$$\dot{\eta} - \nabla^2 \eta = -V_0'(\eta) + \varphi, \quad (1.220)$$

$$\dot{\varphi} + \nabla^2 \varphi = V_0''(\eta) \varphi - V_0'''(\eta) \bar{\psi} \psi, \quad (1.221)$$

$$\dot{\psi} - \nabla^2 \psi = -V_0''(\eta) \psi, \quad (1.222)$$

$$-\dot{\bar{\psi}} - \nabla^2 \bar{\psi} = -V_0''(\eta) \bar{\psi}. \quad (1.223)$$

Первое сводится к виду уравнения Ланжевена (1.215), если стохастической добавке ζ сопоставить поле φ . Согласно принципу наименьшего действия, из которого следуют уравнения Эйлера, это поле отвечает максимуму распределения P в (1.218). Таким образом, физический смысл поля φ состоит в том, что оно представляет амплитуду наиболее вероятной флуктуации поля, сопряженного параметру

порядка η (среднее значение этого поля сводится к силе f). Очевидно, условия $\langle \zeta \rangle = 0$, $\varphi \neq 0$ означают, что затравочное гауссово распределение $P(\zeta)$ трансформируется в процессе самоорганизации из унимодального в бимодальное распределение с максимумами в точках $\pm\varphi$. Весьма характерным является распределение знаков перед градиентными слагаемыми в уравнениях (1.220) — (1.223): если для компонент η , ψ реализуется стандартная комбинация, присущая релаксационному процессу типа диффузии, то для полей φ , $\bar{\psi}$ неоднородности входят с противоположными знаками, что означает их автокаталитическое нарастание. В приложении В показано, что полевые уравнения (1.220) — (1.223) сводятся к системе Лоренца (1.212) — (1.214).

Развитая полевая схема представляется наиболее простым образом, если компоненты η , ψ , $\bar{\psi}$ и обобщенную силу $f \equiv -\delta V_0\{\eta\}/\delta\eta$ объединить в суперсимметричное поле

$$\Phi = \eta + \bar{\psi}\chi + \bar{\chi}\psi - \bar{\chi}\chi f, \quad (1.224)$$

где грассмановы координаты χ , $\bar{\chi}$ обладают теми же антикоммутиационными свойствами, что и поля ψ , $\bar{\psi}$. Для суперсимметричного представления лагранжиана (1.219) следует прежде всего заменить затравочный потенциал $V_0(\eta)$ на перенормированный $\tilde{V}(\eta)$, фигурирующий в уравнении движения (В.7),⁶⁾ а также избавиться от градиентных слагаемых, переходя к вариационным производным

$$\tilde{V}'\{\eta\} \equiv \frac{\delta\tilde{V}\{\eta\}}{\delta\eta} = \frac{\partial\tilde{V}(\eta)}{\partial\eta} - \nabla^2\eta, \quad \tilde{V}\{\eta\} \equiv \int \tilde{V}(\eta)dr. \quad (1.225)$$

Тогда, выражая амплитуду флуктуаций φ через обобщенную силу f согласно равенству (В.9), приводим лагранжиан (1.219) к виду

$$\mathcal{L} = \left(\frac{\dot{\eta}^2}{2} - \bar{\psi}\psi - \frac{f^2}{2} \right) + \left(-\tilde{V}'\{\eta\}f - \bar{\psi}\tilde{V}''\{\eta\}\psi \right) + \tilde{V}'\{\eta\}\dot{\eta}. \quad (1.226)$$

Последнее слагаемое может быть опущено как полная производная

⁶⁾Эта перенормировка обусловлена самосогласованием компонент суперполя (1.224).

по времени от $\tilde{V}\{\eta\}$, и в представлении суперполя (1.224) лагранжиан (1.226) принимает канонический вид

$$\mathcal{L} = \int \Lambda(\Phi) d\chi d\bar{\chi}, \quad \Lambda \equiv -\frac{1}{2}\Phi\bar{D}D\Phi + \tilde{V}(\Phi). \quad (1.227)$$

Здесь кинетическая суперэнергия ядра Λ отвечает первой скобке выражения (1.226), а потенциальная $\tilde{V}(\Phi)$ — второй. В рамках Φ^4 -модели равенства (B.3), (B.7), (B.8) дают

$$\tilde{V} = \frac{\sigma}{2} + \frac{1-\sigma}{2}\Phi^2 + w\frac{1+6\sigma}{12}\Phi^4, \quad (1.228)$$

где параметр ангармонизма $w > 0$ возникает благодаря тому, что в отличие от параметра порядка η суперполе (1.224) не может быть масштабировано единственным значением η_m (см. (1.211)). Генераторы группы суперсимметрии имеют вид

$$D = \frac{\partial}{\partial\bar{\chi}} - \chi\frac{\partial}{\partial t}, \quad \bar{D} = \frac{\partial}{\partial\chi} - \bar{\chi}\frac{\partial}{\partial t}. \quad (1.229)$$

Суперуравнения движения, вытекающие из условия экстремума супердействия $S\{\Phi(z)\} = \int \Lambda(\Phi(z))dz$, $z \equiv \{\mathbf{r}, t, \bar{\chi}, \chi\}$, представляют-ся в форме

$$-\frac{1}{2}[\bar{D}, D]\Phi + \tilde{V}'\{\Phi\} = 0, \quad \frac{1}{2}[\bar{D}, D]\Phi \equiv f + \dot{\psi}\chi + \bar{\chi}\dot{\psi} + \bar{\chi}\chi\dot{\eta}. \quad (1.230)$$

Проектируя (1.230) на орты суперпространства $1, \bar{\chi}, \chi, \bar{\chi}\chi$, приходим к уравнениям

$$\ddot{\eta} = -\tilde{V}''\{\eta\}f - \tilde{V}'''\{\eta\}\bar{\psi}\psi, \quad (1.231)$$

$$f = -\tilde{V}'\{\eta\}, \quad (1.232)$$

$$\dot{\psi} = -\tilde{V}''\{\eta\}\psi, \quad (1.233)$$

$$\dot{\bar{\psi}} = \tilde{V}''\{\eta\}\bar{\psi}, \quad (1.234)$$

последние из которых с точностью до замены \tilde{V} на V_0 совпадают с (1.222), (1.223), а связь (1.232) дает определение силы f . Что касается уравнения (1.231), то оно получается после дифференцирования равенства (1.220) по времени и подстановки в результат производных $\dot{\eta}$, $\dot{\psi}$ из (B.9), (1.221). Таким образом, с точностью до перенормировки (B.7) затравочного потенциала $V_0(\eta)$ системы (1.220) —

(1.223), (1.231) — (1.234) оказываются эквивалентными. Однако если уравнения первой симметричны относительно порядка производной по времени, то при переходе от флуктуации φ к обобщенной силе f в системе (1.231) — (1.234) такая симметрия пропадает.

Можно показать [55], что при выполнении условия калибровки $D\Phi = 0$ грассманы поля $\bar{\psi}$, ψ выпадают из рассмотрения и вместо пары сопряженных координат $\bar{\chi}$, χ можно использовать произведение $\bar{\chi}\chi$. Однако согласно приложению В произведение грассмановых полей представляет энтропию и, следовательно, их поведение является существенно важным при описании процесса самоорганизации.

1.4.3 Корреляционная техника

Введем суперсимметричный коррелятор

$$C(z, z') \equiv \langle \Phi(z)\Phi(z') \rangle, \quad z \equiv \{\mathbf{r}, t, \bar{\chi}, \chi\}. \quad (1.235)$$

Согласно уравнению движения (1.230) его затравочная составляющая $C^{(0)}(z, z')$, отвечающая потенциалу $\tilde{V}^{(0)} = (1 - \sigma)\Phi^2/2$, удовлетворяет равенству

$$L_{\mathbf{k}\omega}(\chi)C_{\mathbf{k}\omega}^{(0)}(\chi, \chi') = \delta(\chi, \chi'), \quad L \equiv (1 - \sigma) - \frac{1}{2}[\bar{D}, D], \quad (1.236)$$

где введена суперсимметричная δ -функция $\delta(\chi, \chi') = (\bar{\chi} - \bar{\chi}')(\chi - \chi')$ и совершен переход к пространственно-временным фурье-образам. С учетом определений (1.229) и соотношения $(1/4)[\bar{D}, D]^2 = -\omega^2$ получаем

$$C^{(0)}(\chi, \chi') = \frac{1 + (\bar{\chi}\chi + \bar{\chi}'\chi') - [(1 - \sigma) + i\omega]\bar{\chi}\chi' - [(1 - \sigma) - i\omega]\bar{\chi}'\chi + \omega^2\bar{\chi}\chi\bar{\chi}'\chi'}{(1 - \sigma)^2 + \omega^2}, \quad (1.237)$$

где для краткости опущен индекс ω и не учитывается пространственная дисперсия. Выражение (1.237) представляет разложение по базисным составляющим:

$$\begin{aligned} \mathbf{B}_0 &= \bar{\chi}\chi, & \mathbf{B}_1 &= \bar{\chi}'\chi', \\ \mathbf{T} &= 1, & \mathbf{T}_1 &= \bar{\chi}\chi\bar{\chi}'\chi'; \end{aligned} \quad (1.238)$$

$$\mathbf{F}_0 = -\bar{\chi}'\chi, \quad \mathbf{F}_1 = -\bar{\chi}\chi'. \quad (1.239)$$

Определим функциональное произведение таких составляющих \mathbf{X} , \mathbf{Y} , \mathbf{Z} равенством

$$X(\chi, \chi') = \int Y(\chi, \chi'') Z(\chi'', \chi') d\chi'' d\bar{\chi}''. \quad (1.240)$$

Тогда компоненты (1.238), (1.239) подчиняются следующим правилам умножения: $\mathbf{B}_0^2 = \mathbf{B}_0$, $\mathbf{B}_1^2 = \mathbf{B}_1$, $\mathbf{F}_0^2 = \mathbf{F}_0$, $\mathbf{F}_1^2 = \mathbf{F}_1$, $\mathbf{B}_0\mathbf{T}_1 = \mathbf{T}_1$, $\mathbf{B}_1\mathbf{T} = \mathbf{T}$, $\mathbf{T}\mathbf{B}_0 = \mathbf{T}$, $\mathbf{T}\mathbf{T}_1 = \mathbf{B}_1$, $\mathbf{T}_1\mathbf{B}_1 = \mathbf{T}_1$, $\mathbf{T}_1\mathbf{T} = \mathbf{B}_0$, остальные сомножители дают нуль. Отсюда видно, что $\mathbf{B}_{0,1}$, \mathbf{T} , \mathbf{T}_1 , $\mathbf{F}_{0,1}$ образуют замкнутый базис, по которому удобно разложить суперкоррелятор (1.235):

$$\mathbf{C} = g_+\mathbf{B}_0 + g_-\mathbf{B}_1 + S\mathbf{T} + s\mathbf{T}_1 + G_+\mathbf{F}_0 + G_-\mathbf{F}_1. \quad (1.241)$$

Подставляя (1.224) в (1.235), получаем коэффициенты

$$\begin{aligned} g_+ &= -\langle f\eta \rangle, & g_- &= -\langle \eta f \rangle; \\ S &= \langle \eta^2 \rangle, & s &= \langle f^2 \rangle; \\ G_+ &= \langle \bar{\psi}\psi^* \rangle, & G_- &= \langle \bar{\psi}^*\psi \rangle. \end{aligned} \quad (1.242)$$

Таким образом, величины g_{\pm} сводятся к опережающей и запаздывающей функциям отклика параметра порядка η на действие поля f ; S , s представляют автокорреляторы параметра порядка η и поля f ; и наконец, функции G_{\pm} определяют корреляцию грассманово сопряженных полей $\bar{\psi}$, ψ . Для затравочного суперкоррелятора (1.237) имеем

$$\begin{aligned} g_{\pm}^{(0)} &= S^{(0)} = [(1 - \sigma)^2 + \omega^2]^{-1}, & s^{(0)} &= \omega^2[(1 - \sigma)^2 + \omega^2]^{-1}, \\ G_+^{(0)} &= [(1 - \sigma) + i\omega]^{-1}, & G_-^{(0)} &= [(1 - \sigma) - i\omega]^{-1}. \end{aligned} \quad (1.243)$$

Отсюда с учетом (В.9) находим связь $\langle \eta\varphi \rangle_0 = G_-^{(0)}$, представляющую частный случай тождества Уорда [35]. Оно означает, что коррелятор грассмановых полей сводится к функции отклика параметра порядка η на амплитуду флуктуаций φ .

Согласно [56] для дальнейшего рассмотрения удобно перейти к суперсимметричному полю

$$\Phi = \eta + \bar{\psi}\chi + \bar{\chi}\psi + \bar{\chi}\chi\varphi, \quad (1.244)$$

отличающемся от исходного выражения (1.224) заменой обращенной силы $-f$ на амплитуду флуктуаций φ . Тогда компонента \mathbf{T}_1 выпадает из рассмотрения, а фермиевские составляющие попарно объединяются с бозевскими: $\mathbf{A} \equiv \mathbf{B}_0 + \mathbf{F}_0$, $\mathbf{B} \equiv \mathbf{B}_1 + \mathbf{F}_1$. В результате разложение (1.241) принимает компактный вид

$$\mathbf{C} = G_+ \mathbf{A} + G_- \mathbf{B} + S \mathbf{T}, \quad (1.245)$$

где базисные компоненты удовлетворяют правилам умножения $\mathbf{A}^2 = \mathbf{A}$, $\mathbf{B}^2 = \mathbf{B}$, $\mathbf{B}\mathbf{T} = \mathbf{T}$, $\mathbf{T}\mathbf{A} = \mathbf{T}$, остальные сомножители равны нулю. Разложение (1.245) позволяет обращаться с суперкоррелятором (1.235) как с вектором прямого произведения суперпространств.

В результате поведение самоорганизующейся системы описывается лагранжианом

$$\mathcal{L} = \left(\varphi \dot{\eta} - \bar{\psi} \dot{\psi} - \frac{\varphi^2}{2} \right) + (\tilde{V}'\{\eta\}\varphi - \bar{\psi}\tilde{V}''\{\eta\}\psi). \quad (1.246)$$

Введем замороженный беспорядок

$$p^2 = \frac{\overline{(f(\mathbf{r}) - \bar{f})^2} - (\Delta\varphi)^2}{(\Delta\varphi)^2}, \quad (1.247)$$

величина которого характеризует случайный разброс поля $f(\mathbf{r})$ по объему (здесь черта означает усреднение по координате \mathbf{r} , $(\Delta\varphi)^2 \equiv |\varphi_{\omega=0}|^2$ — среднеквадратичная флуктуация). При включении замороженного беспорядка квадратичная по флуктуациям φ составляющая действия, отвечающего лагранжиану (1.246), принимает вид

$$-\frac{1}{2} \int |\varphi_{\omega}|^2 \frac{d\omega}{2\pi} - \frac{p^2}{2} \int \delta(\omega) |\varphi_{\omega}|^2 d\omega. \quad (1.248)$$

Здесь мы опустили интегрирование по \mathbf{r} и перешли к фурье-образам по частоте ω . При равновесном беспорядке разброс поля $f(\mathbf{r})$ сводится к среднеквадратичной флуктуации $(\Delta\varphi)^2$, так, что $p = 0$, и выражение (1.248) сводится к стандартной форме $-(1/2) \int \varphi^2 dt$. В условиях закалки имеем $p > 0$, и второе слагаемое в (1.248) приводит к перенормировке затравочного суперкоррелятора (1.237), компонента $S^{(0)}$ которого приобретает в (1.243) множитель $1 + 2\pi p^2 \delta(\omega)$.

Соответственно для оператора \mathbf{L} в уравнении движения (1.236) находим

$$\begin{aligned}\mathbf{L} &= L_+ \mathbf{A} + L_- \mathbf{B} + L \mathbf{T}; & L_{\pm} &= (1 - \sigma) \pm i\omega, \\ L &= - [1 + 2\pi p^2 \delta(\omega)].\end{aligned}\quad (1.249)$$

Кроме указанной перенормировки затравочного суперкоррелятора, замороженный беспорядок приводит к появлению эффективного притяжения [56]. Для простоты мы не будем учитывать его, ограничиваясь указанием на характер его влияния в конце рассмотрения.

Для получения уравнения, определяющего суперкоррелятор (1.235), следует умножить (1.230) на $\Phi(z')$ и усреднить результат по распределению $P\{\Phi\}$ в (1.218). В результате приходим к суперуравнению Дайсона

$$\mathbf{C}^{-1} = \mathbf{L} - \mathbf{\Sigma}, \quad (1.250)$$

где в рамках Φ^4 -модели (1.228) собственно энергетический супероператор $\mathbf{\Sigma}$ определен равенством

$$\Sigma(z, z') = \frac{2}{3} w^2 (1 + 6\sigma)^2 (C(z, z'))^3, \quad z \equiv \{\mathbf{r}, t, \bar{\chi}, \chi\}. \quad (1.251)$$

Здесь $w > 0$ — параметр ангармонизма, отнесенный к интенсивности шума T , и учтено условие $\int C(z, z) dz = 0$, следующее из равенств (1.238), (1.245).

В пренебрежении ангармонизмом имеем $\mathbf{\Sigma} = 0$, и из (1.250) получаем компоненты (1.243), которые расходятся в точке $\sigma=1$, определяющей переход в режим самоорганизации. Таким образом, суперсимметричный полевой подход позволяет уже в линейном приближении воспроизвести основной результат, следующий из системы Лоренца (1.212) — (1.214). В общем случае собственно энергетическую суперфункцию следует разложить подобно суперкоррелятору (1.245):

$$\mathbf{\Sigma} = \Sigma_+ \mathbf{A} + \Sigma_- \mathbf{B} + \Sigma \mathbf{T}. \quad (1.252)$$

Тогда с учетом (1.249) суперуравнение (1.250) сводится к компонентам

$$G_{\pm}^{-1} = [(1 - \sigma) \pm i\omega] - \Sigma_{\pm}, \quad (1.253)$$

$$S = [1 + 2\pi p^2 \delta(\omega) + \Sigma] G_+ G_-. \quad (1.254)$$

Явный вид коэффициентов разложения (1.252) задается выражением (1.251). Согласно [57] при этом перемножение суперкорреляторов должно пониматься в обычном, а не функциональном смысле: $[T(\chi, \chi')]^2 = T(\chi, \chi')$, $A(\chi, \chi')T(\chi, \chi') = T(\chi, \chi')A(\chi, \chi') = A(\chi, \chi')$, $B(\chi, \chi')T(\chi, \chi') = T(\chi, \chi')B(\chi, \chi') = B(\chi, \chi')$, остальные произведения дают нуль. В результате из (1.251) для пространственно-одномерного случая получаем

$$\Sigma_{\pm}(t) = 2w^2(1 + 6\sigma)^2 S^2(t)G_{\pm}(t), \quad (1.255)$$

$$\Sigma(t) = (2/3)w^2(1 + 6\sigma)^2 S^3(t). \quad (1.256)$$

При подстановке в уравнения Дайсона (1.253), (1.254) нам понадобится частотное представление этих выражений, содержащее свертки. Эту трудность можно обойти, используя флуктуационно-диссипационную теорему [35, 57]

$$S(\omega') = \frac{2}{\omega'} \text{Im}G_{\pm}(\omega'), \quad \Sigma(\omega') = \frac{2}{\omega'} \text{Im}\Sigma_{\pm}(\omega'), \quad (1.257)$$

где фигурирует действительная частота ω' . Используя спектральное представление функции комплексной частоты ω , после интегрирования равенств (1.257) находим

$$S(t \rightarrow 0) = G_{\pm}(\omega \rightarrow 0), \quad \Sigma(t \rightarrow 0) = \Sigma_{\pm}(\omega \rightarrow 0). \quad (1.258)$$

Поскольку $G_{\pm}(\omega \rightarrow 0)$ дает восприимчивость χ , то в гидродинамическом пределе $\omega \rightarrow 0$ получаем

$$S(t \rightarrow 0) = \chi \equiv G_{\pm}(\omega \rightarrow 0), \quad (1.259)$$

$$\Sigma_{\pm}(\omega \rightarrow 0) = \frac{2}{3}w^2(1 + 6\sigma)^2 \chi^3, \quad (1.260)$$

где в равенстве (1.260) использовано выражение (1.256). В отличие от [58] здесь собственно энергетические компоненты Σ_{\pm} содержат только второй порядок ангармонизма w .

Равенства (1.253) – (1.256), (1.259), (1.260) позволяют полностью описать поведение самоорганизующейся системы. В частности, кроме упорядочения, они позволяют представить эффекты потери эргодичности и появления памяти. Последние проявляются в

удлинении корреляторов ⁷⁾:

$$G_-(\omega) = -\Delta + G_{-0}(\omega), \quad S(t) = q + S_0(t) \quad (1.261)$$

за счет параметра памяти Эдвардса–Андерсона $q = \langle \eta(\infty)\eta(0) \rangle$ и необратимого отклика $\Delta = \chi - \chi_0$, равного разности микроскопической (изотермической) восприимчивости $\chi \equiv G_{-0}(\omega \rightarrow 0)$ и макроскопической (адиабатической) восприимчивости Кубо $\chi_0 \equiv G_{-0}(\omega=0)$.⁸⁾

Подставим удлиненные корреляторы (1.261) в выражения (1.255), (1.256). Тогда перенормированные компоненты собственно энергетической суперфункции принимают вид

$$\begin{aligned} \Sigma_{\pm}(t) &= 2w^2(1 + 6\sigma)^2 q^2 (-\Delta + G_{\pm 0}(t)) + \Sigma_{\pm 0}(t), \\ \Sigma_{\pm 0}(t) &\equiv 2w^2(1 + 6\sigma)^2 S_0(t) G_{\pm 0}(t) (2q + S_0(t)); \end{aligned} \quad (1.262)$$

$$\begin{aligned} \Sigma(t) &= (2/3)w^2(1 + 6\sigma)^2 q^2 (q + 3S_0(t)) + \Sigma_0(t), \\ \Sigma_0(t) &\equiv (2/3)w^2(1 + 6\sigma)^2 S_0^2(t) (3q + S_0(t)). \end{aligned} \quad (1.263)$$

Здесь нелинейные по корреляторам $G_{\pm 0}$, S_0 члены собраны в слагаемых $\Sigma_{\pm 0}$, Σ_0 , во втором равенстве (1.262) учтена связь (1.259), а в (1.263) опущены слагаемые, содержащие $S_0\Delta \simeq 0$; первые слагаемые в определениях величин $\Sigma_{\pm}(t)$, $\Sigma(t)$ исчезают в отсутствие памяти. Подставляя фурье–образы равенств (1.261), (1.263) в уравнение Дайсона (1.254), получаем в ω –представлении

$$q_0 [1 - (2/3)w^2(1 + 6\sigma)^2 \chi_0^2 q_0^2] = p^2 \chi_0^2, \quad (1.264)$$

$$S_0 = \frac{(1 + \Sigma_0)G_+G_-}{1 - 2w^2(1 + 6\sigma)^2 q^2 G_+G_-}. \quad (1.265)$$

Первое из этих уравнений обусловлено включением памяти, которая приводит к δ –образному вкладу при $\omega = 0$, второе отвечает

⁷⁾Укажем на обратный знак необратимого отклика Δ по сравнению с определением для термодинамических систем, где, кроме того, упорядочение отвечает области малых значений интенсивности шума (температуры).

⁸⁾При определении восприимчивостей χ_0 , χ можно использовать единую функцию отклика $G_-(\omega)$, полагая, что величины $\chi_0 \equiv G_-(\omega = 0)$, $\chi \equiv G_-(\omega \rightarrow 0)$ отвечают равновесному и неравновесному значениям. Тогда в формулах (1.258) — (1.260) всем корреляторам следует приписать индекс 0 и положить $\omega=0$.

конечным частотам $\omega \neq 0$. При $\omega \rightarrow 0$ характерная комбинация $G_+G_- = \chi_0^2$, и полюс структурного фактора (1.265)

$$2w^2(1 + 6\sigma^c)^2 q_0^2 = \chi_0^{-2} \quad (1.266)$$

определяет точку потери эргодичности σ^c , в которой $\chi_0 = \chi$, $q_0 = q$.

Подставим теперь фурье-образ выражения (1.262) в уравнение (1.253). Тогда, используя для $\Sigma_{\pm 0}(\omega)$ равенство (1.260), в гидродинамическом пределе $\omega \rightarrow 0$ получаем уравнение для запаздывающей функции Грина

$$G_-^{-1} + 2w^2(1 + 6\sigma)^2 q^2 G_- = [(1 - \sigma) - i\omega] - 2w^2(1 + 6\sigma)^2 \chi^2 (q + \chi/3), \quad (1.267)$$

где учтена связь (1.259). Отсюда для микроскопической восприимчивости $\chi \equiv G_-(\omega \rightarrow 0)$ следует

$$1 - (1 - \sigma)\chi + (2/3)w^2(1 + 6\sigma)^2 \chi [(\chi + q)^3 - q^3] = 0. \quad (1.268)$$

Уравнения (1.264), (1.266), (1.268) полностью определяют поведение самоорганизующейся системы с замороженным беспорядком. При этом следует различать макроскопические величины q_0 , χ_0 и микроскопические q , χ (первым отвечает частота $\omega = 0$, вторым — предел $\omega \rightarrow 0$). Характерная особенность такой иерархии состоит в том, что макроскопические значения q_0 , χ_0 зависят только от интенсивности замороженного беспорядка p , а микроскопические q , χ — от термического беспорядка σ . Соответственно при определении q_0 , χ_0 величина σ должна полагаться равной значению $\sigma^c(p)$ на линии потери эргодичности, а для q , χ критическое значение $p^c(\sigma)$ принимает интенсивность замороженного беспорядка. В результате уравнения (1.264), (1.266) определяют макроскопические величины q_0 , χ_0 , а уравнение (1.268) — микроскопические q , χ . При этом роль параметров состояния играют внешняя добавка f_{ext} к самосогласованному полю f (далее полагаем $f_{ext} = 0$), дисперсия p поля f , задающая интенсивность замороженного беспорядка (1.247) и параметр термического беспорядка $\sigma \equiv S_e/S_c$.

Комбинируя равенства (1.264), (1.266), находим выражение для макроскопического параметра памяти

$$q_0 = (3/4)^{1/3} (1 + 6\sigma^c)^{-2/3} (p/w)^{2/3}, \quad (1.269)$$

который монотонно возрастает с увеличением p . Подстановка (1.269) в (1.266) дает макроскопическую восприимчивость

$$\chi_0 = 2^{1/6} 3^{-1/3} w^{-1/3} (1 + 6\sigma^c)^{-1/3} p^{-2/3}, \quad (1.270)$$

спадающую с ростом p .

Задавая микроскопический параметр памяти в уравнении (1.268) выражением (ср. с (1.269))

$$q = (3/4)^{1/3} (1 + 6\sigma)^{-2/3} (p^c/w)^{2/3}, \quad (1.271)$$

находим микроскопические значения q , χ в зависимости от σ (рис. 1.25, 1.26). Характерная особенность этих зависимостей состоит в двузначности функций $q(\sigma)$, $\chi(\sigma)$ при малом термическом беспорядке. Поскольку с приближением к точке потери устойчивости восприимчивость должна возрастать, то значения q , χ , показанные на рис. 1.25, 1.26 пунктирными линиями, являются неустойчивыми. С дальнейшим ростом σ происходит обрыв в точке упорядочения σ_c , где $d\chi/d\sigma = \infty$. Увеличение параметра ангармонизма w приводит к уменьшению обеих восприимчивостей χ , χ_0 .

Точка потери эргодичности задается уравнением

$$3A + (A+1)^3 = 1 + 2(1 - \sigma^c)p^{-2}, \quad A \equiv 2^{5/6} 3^{-2/3} (1 + 6\sigma^c)^{1/3} w^{1/3} p^{-4/3}, \quad (1.272)$$

получающимся из условия $\chi = \chi_0$ с учетом равенств (1.268) — (1.271). Как видно из рис. 1.26, величина σ_c , отвечающая точке упорядочения, определяется максимальным значением σ^c , соответствующим потере эргодичности. Зависимости $\sigma^c(p)$, $\sigma_c(p)$, представляющие фазовую диаграмму самоорганизующейся системы, показаны на рис. 1.27. Видно, что положение границы σ_c неупорядоченного состояния, отвечающего малым значениям σ , не зависит от p , а ширина σ^c эргодической области уменьшается с ростом замороженного беспорядка. Сравнивая рис. 1.27а и 1.27б, видим, что поведение самоорганизующейся системы весьма чувствительно к выбору параметра ангармонизма w , рост которого уменьшает области неупорядоченной и эргодической фаз. На рис. 1.28 приведена соответствующая зависимость $\sigma_c(w)$ для параметра термического беспорядка, отвечающего упорядочению. При $w = 0$ реализуется максимальное значение

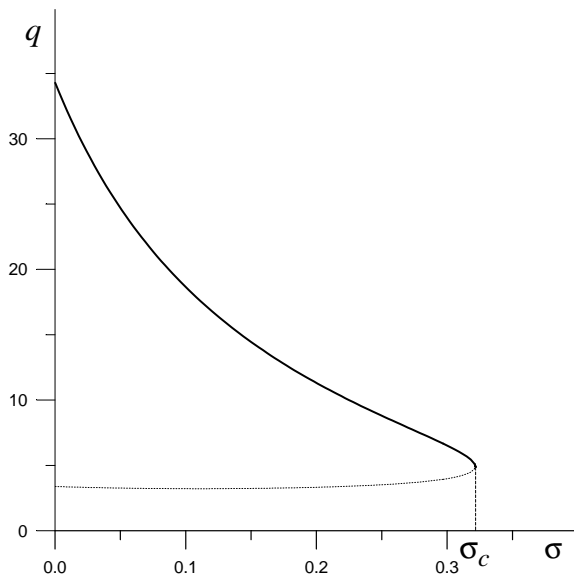


Рисунок 1.25 — Зависимость микроскопического параметра памяти q от интенсивности термического беспорядка σ при параметре ангармонизма $w = 0.01$ (пунктирная линия отвечает неустойчивому состоянию, σ_c — точка упорядочения)

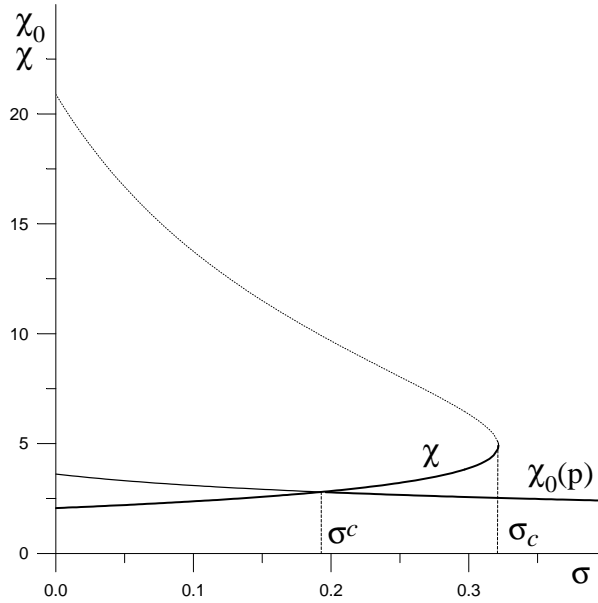


Рисунок 1.26 — Зависимость микроскопической χ и макроскопической χ_0 восприимчивостей от интенсивности термического беспорядка σ при параметре ангармонизма $w = 0.01$ (пунктирная и тонкая сплошная линии отвечают неустойчивому состоянию, жирная — устойчивому; σ^c — точка потери эргодичности, σ_c — точка упорядочения)

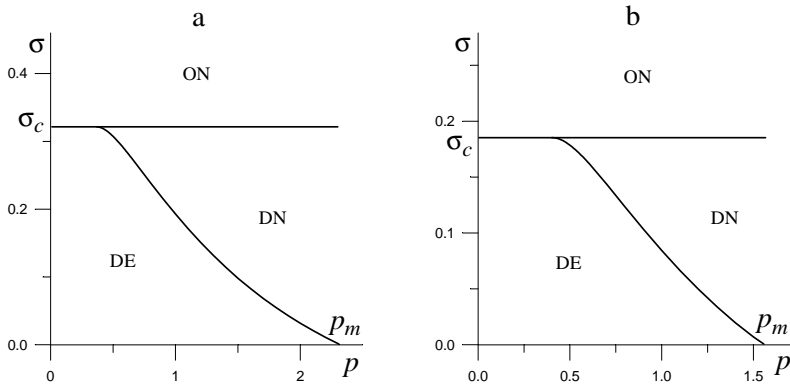


Рисунок 1.27 — Фазовая диаграмма: а — при $w = 0.01$; б — при $w = 0.02$
(O — упорядоченная фаза, D — разупорядоченная, E — эргодическая,
N — неэргодическая)

$\sigma_c = 1$, рост w приводит к монотонному спаданию до $\sigma_c = 0$ при $w_c = 0.064$. Максимальное значение $p_m \equiv p^c(\sigma = 0)$ замороженного беспорядка на линии потери эргодичности изменяется с величиной w согласно зависимости, показанной на рис. 1.29. При малых w имеем неограниченное нарастание величины $p_m \propto w^{-1/2}$, а с ростом параметра ангармонизма выше критического значения w_c эргодическая область вообще пропадает. Согласно [56] включение эффективного притяжения, обусловленного замороженным беспорядком, приводит к расширению областей упорядочения и потери эргодичности.

Значение параметра неэргодичности определяется решением уравнений (1.268) — (1.271). При постоянной интенсивности замороженного беспорядка p (рис. 1.30а) возможны три режима. При малых p макроскопическая восприимчивость χ_0 для любых значений σ превышает микроскопическую величину $\chi(\sigma)$ (см. рис. 1.26), и система всегда находится в эргодическом состоянии. С достижением значений p , превышающих порог p_c , отвечающий условию $\chi_0(p_c) = \chi(\sigma^c)$, параметр неэргодичности $\Delta = \chi - \chi_0$ принимает ненулевые значения только в области $\sigma > \sigma^c$. Начиная со значения p_m ,

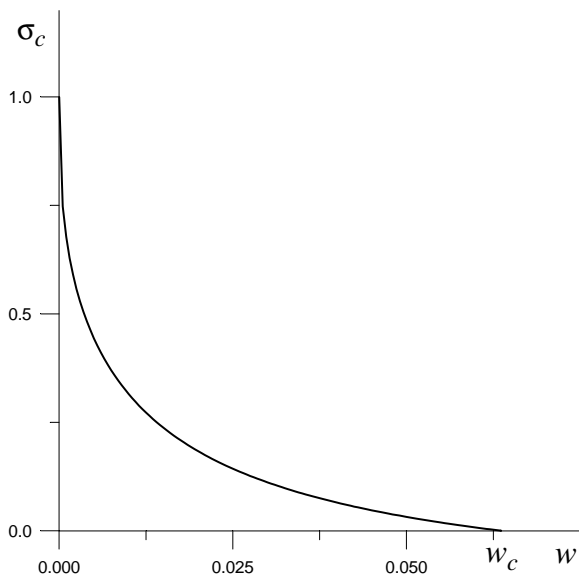


Рисунок 1.28 — Зависимость интенсивности термического беспорядка σ_c , отвечающей точке упорядочения, от параметра ангармонизма w

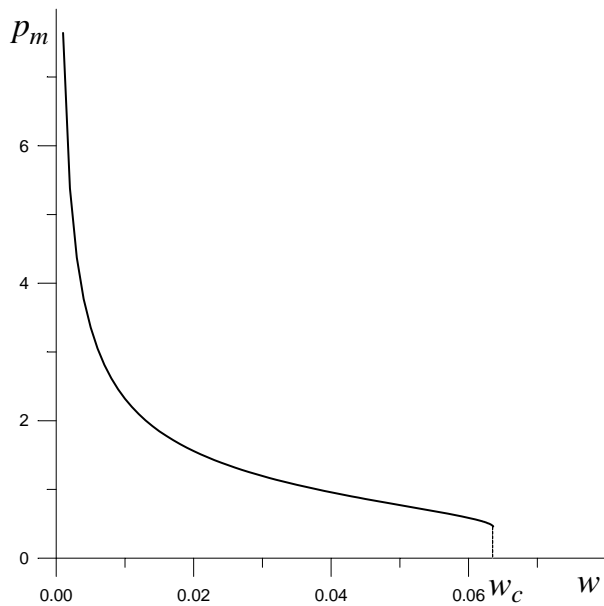


Рисунок 1.29 — Зависимость максимальной интенсивности p_m замороженного беспорядка на границе эргодической области от параметра ангармонизма w

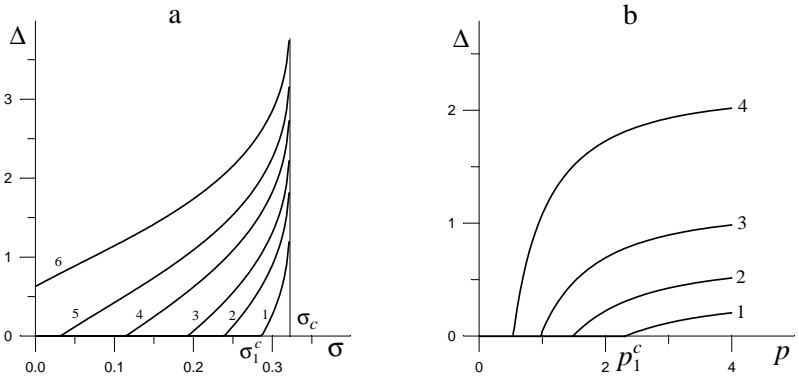


Рисунок 1.30 — Зависимость параметра неэргодичности Δ : а — от интенсивности термического беспорядка σ (кривые 1 — 6 отвечают $p = 0.6; 0.8; 1.0; 1.4; 2.0; 4.0$ соответственно); б — от интенсивности замороженного беспорядка p (кривые 1 — 4 отвечают $\sigma = 0.0; 0.1; 0.2; 0.3$ соответственно). Параметр ангармонизма $w = 0.01$

отвечающего условию $\chi_0(p_m) = \chi(\sigma = 0)$, микроскопическая восприимчивость χ для любых σ превышает макроскопическую χ_0 , и система всегда неэргодична (кривая 6). При фиксированном значении термического беспорядка σ (рис. 1.30b) зависимость $\Delta(p)$ определяется бесконечным нарастанием макроскопической восприимчивости $\chi_0 \sim p^{-2/3}$ в области слабого замороженного беспорядка $p \rightarrow 0$. В результате параметр неэргодичности приобретает ненулевые значения, начиная с критического значения p^c , и с дальнейшим ростом замороженного беспорядка монотонно возрастает.

Аналитическое представление зависимости $\Delta(\sigma, p)$ достигается только вблизи линии потери эргодичности $\sigma^c(p)$. Полагая в (1.268) $0 < \sigma - \sigma^c \ll \sigma^c$, $\chi = \chi_0 + \Delta$, $\Delta \ll \chi$, в первом порядке по малым величинам $(\sigma - \sigma^c)/\sigma^c$, Δ/χ с учетом (1.270) находим

$$\Delta = B(p)(\sigma^c - \sigma),$$

$$B \equiv \left[2 + \frac{2\chi_0}{q_0} + \left(\frac{\chi_0}{q_0} \right)^2 \right] \left[(1 - \sigma^c) - \frac{2}{\chi_0} - \frac{3}{q_0} - \frac{4\chi_0}{3q_0^2} \right]^{-2}. \quad (1.273)$$

Значение коэффициента $B(p)$ расходится в точке, отвечающей расходимости производной $d\chi/d\sigma$ при $\sigma = \sigma_c$ (см. рис. 1.26). При фиксированной величине термического беспорядка следует провести разложение по $q_0^c - q_0$ в равенстве (1.270). Тогда с учетом зависимости (1.269) в линейном приближении получаем

$$\Delta = q_0^c \left[(p/p^c)^{2/3} - 1 \right], \quad (1.274)$$

где критическое значение параметра памяти q_0^c отвечает точке потери эргодичности p^c .

1.4.4 Микроскопическое условие самоорганизующей критичности

Как показывает проведенное рассмотрение, при заданных значениях σ , p интенсивностей термического и замороженного беспорядков поведение самоорганизующейся системы представляется, с одной стороны, полями параметра порядка η и амплитуды флуктуаций φ сопряженного поля, а с другой — парой грассманово сопряженных полей ψ , $\bar{\psi}$. В микроскопическом представлении им отвечают бозевский

и фермиевский газы, взаимодействующие между собой через потенциал v в гамильтониане (1.205). Поскольку при переходе к самосогласованной полевой схеме пара треххвостых вершин, отвечающих v , образует четыреххвостку, которой соответствует параметр ангармонизма w в затравочном суперпотенциале (1.228), то можно полагать, что выполняется равенство $w = v^2$. Тогда выражение (В.6) для критического значения термического беспорядка S_c , в котором следует учесть множитель w^{-1} (см. после (1.228)), принимает вид

$$S_c = \frac{\varepsilon \tau_S}{2 \tau_\eta} \left(\frac{T}{v} \right)^2, \quad (1.275)$$

где мы перешли к размерным единицам, T — интенсивность шума, сводящаяся для термодинамических систем к температуре. Полученная зависимость $S_c(v)$ имеет тот же характер, что и в последней формуле (1.211). отождествляя их, находим выражение для параметра рассогласования ε , обеспечивающего необратимость времени в уравнении баланса энтропии (В.2):

$$\varepsilon = c \left(\frac{\tau_0}{\tau_\eta} \right)^2; \quad c \equiv \frac{2}{\pi^2 \hbar^2} \frac{\tau_\eta^2}{\tau_h \tau_S}, \quad \tau_0 \equiv \frac{2\pi \hbar}{T}. \quad (1.276)$$

Здесь использованы размерные единицы, \hbar — постоянная Планка. Коэффициент c определяется отношением характерных времен $\tau_h \tau_S / \tau_\eta^2$. Можно полагать, что c является константой, и параметр рассогласования (1.276) определяется квадратом отношения времени квантовой флуктуации τ_0 к макроскопическому времени τ_η , на котором изменяется параметр порядка. Очевидно, всегда $\varepsilon \ll 1$.

Особенность самосогласованной суперсимметричной схемы, развитой в подразделах 1.4.1 — 1.4.3, состоит в том, что она позволяет выйти за рамки адиабатического приближения. В условиях его применимости $v \ll v_c$ критическая величина термического беспорядка определяется равенством (1.275). С ростом параметра взаимодействия происходит полное подавление эргодического состояния при величинах v , превышающих критическое значение $v_c = 0.252$. При этом существенным образом проявляются эффекты взаимно согласованного влияния компонент суперполя, и следует использовать зависимости типа представленных на рис. 1.25 — 1.30.

В подразделе 1.2.1 на простейшем примере течения песка по наклонной поверхности было показано, что развитая схема представляет процесс формирования лавины в явлениях самоорганизуемой критичности [23] — [25], [30], [33], [34], [59] — [61]. Подобно спиновым стеклам [62], эффективный потенциал образует сложный ландшафт в конфигурационном пространстве системы, где области разрешенных состояний разделены барьерами, разделяющими полный статистический ансамбль на подансамбли [59]. Поэтому полное описание самоорганизуемой критичности требует исследования распределения по набору статистических ансамблей неэргодической системы [14]. Такой набор отвечает различным размерам лавин, распределение по которым исследовалось в подразделах 1.2.4, 1.2.5.

Изложенный подход претендует на описание условий образования одиночной лавины. Как видно из рис. 1.28, в зависимости от параметра взаимодействия $v \equiv \sqrt{w}$ можно выделить два типа систем: при докритических значениях $v < v_c$ переход в режим самоорганизации требует, чтобы интенсивность термического беспорядка превышала критическое значение σ_c ; в противоположном случае $v > v_c$ процесс упорядочения реализуется независимо от внешних условий. Первый из этих случаев отвечает фазовому переходу, обусловленному внешним воздействием, второй — режиму самоорганизуемой критичности, прерывистый характер которого реализуется только для неэргодических систем. Из фазовой диаграммы, показанной рис. 1.27, видно, что система неэргодична, если величина замороженного беспорядка p превышает максимальное значение p_m , определяемое величиной w . Согласно зависимости, приведенной на рис. 1.29, при закритическом значении $w > w_c$ процесс самоорганизации является неэргодическим даже в отсутствие замороженного беспорядка. Таким образом, микроскопическое условие реализации самоорганизуемой критичности сводится к ограничению параметра ангармонизма w в затравочном суперпотенциале (1.228) минимальным значением $w_c = 0.064$, которое обеспечивает как самоорганизацию системы, так и прерывистый характер эволюции.

Глава 2

Структурные превращения вдали от равновесия

Исследование структуры конденсированной среды и ее превращений занимает одно из центральных мест в современном материаловедении, экспериментальной и теоретической физике (см. [11], [63] — [71]). Значительное продвижение в этом направлении было достигнуто благодаря использованию представлений о перестройке кристаллической структуры как о фазовом превращении, наблюдающемся в магнетиках, сегнетоэлектриках, сверхпроводниках и т. д. [72] — [77]. В последнее время большое внимание привлекают превращения в системах типа спиновых и структурных стекол, которые значительно удалены от состояния равновесия [78] — [81]. Их исследование требует использования методов статистической физики, основанных на неэргодической теории, картине фазового пространства с ультраметрической топологией и т. п. [62], [82], [83]. Есть основания полагать, что указанные особенности должны проявляться не только в аморфном состоянии, но и во всех системах, значительно удаленных от термодинамического равновесия [54].

Данная глава посвящена теоретическому исследованию структурных превращений конденсированной среды, которая благодаря интенсивному внешнему воздействию приобретает сильно неравновесный характер. Будет развит подход, который позволяет последовательным образом представить перестройку кристаллической структуры на микроскопическом (разделы 2.1, 2.2), а также мезо- и

макроскопическом уровнях (разделы 2.3 — 2.8).

Известно, что при описании кристаллического превращения как фазового перехода типа смещения параметр порядка сводится к компоненте тензора деформации решетки. Однако при этом совершенно неясно, как разделить полевую (упругую) и материальную (пластическую) составляющие вектора смещения атомов в процессе превращения. В разделе 2.1 эта проблема разрешается на основе концепции перестраиваемого потенциального рельефа. Показано, что динамическая компонента вектора смещений описывает колебания атомов в неизменном рельефе, а смещение его минимумов при удалении от равновесия — деформацию превращения кристаллической решетки. При этом оказывается (раздел 2.2), что переход типа мартенситного превращения не может быть сведен к обычному фазовому переходу. Наиболее адекватным его представлением является синергетический подход, который сводится к теории Ландау только в адиабатическом приближении, отвечающем диссипативному режиму эволюции системы.

При значительном удалении от равновесия система теряет эргодичность, и ее фазовое пространство разбивается на кластеры, которые отвечают разным структурным уровням, иерархически соподчиненным друг другу. В разделе 2.3 проводится исследование распределения системы по уровням иерархического дерева, представляющего пространство с ультраметрической топологией. Приложению развитых представлений к реальному кристаллу посвящен раздел 2.4, где проводится модификация решеточного преобразования Фурье для иерархически соподчиненных структур. Показано, что адекватное представление такого рода фрактальных структур достигается за счет использования разложения по волнам распределения атомов, модулированным в ультраметрическом пространстве. На основе такого представления удастся объяснить ряд экспериментальных данных по структурной релаксации, в ходе которой структурные единицы различных уровней когерентно связываются в единый статистический ансамбль. Исследованию особенностей структурной релаксации в различных системах посвящены разделы 2.4 — 2.8.

В первом из них рассматривается эволюция кристаллической структуры в ходе полиморфного ГПУ \leftrightarrow ГЦК превращения, которое осуществляется через стадию образования одномерных длиннопери-

одных структур. Показано, что термодинамический потенциал, отвечающий их различным типам, имеет фрактальную природу, благодаря чему эволюция системы определяется движением по иерархическому дереву. В системах с сильно выраженной иерархией одномерные длиннопериодные структуры практически стабильны или медленно релаксируют из одного типа в другой. При наличии дальнего действия стабилизации одномерных длиннопериодных структур способствует рост их периода.

В подразделе 2.5.1 исследована кинетика низкотемпературной эволюции орторомбической фазы нестехиометрических оксидов через стадию гомологических и/или микрокристаллических структур. Показано, что адекватное представление процесса структурной перестройки требует использования концепции ультраметрического пространства. На основе анализа фрактальной структуры распределения термодинамического потенциала в конфигурационном пространстве найдены особенности временных асимптотик структурного фактора и оценено время образования и распада структуры. Показано, что при росте нестехиометричности наблюдается переход от дебаевской кинетики к замедленной степенной или логарифмической. Согласно подразделу 2.5.2 течение структурной релаксации позволяет объяснить особенности магнитной без привлечения дополнительных моделей типа сверхпроводящего стекла.

Еще один пример иерархических структур представляет система *переходной металл–металлоид*, рассмотренная на примере $\text{Pd} - \text{H}$ в разделе 2.6. Особенности ее поведения связаны с тем, что насыщение водородом приводит к изоморфному $\alpha \rightarrow \beta$ превращению, сопровождающемуся значительным расширением решетки и, следовательно, образованием дефектов. В подразделе 2.6.1 установлено, что кинетика $\alpha \rightarrow \beta$ превращения описывается уравнением типа Авраами, содержащим время в первой степени. Дано объяснение экспериментальных данных о длительности инкубационного периода и логарифмической скорости роста β -фазы в зависимости от кристаллографической ориентации. Показано, что иерархически соподчиненные дефектные структуры образуются в ходе дегазации, при которой сжатие решетки за счет обратного $\beta \rightarrow \alpha$ превращения приводит к значительному увеличению плотности дефектов. На основе рентгенографических исследований в подразделе 2.6.2 выяснены

причины стабилизации β -фазы в результате циклирования процесса наводороживания. Построена теоретическая схема, позволяющая единым образом трактовать термодинамические и кинетические особенности процесса дегазации.

Раздел 2.7 посвящен исследованию особенностей поведения макроструктуры, возникающей в ходе мартенситного превращения. На основе анализа экспериментальных данных о ее эволюции при изменении внешних условий развита теоретическая схема, позволяющая единым образом трактовать такие особенности, как атермический характер мартенситного превращения и замороженность изменений макроструктуры, сочетание детерминированности и стохастичности в ее эволюции, различное проявление гистерезиса, взрывной характер мартенситного превращения при неполном циклировании, структурно зависимый дефект модуля, нетривиальное проявление эффекта памяти, особенности акустической эмиссии. Показано, каким образом развитие термодинамической схемы позволяет углубить описание неравновесной макроструктуры мартенсита. Оказывается, что для полного понимания экспериментальной ситуации следует использовать фрактальную теорию типа развитой для спиновых стекол. При этом обратимость мартенситного превращения требует использовать не одномерное, а двумерное иерархическое дерево, которое может менять свою структуру в ходе мартенситного превращения. В рамках такого подхода перестройка мартенситной макроструктуры представляется пучком траекторий между вершинами ортогональных ветвей двумерного дерева. В зависимости от последовательности включения механического и термического воздействий рассмотрены возможные проявления эффектов памяти при эволюции макроструктуры. Проведено сопоставление теории с экспериментом.

Раздел 2.8 основывается на результатах экспериментального исследования взрывной кристаллизации ультрадисперсных аморфных пленок германия. Показано, что при малых толщинах пленки кристаллизация инициируется локальным тепловым воздействием, а при больших — протекает спонтанным образом. Обнаружен фрактальный узор закристаллизовавшейся фазы, присущий картине формирования агрегатов, ограниченных диффузией. Показано, что в отличие от обычного режима кристаллизации взрывная обусловлена

неустойчивостью теплового характера, которая представлена схемой Лоренца. В результате взрывная кристаллизация сводится к явлению самоорганизуемой критичности, при котором распространение фронта представляется диффузией в ультраметрическом пространстве иерархически соподчиненных лавин. Получены выражения для стационарных распределений теплоты кристаллизации и теплового потока. Для различных значений температуропроводности определены теплота, необходимая для инициирования взрывной кристаллизации, и временная зависимость вероятности спонтанной кристаллизации тонкой пленки.

2.1 Смещения атомов сильнонеравновесного кристалла

В пренебрежении нулевыми колебаниями, имеющими квантовую природу, характерная особенность равновесной конденсированной среды состоит в периодическом распределении атомов по узлам решетки, положения которых $\mathbf{R}_m^{(0)}$, $m = 1, 2, \dots, N$ задаются минимумами потенциального рельефа $U(\mathbf{r})$. Внешнее воздействие, сводящееся к повышению температуры, приводит к динамическим смещениям $\mathbf{u}_m^{(d)}$, задающим колебания атомов относительно рельефа $U(\mathbf{r})$. В условиях слабого воздействия, когда допустимо адиабатическое приближение, картина колебаний определяется заданием потенциальной энергии атомов в зависимости от величин смещений [84]:

$$E = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{m_1 \dots m_n} V^{(n)}(\mathbf{R}_{m_1}^{(0)} \dots \mathbf{R}_{m_n}^{(0)}) \mathbf{u}_{m_1}^{(d)} \dots \mathbf{u}_{m_n}^{(d)}, \quad (2.1)$$

где коэффициенты разложения $V^{(n)}$ представляют стационарные значения производных n -го порядка от энергии E по смещениям \mathbf{u}_m . При практическом использовании приходится обрывать ряд (2.1) на нескольких первых слагаемых (например, гармоническое приближение обеспечивается вкладами $n = 0, 1, 2$). Однако с удалением от равновесия наблюдается не только увеличение динамических смещений $\mathbf{u}_m^{(d)}$, но и происходит изменение коэффициентов разложения

(2.1), которое проявляется в размягчении упругих постоянных кристалла. Поскольку обрезанный ряд (2.1) может адекватно представить поведение системы только в том случае, когда отбрасываются члены со слабоизменяющимися коэффициентами $V^{(n)}$, то при значительном удалении от равновесия приходится удерживать много слабых, что обесценивает данный подход.

Изменение величин $V^{(n)}$ с ростом возбуждения системы означает перестройку потенциального рельефа $U(\mathbf{r})$, при которой минимумы $\mathbf{R}_m^{(0)}$ потенциала $U^{(0)}(\mathbf{r})$ невозбужденной системы смещаются в точки \mathbf{R}_m , а также могут исчезать или появляться дополнительные экстремумы. Соответственно усредненные положения атомов претерпевают статические смещения $\mathbf{u}_m^{(st)}$, которые в пренебрежении ангармонизмом сводятся к разности $\mathbf{R}_m - \mathbf{R}_m^{(0)}$. Координатная зависимость $\mathbf{u}_m^{(st)}(\mathbf{R}_m)$, которая характеризует структуру, возникающую в результате перестройки потенциального рельефа, представляется разложением по степеням тензора деформации превращения

$$\eta_{ij} \equiv \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u^{(st)}}{\partial x_i} \frac{\partial u^{(st)}}{\partial x_j} - \delta_{ij} \right). \quad (2.2)$$

Тогда термодинамический потенциал $\Phi \equiv -T \ln \langle \exp(-E/T) \rangle$, получающийся после усреднения по динамическим смещениям, представляется разложением Ландау

$$\Phi = \sum_{n=0}^{\infty} A^{(n)} I_n(\hat{\eta}), \quad (2.3)$$

где $I_n(\hat{\eta})$ — инвариант n -го порядка, составленный из тензора $\hat{\eta}$; $A^{(n)}$ — параметры, определяемые внешним воздействием.

Анализ зависимости величин $A^{(n)}$ от параметров состояния позволяет изучить условия протекания структурных превращений мартенситного типа. Однако такой подход применим, строго говоря, лишь к квазиравновесным системам. Как отмечалось выше, в сильно неравновесном состоянии, где актуальна не только ближайшая окрестность минимума \mathbf{R}_m , но и полный вид зависимости $U(\mathbf{r})$, нужно либо удерживать большое число членов ряда (2.3), либо моделировать перестройку рельефа $U(\mathbf{r})$ в целом. Мы следуем второму подходу.

По аналогии с методом функционала электронной плотности [85] потенциальная энергия (2.1) определяется равенством

$$E = \int U(\mathbf{r})n(\mathbf{r})d\mathbf{r}, \quad (2.4)$$

где опущена зависимость от времени. В свою очередь, распределение атомов $n(\mathbf{r})$ представляется функциональным рядом

$$n(\mathbf{r}) = \sum_{n=1}^{\infty} \underbrace{\int \dots \int}_n K^{(n+1)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_1 \dots \mathbf{r}_n) \prod_{i=1}^n U(\mathbf{r}_i) d\mathbf{r}_i, \quad (2.5)$$

который определяется ядром $K^{(n+1)}$. Легко видеть, что самосогласованная система равенств (2.4), (2.5) приводит к решеточному представлению, которое определяется видом рельефа $U(\mathbf{r})$ вблизи его минимумов \mathbf{R}_l . Действительно, разбивая пространство на ячейки Вигнера—Зейтца, расположенные вблизи узлов \mathbf{R}_l , имеем

$$U(\mathbf{r}) = \sum_l U(\mathbf{r} - \mathbf{R}_l)\theta_l(\mathbf{r}), \quad (2.6)$$

где $\theta_l(\mathbf{r})$ — фильтрующая функция, равная 1 внутри l -й ячейки и 0 вне ее. Потенциальную энергию $U(\mathbf{r} - \mathbf{R}_l)$ вблизи каждого узла \mathbf{R}_l можно разложить в ряд по динамическим смещениям атома $\mathbf{u}_l^{(d)} = \mathbf{r} - \mathbf{R}_l$, после чего комбинирование равенств (2.4) — (2.6) приводит к исходному разложению (2.1). Подобным образом можно получить и разложение по статическим смещениям.

При малом отклонении от равновесия атомы в основном совершают колебательное движение в неизменном потенциальном рельефе, и статические смещения практически не проявляются. Такой процесс характеризуется микроскопически малым временем Дебая $\tau_D = a/c \sim 10^{-13}$ с, где a — межатомное расстояние; $c = \sqrt{\mu/\rho}$ — скорость поперечного звука; μ — модуль сдвига; ρ — плотность среды. При этом сдвиговая вязкость $\eta \gg \rho c a$ настолько велика, что практически не сказываются микроскопические флуктуации потенциального рельефа, который можно считать неизменным. Кроме колебаний, атомы совершают флуктуационные перескоки через барье-

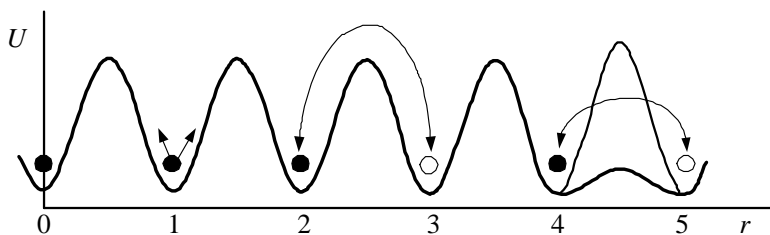


Рисунок 2.1 — Вид координатной зависимости потенциальной энергии атомов: при колебаниях (атом 1), диффузии (атомы 2, 3) и пластическом течении (атомы 4, 5)

ры, которые отвечают процессу диффузии, характеризуемому временем $\tau_d \sim \tau_D \exp(U_m/T)$, где U_m — высота барьера; T — температура. Характерное время t квазиравновесного процесса удовлетворяет условию $t/\tau_d \sim (t/\tau_D) \exp(-U_m/T) \gg 1$, обеспечивающему диффузионный массоперенос.

При значительном удалении от равновесия сдвиговая вязкость становится настолько малой, что выполняется условие

$$\eta \ll \rho c a \exp(U_m/T), \quad (2.7)$$

при котором становятся существенными флуктуации потенциального рельефа. При этом в отличие от элементарных актов диффузии атомы не перескакивают через жесткий потенциальный барьер, а безактивационно переходят между узлами \mathbf{R}_i в моменты флуктуационного изменения рельефа $U(\mathbf{r}, t)$ (см. рис. 2.1). Такие процессы ответственны за пластическое течение среды. Разумеется, при этом поведение системы определяется не только окрестностями минимумов потенциального рельефа, а полным его видом. Более того, в согласии с эргодической гипотезой, определение макроскопических величин подразумевает усреднение по ансамблю рельефов $\{U(\mathbf{r})\}$, формирующемуся в результате флуктуаций зависимости $U(\mathbf{r}, t)$.

Таким образом, последовательное описание систем, значительно удаленных от состояния равновесия, приводит к концепции о по-

тенциальном рельефе, который может менять свою форму $U(\mathbf{r})$ под внешним воздействием [54]. Покажем, каким образом эта концепция позволяет интерпретировать данные о ближнем порядке смещений, наблюдающемся вблизи полиморфных, мартенситных и ω -превращений [86]. В ходе таких превращений потенциальный рельеф $U_{in}(\mathbf{r})$, минимумы которого отвечают положениям атомов исходной фазы, перестраивается в рельеф $U_f(\mathbf{r})$ фазы, получающейся в результате превращения. Так, при ГЦК \rightarrow ГПУ превращении три минимума ГЦК решетки вдоль направления $\langle 111 \rangle$ сливаются в два минимума ГПУ структуры в направлении $[0001]$. Разумеется, с приближением к точке превращения T_0 такая перестройка протекает не по всему объему. Поскольку вдали от T_0 флуктуации $\delta U(\mathbf{r}, t) \equiv U(\mathbf{r}, t) - U_{in}(\mathbf{r})$ пренебрежимо малы, то макроскопический ансамбль рельефов $\{U(\mathbf{r})\}$ практически сводится к исходному $U_{in}(\mathbf{r})$. С приближением к точке превращения флуктуации $\delta U(\mathbf{r}, t)$ изменяются таким образом, что в областях порядка корреляционной длины потенциальный рельеф приобретает конечную форму $U_f(\mathbf{r})$. Это и есть области ближнего порядка смещения. Подобно гетерофазным флуктуациям при переходах *порядок—беспорядок* эти области, будучи метастабильными, динамически исчезают и появляются в разных местах кристалла. С приближением к T_0 суммарный объем областей ближнего порядка растет, распространяясь на весь кристалл в точке фазового перехода T_0 . Происходящая в результате когерентная перестройка потенциального рельефа $\Delta U(\mathbf{r}) \equiv U_f(\mathbf{r}) - U_{in}(\mathbf{r})$ приводит к структурному превращению типа смещения.

2.2 Микроскопическая теория превращений мартенситного типа

Этот раздел посвящен изложению картины, позволяющей представить, каким образом ближний порядок статических смещений, описанный в предыдущем разделе, приобретает дальнедействующий характер. Иными словами, наша задача сводится к построению микроскопической теории фазовых переходов типа смещения. Наиболее актуальным примером такого рода является мартенситное превращение, которое мы будем иметь в виду в дальнейшем.

Мартенситное превращение представляет процесс, постоянное внимание к которому определяется не только его практической значимостью, но и богатством физического содержания картины явления. Уже сформулированные Г.В. Курдюмовым [87] особенности мартенситного превращения — бездиффузионный лавинообразный характер, незавершенность в двухфазной области и принципиальная роль скалывающих компонент упругих напряжений — показали, что использование микроскопической теории фазовых переходов типа смещения, основывающейся на концепции мягкой моды, может объяснить только отдельные стороны явления, но не картину мартенситного превращения в целом.

Вместе с тем сейчас осознано, что даже при термодинамическом превращении эволюция системы может быть адекватно представлена в рамках синергетического подхода, изложенного в разделе 1.1 [7]. Что касается мартенситного превращения, то можно утверждать, что богатство картины явления обусловлено его неравновесным характером, для отражения которого требуется использовать кинетические методы статистической физики [88]. На феноменологическом уровне такое описание сводится к использованию термодинамического потенциала Максвелла—Гюи [89]. Микроскопические теории [90, 91] основываются на лазерном механизме мартенситного превращения, согласно которому бездиффузионная перестройка структуры обеспечивается когерентной связью атомов за счет спонтанного испускания фононов системой, предварительно переведенной в неравновесное состояние. Использование лазерного механизма [13] позволяет естественным образом объяснить такие важные особенности мартенситного превращения, как лавинообразный характер и обратимость превращения, наличие габитусных плоскостей, увеличение пластичности, возможность протекания реконструктивных мартенситных превращений при неполном размягчении критической моды и т. д.

Согласно [92] обусловленное внешним воздействием отклонение от равновесия приводит к изменению одноатомных состояний, представленному в разделе 2.1 на основе концепции перестраиваемого потенциального рельефа $U(\mathbf{r})$. Пример такой перестройки приведен на рис. 2.2, из которого видно, что с отклонением от равновесия, кроме основного минимума, отвечающего исходному положению ато-

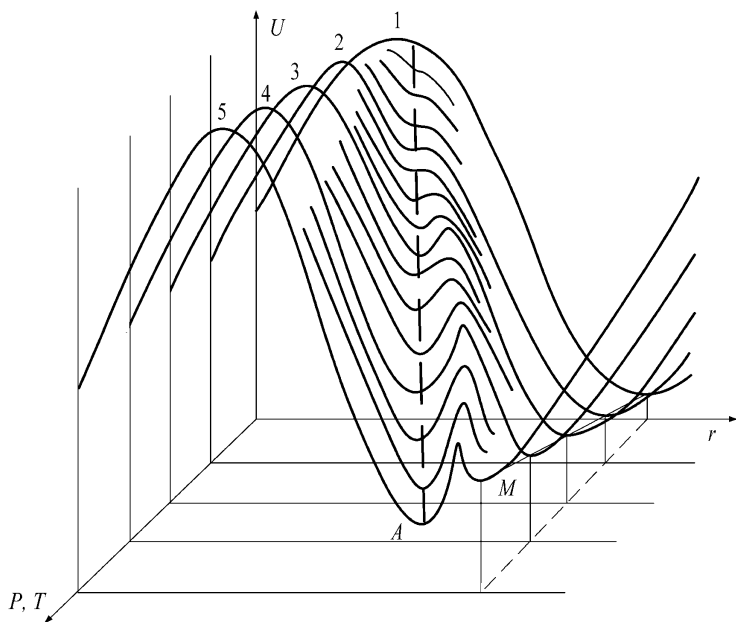


Рисунок 2.2 — Изменение потенциального рельефа $U(\mathbf{r})$ с приближением к точке мартенситного превращения

мов в мартенситной фазе, зависимость $U(\mathbf{r})$ приобретает дополнительный минимум, связанный с аустенитной решеткой. В реальных условиях указанная перестройка реализуется в областях ближнего порядка, доля узлов в которых составляет $n \leq 1$. Рост величины n не приводит к когерентной перестройке решетки до тех пор, пока флуктуации потенциального рельефа в различных областях не будут скоррелированы за счет коллективной моды, роль которой играет ТА-ветвь поперечных фононов.

Следуя разделу 1.1, изложим синергетическую теорию мартенситного превращения, в рамках которой доля узлов n , определяющая

степень перестройки одночастичных состояний, играет роль управляющего параметра [54]. Кроме n следует ввести параметр порядка ϵ и сопряженное поле σ , величины которых определяют поведение фоновой моды: параметр ϵ представляет сдвиговую компоненту деформации превращения, которая определяется плотностью бозе–конденсата статических ТА–фононов; поле σ сводится к соответствующей компоненте тензора упругих напряжений. Скорость изменения управляющего параметра \dot{n} задается, с одной стороны, интенсивностью диссипативных процессов, характеризуемой временем релаксации τ_n , а с другой — влиянием коллективной моды, которое определяется ее амплитудой ϵ и сопряженным полем σ :

$$\dot{n} = \frac{n_e - n}{\tau_n} - g_n \epsilon \sigma. \quad (2.8)$$

Здесь n_e — значение n , задаваемое внешними условиями; g_n — положительная константа связи. Первое из уравнений, определяющих поведение коллективной моды, сводится к известному уравнению Максвелла для вязкоупругой среды [93]:

$$\dot{\epsilon} = -\frac{\epsilon}{\tau} + \frac{\sigma}{\eta}. \quad (2.9)$$

Здесь первый член отвечает релаксации деформации со временем τ ; второй описывает течение среды под действием напряжений σ ; η — сдвиговая вязкость. В стационарном состоянии $\dot{\epsilon} = 0$ уравнение (2.9) сводится к закону Гука $\sigma = \mu\epsilon$, где модуль сдвига μ задает время релаксации τ согласно известному соотношению [93]:

$$\tau = \frac{\eta}{\mu}. \quad (2.10)$$

Соответственно уравнение для скорости изменения упругих напряжений записывается в виде

$$\dot{\sigma} = -\frac{\sigma}{\tau_\sigma} + g_\sigma \epsilon n, \quad (2.11)$$

где τ_σ , g_σ — положительные константы, первая из которых определяет процесс релаксации напряжений, вторая — их рост за счет перестройки атомного потенциала.

Полученная система (2.9), (2.11), (2.8) совпадает с уравнениями Лоренца (1.1) — (1.3). Отрицательный характер нелинейной связи в уравнении (2.8) означает уменьшение доли перестроенных атомных конфигураций при увеличении упругой энергии коллективной моды. Соответственно нелинейное слагаемое в уравнении (2.11) описывает положительную обратную связь, которая и является причиной самоорганизации конденсированной среды.

Указанные равенства формируют полную систему уравнений, которая определяет самосогласованное поведение коллективной моды фононов и одиночных возбуждений атомов в ходе мартенситного превращения. Диссипативный характер фазового перехода реализуется при соотношении времен релаксации $\tau_\sigma, \tau_n \ll \tau$, согласно которому медленная эволюция параметра порядка $\epsilon(t)$ подавляет быстрые изменения величин $\sigma(t)$, $n(t)$. Тогда в уравнениях (2.8), (2.11) можно принять адиабатическое приближение $\dot{n} = \dot{\sigma} = 0$, в рамках которого получаем характерный масштаб изменения управляющего параметра:

$$n_c \equiv \mu/A_\sigma = \eta/\tau\tau_\sigma g_\sigma, \quad A_\sigma \equiv \tau_\sigma g_\sigma. \quad (2.12)$$

Временная зависимость параметра порядка $\epsilon(t)$ определяется уравнением регрессии Ландау–Халатникова

$$\tau \dot{\epsilon} = - \frac{\partial V}{\partial \epsilon}. \quad (2.13)$$

При постоянных значениях τ , η синергетический потенциал $V(\epsilon)$ в пределе $\epsilon^2 \ll \epsilon_m^2 \equiv (A_n A_\sigma)^{-1}$, $A_n \equiv \tau_n g_n$ сводится к разложению Ландау:

$$V = \frac{1}{2} \left[\epsilon^2 - \frac{n_e}{n_c} \epsilon_m^2 \ln \left(1 + \frac{\epsilon^2}{\epsilon_m^2} \right) \right] \simeq \frac{A}{2} \epsilon^2 + \frac{B}{4} \epsilon^4, \quad (2.14)$$

$$A \equiv 1 - \frac{n_e}{n_c}, \quad B \equiv \epsilon_m^{-2} = A_n A_\sigma. \quad (2.15)$$

Согласно (2.14), (2.15) характер стационарного состояния, отвечающего условию $\partial V/\partial \epsilon = 0$, определяется соотношением между величиной параметра n_e , задаваемой внешними условиями, и критическим значением n_c , определенным равенством (2.12). В подкритическом режиме $n_e < n_c$, когда зависимость (2.14) является монотонно возрастающей, имеем стационарные значения $\epsilon_0 = \sigma_0 = 0$ и

конденсат фононной моды отсутствует. В противоположном случае $n_e > n_c$, когда в зависимости (2.14) параметр $A < 0$, синергетический потенциал $V(\epsilon)$ приобретает минимум при конечной деформации $\epsilon_0 = (|A|/B)^{1/2}$ и система спонтанным образом переходит в упорядоченное состояние:

$$\begin{aligned}\epsilon_0 &= \frac{(A_\sigma/A_n)^{1/2}}{\mu} \sqrt{n_e - n_c}, \\ \sigma_0 &= (A_\sigma/A_n)^{1/2} \sqrt{n_e - n_c}, \\ n_0 &= n_c; \quad n_e > n_c.\end{aligned}\tag{2.16}$$

Отметим резкое нарастание деформации и напряжений при закритическом воздействии $n_e > n_c$, тогда как параметр атомной перестройки сохраняет постоянное значение, сводящееся к критическому.

Выше мы рассмотрели мартенситное превращение как непрерывное фазовое превращение, тогда как в действительности оно протекает по механизму первого рода. Для перехода к реалистичной картине следует учесть нелинейный характер диссипативного процесса, в ходе которого время релаксации $\tau(\epsilon)$ приобретает диспергирующий характер, возрастая с увеличением спонтанной деформации. Принимая интервал изменения $\tau(\epsilon)$ от релаксированного значения $(1 + \kappa)^{-1}\tau$, определяемого параметром дисперсии $\kappa > 0$, до прежней величины τ , удобно воспользоваться простейшей аппроксимацией (1.41), где вместо τ_0 стоит $\tau \equiv \eta/\mu$, η_τ заменено параметром ϵ_τ , определяющим характерный масштаб деформации, на котором проявляется дисперсия. В результате синергетический потенциал (2.14) приобретает более сложный вид (1.42), где вместо S_e стоит n_e и S_{c0} заменено на n_c . Если параметр n_e не превышает критическое значение $n_{cr} \Rightarrow S_c^0$ (1.43), зависимость $V(\epsilon)$ имеет монотонно возрастающий характер (см. кривую 1 на рис. 7а). При $n_e = n_{cr}$ появляется плато (кривая 2), которое с дальнейшим ростом $n_e > n_{cr}$ трансформируется в минимум, отделенный от точки $\epsilon = 0$ барьером конечной высоты. Упорядоченная фаза становится синергетически выгодной, начиная со значения n_e , при котором достигается условие $V(0) = V(\epsilon_0)$, обеспечивающее равенство значений потенциала в отсутствие порядка ($\epsilon = 0$) и при стационарном значении $\epsilon = \epsilon_0$, отвечающем его минимуму (кривая 3). С дальнейшим ростом n_e при

закритическом значении $n^c \Rightarrow S_c$ (1.44) барьер, разделяющий состояния $\epsilon = 0$ и $\epsilon = \epsilon_0$, пропадает и зависимость $V(\epsilon)$ приобретает вид, присущий непрерывным переходам (кривая 4). Равновесное значение параметра порядка ϵ_0 имеет вид (1.45).

Представленная синергетическая картина позволяет естественным образом интерпретировать особенности мартенситного превращения, если учесть, что отклонение от равновесия, приводящее к росту доли n перестроенных атомных конфигураций, отвечает образованию аустенитной фазы, т. е. обратному мартенситному превращению. Это означает, что исходное неупорядоченное состояние $\epsilon = 0$ представляет мартенситную фазу, а упорядоченное $\epsilon = \epsilon_0$ — аустенитную. При понижении температуры происходит прямое превращение, точка $T = M_i$ начала которого фиксируется условием $n_e(T) = n_i$, отвечающим равенству синергетических потенциалов мартенситной и аустенитной фаз (кривая 3 на рис. 7а). Безактивационное мартенситное превращение происходит при более низкой температуре, обеспечивающей условие $n_e(T) = n_{cr}$ (см. равенство (1.43)), при котором пропадает минимум синергетического потенциала (кривая 2). Как видно из рис. 7b, при обратном повышении температуры от значений $T < M_i$ наблюдается гистерезис: мартенситная фаза становится неустойчивой при гораздо большем значении $T > M_i$, отвечающем условию $n_e(T) = n^c$ (см. (1.44)). Наличие упругих напряжений приводит к тому, что условие равновесия фаз $n_e(T) = n_i$ выполняется не при одной температуре M_i , а в интервале от M_i до M_f . Действительно, упругие напряжения дают положительный вклад в синергетический потенциал (1.42), так что кривая зависимости $V(\epsilon)$ на рис. 7а идет выше той, что отвечает условию $n_e(T) = n_i$ в их отсутствие, в связи с чем касание с осью абсцисс требует дополнительного охлаждения. При дальнейшем выделении мартенситной фазы упругие напряжения снова возрастают, температура фазового равновесия становится еще меньше и т. д. — до точки M_f , где мартенситная фаза заполняет весь объем.

Эстафетный механизм распространения мартенситной фазы объясняется поэтапной когерентной перестройкой потенциального рельефа. Так, если в локальной области возникла скоррелированная перестройка, то обусловленное ею испускание когерентных фононов способствует росту этой области до размера $\lambda = \eta/c\rho$, определяемо-

го величиной сдвиговой вязкости.

2.3 Теория иерархической связи

Как показывает пример спиновых стекол [62], при значительном удалении от равновесия система теряет эргодичность, в результате чего ее фазовое пространство разбивается на кластеры, которые отвечают структурным уровням, иерархически соподчиненным друг другу. Такое поведение присуще не только спиновым стеклам, но и всем системам, значительно удаленным от равновесия [54]. Основная часть настоящей главы посвящена исследованию систем такого рода в рамках представления об иерархически соподчиненных структурах. С этой целью в настоящем разделе излагается статистическое описание иерархической системы, которое представляет основу дальнейшего изложения [61].

Приступая к рассмотрению, следует отметить, что несмотря на повседневное проявление иерархичности в социуме и осознание ее роли в других системах [94] теория иерархически соподчиненных ансамблей получила свое развитие только при описании динамики спиновых стекол [62], [81], [95]. Основная идея состоит в том, что иерархически соподчиненные объекты образуют ультраметрическое пространство, геометрическим образом которого является дерево Кейли (см. рис. 2.3). Степень иерархической связи w (родства — в генеалогии) объектов, отвечающих узлам дерева на заданном уровне, определяется числом шагов l до общего предка, которое задает расстояние в ультраметрическом пространстве [96]. Определим возможные типы функции $w(l)$ для различных деревьев.

Будем характеризовать иерархический объект (узел дерева) на уровне n интенсивностью P_n , которая для стохастической системы сводится к плотности вероятности и возрастает с переходом на более высокий уровень $n - 1$ (наиболее очевидно это проявляется на примере служебной иерархии). Данное обстоятельство отражается рекуррентным соотношением

$$P_{n-1} = P_n + N_n^{-1}w(P_n), \quad (2.17)$$

где $w(P_n)$ — искомая функция иерархической связи; N_n — число уз-

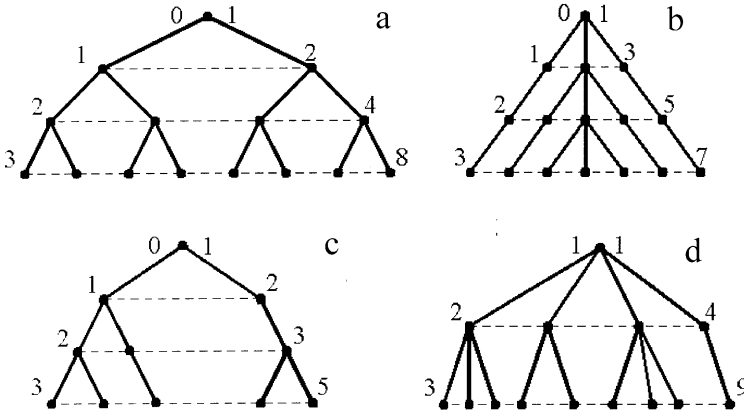


Рисунок 2.3 — Основные типы иерархических деревьев (номер уровня указан слева, число узлов — справа): а — регулярное дерево с $s = 2$; б — вырожденное дерево с $s = 3$; в — дерево Фибоначчи; д — нерегулярное дерево для $n = 1, a = 2$

лов на уровне n . Для простейшего случая регулярного дерева, показанного на рис. 2.3а, реализуется присущая фрактальным объектам степенная зависимость

$$N_n = s^n, \quad (2.18)$$

где s — показатель ветвимости дерева (на рис. 2.3а имеем $s=2$). Для вырожденного дерева, каждый уровень которого содержит лишь один ветвящийся узел (рис. 2.3б), имеем линейное соотношение

$$N_n = (s - 1)n + 1 \approx sn, \quad (2.19)$$

где приближенное равенство отвечает случаю $s \gg 1$. Интересный пример представляет дерево Фибоначчи, показанное на рис. 2.3в. Для него число узлов на n -м уровне $N_n = F(n + 2)$ определяется числом Фибоначчи $F(n)$, $n = 0, 1, \dots, n_0$, которое подчиняется уравнению $F(n + 2) = F(n + 1) + F(n)$ с $F(1) = F(2) = 1$. Его решение при $n \gg 1$ дает $F(n + 2) \simeq f\tau^n$, где $f \simeq 1.17082$, $\tau = (\sqrt{5} + 1)/2 \simeq 1.61803$ — золотое сечение. В результате число узлов дерева Фибоначчи определяется равенством

$$N_n \simeq f\tau^n, \quad n \gg 1. \quad (2.20)$$

И наконец, можно полагать, что в общем случае дерева, типа изображенного на рис. 2.3d, применима степенная аппроксимация

$$N_n = \nu n^a, \quad \nu > 0. \quad (2.21)$$

Уравнение (2.17), впервые использованное для описания иерархии резонансов нелинейных колебаний [97], обладает замечательным свойством самоподобия, которое представляет основную черту иерархических систем. Действительно, полагая, что величина интенсивности $P_n \sim q^n$ задается параметром подобия $q < 1$, а функция связи удовлетворяет условию однородности $w(qP) = q^\beta w(P)$, из (2.17), (2.18) для $n \gg 1$, когда $P_{n-1} \sim P_n$, получаем обычную связь

$$\beta = 1 - D, \quad D \equiv \frac{\ln s}{\ln q^{-1}} \quad (2.22)$$

между показателем β физической характеристики и фрактальной размерностью $D \leq 1$ самоподобного объекта типа изрезанной береговой линии [14]. Более того, условие $qP=1$ приводит к асимптотике

$$w(P) = WP^\beta, \quad P \rightarrow 0, \quad (2.23)$$

где $W \equiv w(1)$ — положительная постоянная. Полагая в равенствах (2.17), (2.18), что при произвольных значениях P_n удовлетворяется скейлинговое соотношение $P_n = x_n q^n \equiv x_n s^{-n/D}$, приходим к рекуррентному равенству для функции x_n :

$$x_{n-1} = \phi(x_n), \quad \phi(x) \equiv q(x + Wx^{1-D}). \quad (2.24)$$

Отображение $\phi(x)$ имеет две стационарные точки, отвечающие условию $x = \phi(x)$: стабильную $x_s = 0$ и критическую

$$x_c = \left(\frac{W}{q^{-1} - 1} \right)^{1/D}, \quad q \equiv s^{-1/D}. \quad (2.25)$$

В результате поведение системы представляется однородными функциями

$$P_n = x_c s^{-n/D}, \quad (2.26)$$

$$w_n = W^{1/D} (q^{-1} - 1)^{-\Delta} s^{-\Delta n}, \quad q \equiv s^{-1/D}, \quad (2.27)$$

где декремент

$$\Delta = \frac{1 - D}{D} \quad (2.28)$$

определяет масштаб иерархической связи в ультраметрическом пространстве.

В пределе $n \rightarrow \infty$ можно воспользоваться континуальным приближением, в рамках которого конечная разность $P_n - P_{n-1}$ заменяется производной dP/dn . Тогда равенство (2.17) переписывается в виде

$$\int \frac{dP}{w(P)} = - \int \frac{dn}{N_n} \equiv (\ln s)^{-1} \int \frac{d\zeta}{N(\zeta)}, \quad (2.29)$$

$$\zeta \equiv (n_0 - n) \ln s, \quad n \leq n_0, \quad (2.30)$$

где ζ — расстояние в ультраметрическом пространстве; $n_0 \gg 1$ — полное число иерархических уровней. Поскольку основной вклад в интеграл в левой части равенства (2.29) дает область малых значений P , достаточно воспользоваться асимптотикой (2.23). В результате равенство (2.29) сводится к уравнению, которое легко решается при распределениях N_n числа узлов по иерархическим уровням, заданных равенствами (2.18) — (2.21) с учетом (2.30). Рассмотрим каждый из этих случаев отдельно.

Регулярное и фибоначиево деревья. Для первого из указанных деревьев зависимости интенсивности P и силы иерархической связи w от расстояния в ультраметрическом пространстве ζ имеют вид

$$P = W^{-1/(1-D)} [(1-u) + ue^{\zeta - \zeta_0}]^{1/D}, \quad u \equiv DW^{1/(1-D)} / \ln s, \quad \zeta_0 \equiv n_0 \ln s; \quad (2.31)$$

$$w = [(1-u) + ue^{\zeta - \zeta_0}]^\Delta, \quad \zeta \leq \zeta_0. \quad (2.32)$$

В равенстве (2.32) и далее принимается, что функция $w(\zeta)$ удовлетворяет условию $w(\zeta_0) = 1$. Таким образом, с ростом расстояния ζ до общего предка зависимости $P(\zeta)$, $w(\zeta)$ обнаруживают экспоненциальное возрастание с инкрементами D^{-1} и Δ соответственно. Согласно (2.28) последний из них принимает нулевое значение при $D = 1$, когда система приобретает идеальную иерархическую связь. Оба

указанных декремента D^{-1} и Δ неограниченно возрастают при спадании фрактальной размерности D до нуля.

Проведем сравнение использованного выше континуального приближения и точного решения уравнения (2.17), исходя из его представления в форме (2.24). Из графиков функций $\phi(x)$ и $\phi^{-1}(x)$ на рис. 2.4 видно, что система за несколько итераций достигает нулевого значения x , если начальное значение x_0 меньше критического x_c . При $x_0 = x_c$ решение имеет вид (2.25), и в случае $x_0 > x_c$ наблюдается неограниченный рост x . В последнем случае величина P_n экспоненциально стремится к постоянному значению. Согласно рис. 2.5 при этом совпадение точного решения и континуального приближения наблюдается уже для нескольких иерархических уровней. Интересно отметить, что приближенное решение (2.31) сводится к точному (2.26) при условии $s^{1/D} - 1 \approx \ln s/D$, отвечающем $\ln s \ll D$.

В рамках континуального приближения рекуррентное соотношение (2.24) может быть представлено в форме уравнения Ландау-Халатникова

$$\frac{dx_n}{dn} = -\frac{\partial V}{\partial x_n} \quad (2.33)$$

с синергетическим потенциалом

$$V \equiv -\frac{x^2}{2} + \int \phi(x)dx. \quad (2.34)$$

Подстановка зависимости $\phi(x)$, определенной равенством (2.24), дает

$$V = \frac{Wq}{2-D}x^{2-D} - \frac{1-q}{2}x^2, \quad q \equiv s^{-1/D}, \quad (2.35)$$

где учтено второе равенство (2.22). Как видно из рис. 2.6, потенциал $V(x)$ при докритических значениях $x < x_c$, ограниченных величиной (2.25), возрастает, а затем неограниченно спадает. По своей форме кривая $V(x)$ совпадает с зависимостью свободной энергии зародыша новой фазы от его радиуса, где возрастание обусловлено поверхностной энергией, а неограниченное спадание — выигрышем термодинамического потенциала в результате превращения [98].

Таким образом, иерархическая система неустойчива относительно неограниченного нарастания числа уровней, если начальное значение интенсивности x_0 превышает критическое x_c . В социальной

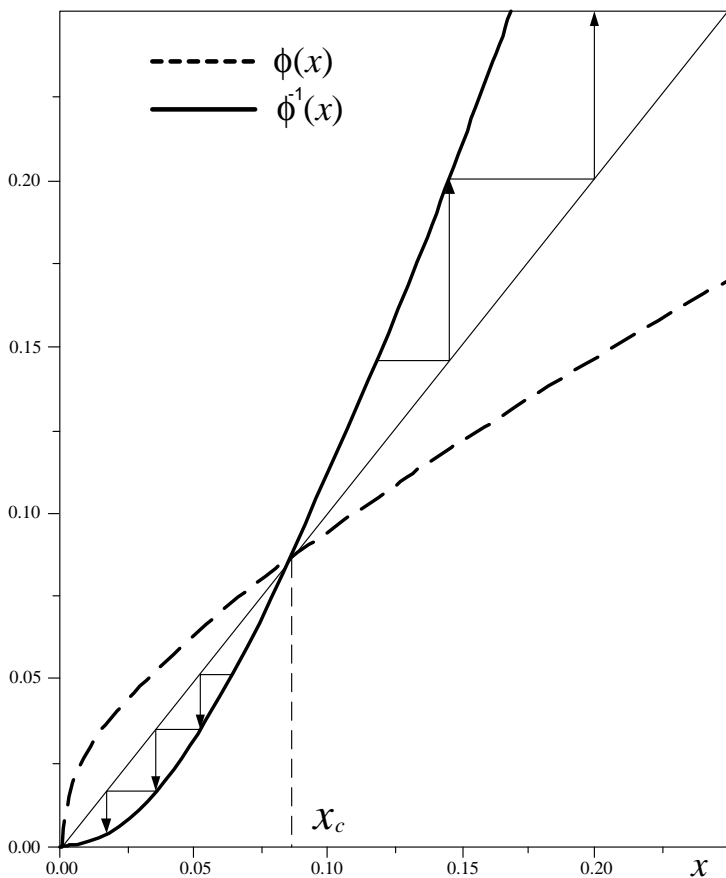


Рисунок 2.4 — График зависимости прямого отображения $\phi(x)$ (штриховая линия) и обратного $\phi^{-1}(z)$ (сплошная) при $W = 0.5$ и $D = 0.6$ (изменение x при последовательных отображениях $\phi^{-1}(x)$ показано стрелками для $x_0 < x_c$ и $x_0 > x_c$)

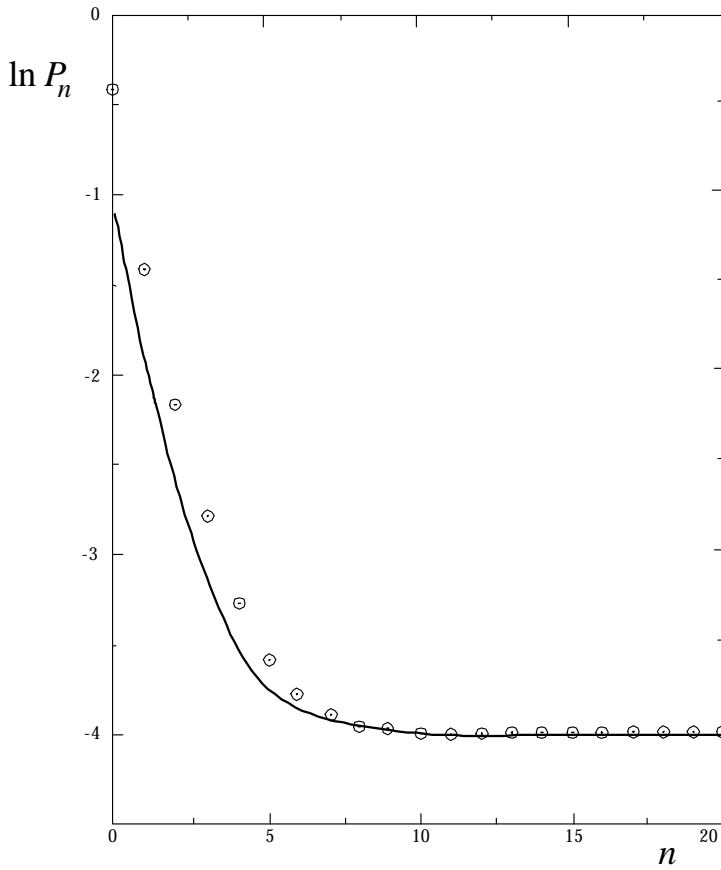


Рисунок 2.5 — Зависимость вероятности P_n от номера иерархического уровня n , полученная решением уравнения (2.24) численно (кружки с точкой) и в континуальном приближении (сплошная линия) при $W = 1$, $s = 2$ и $D = 0.6931$

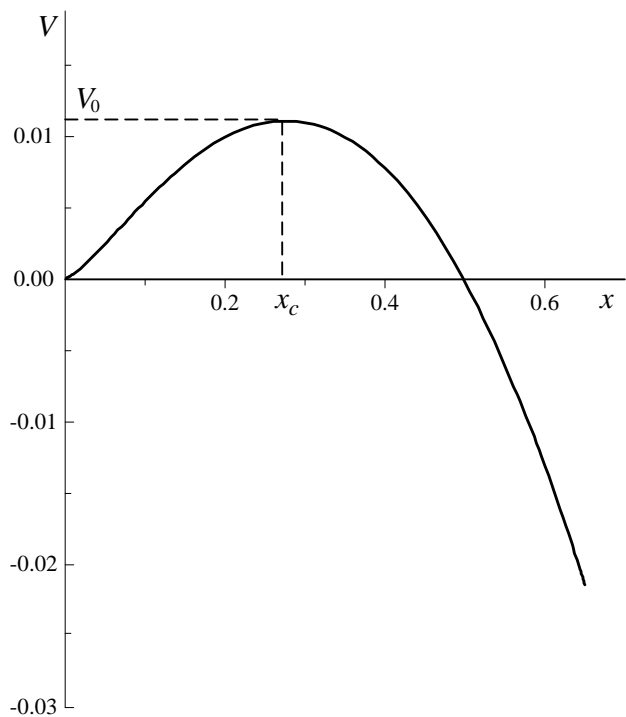


Рисунок 2.6 — Эффективный потенциал (2.35) в зависимости от x при $W = 1$,
 $s = 2$ и $D = 0.6$

иерархии этот факт известен как самопроизвольное воспроизводство бюрократической системы.

Решение уравнения (2.33) дает зависимость

$$P_n = \{P_0^D - x_c^D [1 - e^{-D(1-q)n}]\}^{1/D} e^{(1-q+\ln q)n}, \quad q \equiv s^{-1/D}, \quad (2.36)$$

которая сводится к виду (2.31), если выполняется указанное выше условие $\ln s \ll D$, означающее, что $\ln s \approx s - 1$, $\ln q \approx q - 1$.

Из сравнения равенств (2.18) и (2.20) видно, что при $n \gg 1$ иерархическая система, представляемая деревом Фибоначчи (рис. 2.3с), сводится к рассмотренному случаю регулярного дерева (рис. 2.3а), если параметры s , W заменить на τ , W/f соответственно. При этом фрактальная размерность $D = \ln \tau / \ln 2 \simeq 0.6942$ [14].

Вырожденное дерево. В этом случае число узлов задается равенством (2.19), использование которого совместно с (2.29), (2.23) дает

$$P = W^{-1/(1-D)} \left[1 - u \ln \left(1 + \frac{s-1}{\ln s} (\zeta_0 - \zeta) \right) \right]^{1/D}, \quad u \equiv \frac{DW^{1/(1-D)}}{s-1}; \quad (2.37)$$

$$w = \left[1 - u \ln \left(1 + \frac{s-1}{\ln s} (\zeta_0 - \zeta) \right) \right]^\Delta. \quad (2.38)$$

Из сравнения этих равенств с (2.31), (2.32) видно, что переход от регулярного дерева к вырожденному приводит к замене экспоненциальных зависимостей логарифмическими.

Нерегулярное дерево. В промежуточном случае дерева, характеризуемого степенным нарастанием (2.21) числа узлов N_n (рис. 2.3д), имеем

$$P = W^{-1/(1-D)} \left[1 + u(1 - \zeta/\zeta_0)^{-(a-1)} \right]^{1/D}, \quad u \equiv \frac{DW^{1/(1-D)} n_0^{-(a-1)}}{\nu(a-1)}; \quad (2.39)$$

$$w = \left[1 + u(1 - \zeta/\zeta_0)^{-(a-1)} \right]^\Delta. \quad (2.40)$$

В этом случае интенсивность и сила иерархической связи обнаруживают степенное поведение в зависимости от расстояния ζ .

Таким образом, обе исследованные характеристики иерархической системы — интенсивность P и сила связи w — плавно возрастают с увеличением расстояния ζ в ультраметрическом пространстве, которое отвечает переходу на более высокий иерархический уровень, соответствующий меньшим значениям n . Согласно соотношениям (2.31) — (2.40) из всех исследованных систем выделен случай регулярного дерева (рис. 2.3а). Действительно, отвечающее ему экспоненциальное поведение означает иерархическую связь ограниченного числа уровней, которое согласно (2.27) составляет

$$\kappa = (\Delta \ln s)^{-1} \equiv D[(1 - D) \ln s]^{-1}. \quad (2.41)$$

В этом смысле можно говорить, что регулярное дерево представляет слабую иерархическую связь. Согласно (2.28) особое место занимает случай тоталитарной иерархии, когда фрактальная размерность $D = 1$, и глубина связи $\kappa = \infty$ — иерархическая связь является идеальной. Однако интенсивность иерархических объектов при этом по-прежнему экспоненциально спадает на расстоянии $\zeta = D = 1$, т. е. несмотря на идеальное соподчинение тоталитарная система обречена на нулевую эффективность. Социальный эксперимент, подтверждающий этот вывод, хорошо известен.

При переходе к нерегулярным деревьям, случай которых является наиболее распространенным, иерархическая связь обеспечивает соподчинение всех уровней и затухает степенным образом. Самое медленное логарифмическое затухание требует построения вырожденной иерархии (рис. 2.3б). Она осуществляется единственным объектом на каждом уровне и, как нетрудно видеть, отвечает системе отбора. Обоим указанным случаям присуща сильная иерархическая связь, которая осуществляется между всеми уровнями, в результате чего параметр Δ в равенствах (2.37) — (2.40) определяет не глубину связи (2.28), а скорость ее затухания. В частности, при идеальном иерархическом соподчинении ($D = 1$) имеем $\Delta = 0$, и подобно регулярным системам иерархическая связь $w(\zeta)$ не затухает. Однако при этом интенсивность $P(\zeta)$ спадает с показателем $D^{-1} = 1$.

Проведенное рассмотрение показывает, что при заданной конфигурации иерархического дерева важную роль играет фрактальная размерность D , величина которой определяет силу иерархической

связи $w(\zeta)$. Везде выше мы принимали, что эта сила характеризуется фиксированным значением D . Однако в нестационарных системах параметр подобия q меняется со временем, так что в согласии со вторым равенством (2.22) изменяется и величина $D(q)$. Кроме того, для сложных систем иерархическая связь имеет мультифрактальный характер, означающий, что существенную роль играет спектр значений $q \in (-\infty, \infty)$, по которому сила связи $w_q(\zeta)$ распределена с плотностью $\rho(q)$.¹⁾ В результате ее полное значение определяется равенством

$$w(\zeta) = \int_{-\infty}^{\infty} w_q(\zeta) \rho(q) dq, \quad (2.42)$$

где в качестве ядра $w_q(\zeta)$ следует использовать соотношения (2.32), (2.38), (2.40) с переменным значением фрактальной размерности $D(q)$. Определение вида зависимостей $D(q)$, $\rho(q)$, характеризующих мультифрактал, представляет отдельную задачу [99].

Следует иметь в виду, что приведенные соотношения определяют лишь асимптотическое поведение иерархической системы в пределе $1 \ll \zeta \leq \zeta_0$. В противном случае проявляется дискретный характер связи и следует решать систему конечно-разностных уравнений (2.17), где распределение числа узлов N_n по уровням задается структурой исследуемого иерархического дерева. К такой постановке приводит рассмотрение иерархических систем, обладающих малым числом уровней и сложной конфигурацией дерева Кейли. Очевидно, в большинстве практических приложений дискретный характер иерархической системы проявляется существенным образом и решение задачи достигается только численными методами. При этом полученные выше асимптотики представляют качественный характер поведения иерархической системы (см. рис. 2.5).

¹⁾ Рассмотренному выше случаю отвечает зависимость

$$\rho(q) = |D'(q_0)|^{-1} \delta(q - q_0),$$

где штрих означает производную; q_0 — корень уравнения $D(q) = \text{const} \equiv D$.

2.4 Фрактальная кинетика перестройки кристаллической структуры

В процессе превращения исходная кристаллическая структура преобразуется в конечную, как правило, не прямым образом, а через промежуточные стадии. Одним из наиболее распространенных случаев такого рода является образование одномерных длиннопериодных структур, наблюдающееся как при бездиффузионных превращениях (ГЦК→ГПУ, мартенситных и т. п.), так и при образовании сверхструктур типа Cu – Au II, фазы Лавеса и т. д. [101] — [104]. Термодинамическими условиями реализации одномерных длиннопериодных структур являются наличие объемных и тепловых эффектов, малость энергии неоднородности [101], существенный вклад дальнедействующих полей (упругого [102] либо электростатического [103]), пересыщенность легирующим элементом в однофазной области [101]. Принципиально важную особенность одномерных длиннопериодных структур представляет их неравновесный характер, в связи с чем становятся неприменимыми стандартные методы термодинамики. Они, в частности, не позволяют объяснить чрезвычайно замедленную кинетику эволюции одномерных длиннопериодных структур, наиболее ярко выражающуюся в наличии характерной температуры, ниже которой обеспечивается устойчивость одномерных длиннопериодных структур данного типа [104].

В некоторых случаях наличие одномерных длиннопериодных структур может быть связано с особенностями электронного спектра, которые возникают с приближением поверхности Ферми к границе зоны Бриллюэна [103]. Такая ситуация имеет место, по-видимому, в системах CuAu, Cu₃Au, CuPt и кобальте, легированном малыми добавками Ta, Nb, Ge, Al, C [104]. Особенность сплава внедрения Co – C состоит в изменении электронного механизма стабилизации одномерных длиннопериодных структур с ростом содержания углерода выше предела растворимости. Здесь структурная перестройка сопровождается перераспределением легирующего элемента, что, в свою очередь, приводит к изменению упругих полей. Термодинамическое исследование [102] показало, что при определенных условиях взаимно связанное распределение концентрации и дефек-

тов упаковки должно приобретать периодический характер.

В отличие от обычной картины фазовых превращений термодинамическая выгодность одномерной длиннопериодной структуры не означает ее кинетическую реализацию по спинодальному механизму, либо механизму зарождения и роста. Оценки, проведенные в [104], показали, что при обеспечении определенных условий перераспределения концентрации кинетика перестройки одиночных прослоек одномерной структуры реализуется только при достаточном понижении температуры. Однако при этом образуется неупорядоченная структура чередующихся прослоек разного типа и требуется исследовать кинетику их взаимного упорядочения, обеспечивающую образование одномерной длиннопериодной структуры. Ниже будет показано, что решение этой задачи требует использования представлений об иерархических структурах [105].

Рассмотрим для определенности полиморфное превращение ГПУ→ГЦК. Если мгновенно перевести систему из области существования ГПУ решетки, характеризуемой волновым числом k_h при температуре T_h , в соответствующую область T_c ГЦК структуры с волновым числом k_c , то можно полагать, что термодинамический потенциал Φ , отвечающий различным структурам (волновым числам k), изменится, как показано на рис. 2.7. Принципиально важным обстоятельством является наличие множества локальных минимумов термодинамического потенциала между состояниями k_h и k_c . Они отвечают метастабильным структурам k_a , $a = 1, 2, \dots$, которые и сводятся к одномерным длиннопериодным структурам. В процессе изотермической выдержки при температуре T_c система переходит из состояния k_h в k_c не непосредственно, а через ряд промежуточных структур k_a . Так, в сплаве Co – Ta наблюдается переход $2H \rightarrow 15R_1$, реализующийся по следующей схеме ветвления [104].

Здесь символы h и c означают окружение ПУ слоев, характерное для ГПУ и ГЦК решеток соответственно, p — вероятность возникновения одиночной c -укладки. На рис. 2.7 переходу $2H \rightarrow 15R_1$ соответствует перераспределение из минимума термодинамического потенциала, отвечающего состоянию k_h $2H$ -структуры ГПУ решетки, в промежуточный минимум k_a , отвечающий структуре $15R_1$. Поскольку вероятность такого перехода ограничивается значением $p < 1$, следует положить, что параллельно с переходом

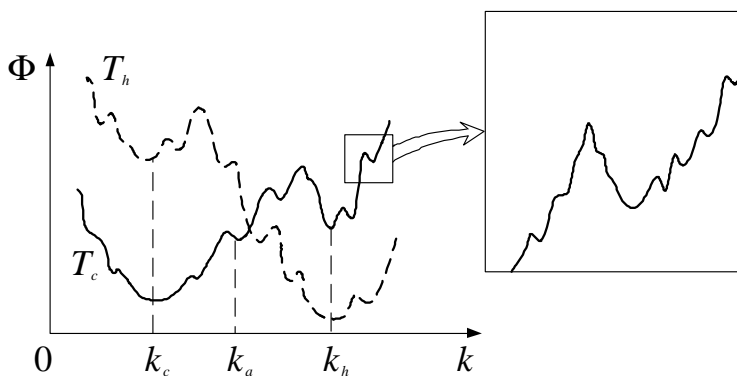
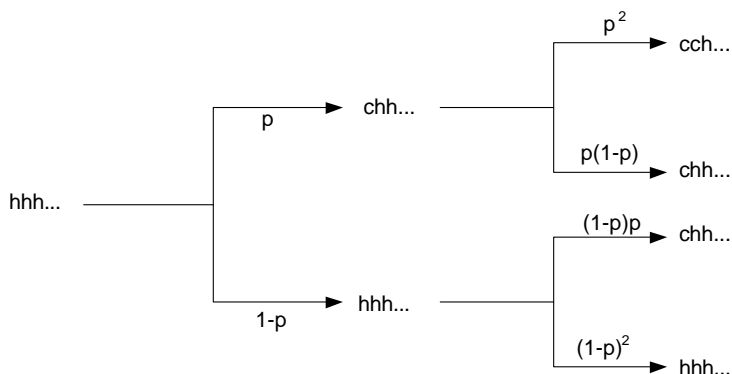


Рисунок 2.7 — Изменение вида термодинамического потенциала в обратном пространстве при переходе из области температур T_h существования ГПУ решетки в область T_c ГЦК структуры (вставка показывает тонкую структуру минимума, проявляющуюся при увеличении масштаба разрешения)



$2H \rightarrow 15R_1$ идут и другие (так, в [104] с ростом содержания углерода в сплаве внедрения наблюдали последовательность структур $h_4c \rightarrow h_4c_4 \rightarrow (h_4c_4)_2h_2c_{10}h_2c_3 \rightarrow (h_4c_4)_2c_3h_2c_{16}h_2c_9$). В результате можно заключить, что прежде чем достичь термодинамически наиболее выгодного состояния k_c , система проходит ряд промежуточных состояний k_a , распределение по которым характеризуется вероятностями p_a . При этом на рис. 2.7 заполняются соответствующие локальные минимумы зависимости $\Phi(k)$.

Нетрудно видеть, что эта зависимость имеет фрактальную структуру, для которой наиболее глубокие минимумы характеризуются хорошими рациональными числами ²⁾, задающими период одномерных длиннопериодных структур. Именно им отвечают идентифицированные в эксперименте [101, 104] структуры типа NR, где $N \gg 1$ — целое число, характеризующее период одномерной длиннопериодной структуры. Однако, если взять две такие структуры, отвечающие ближайшим минимумам при волновых числах $k_1 = (\pi/d)n_1$ и $k_2 = (\pi/d)n_2$, где d — расстояние между ПУ плоскостями, $n_{1,2}$ — хорошие рациональные числа, принадлежащие интервалу $(2/3, 1)$, то между ними всегда можно найти счетное множество других рациональных чисел n_a . Они отвечают одномерным длиннопериодным структурам, являющимся промежуточными при перестройке структуры k_1 в k_2 . Поскольку последние различаются меньше, чем первоначальные k_h и k_c ($|k_1 - k_2| \ll |k_c - k_h|$), можно ожидать, что от-

²⁾Рациональное число $m/n < 1$ тем лучше, чем меньше целые числа m, n .

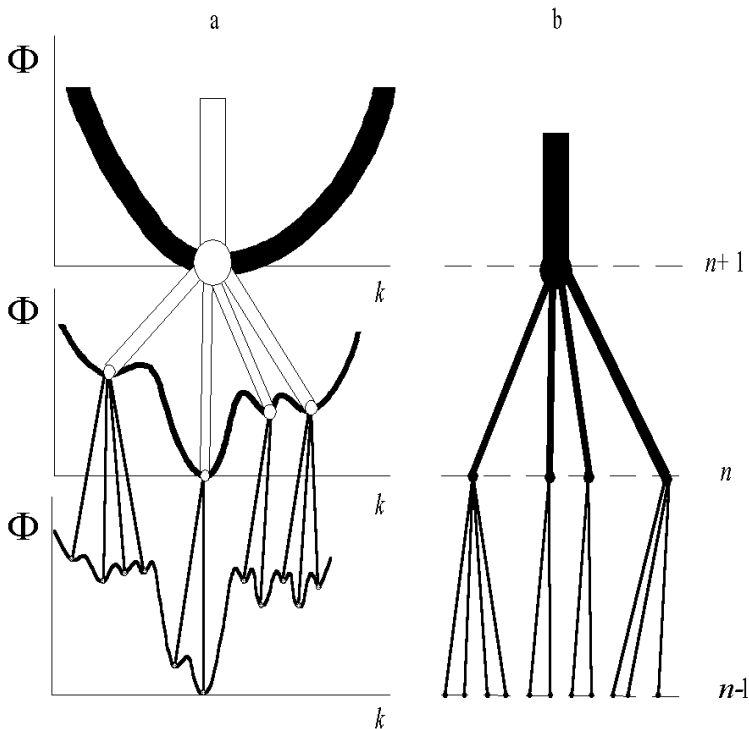


Рисунок 2.8: а — детализация зависимости термодинамического потенциала от волнового вектора при уменьшении масштаба разрешения одномерной длиннопериодной структуры; б — соответствующее иерархическое дерево, изображающее ультраметрическое пространство

вещающие им минимумы на зависимости $\Phi(k)$ имеют более высокий порядок малости в сравнении с теми, что отвечают k_h, k_c (см. увеличение масштаба на рис. 2.7). В свою очередь, каждый из минимумов, различимых при данном масштабе, выявляет при дальнейшем увеличении более тонкую структуру минимумов, которые имеют меньшую глубину и отвечают более близким одномерным длиннопериодным структурам (рис. 2.8а). Для макроскопической системы, содержащей бесконечное множество ПУ слоев, представленную процедуру детализации вида зависимости $\Phi(k)$ можно проводить бесконечно, пока не будет достигнут уровень описания, отражающий измене-

ние термодинамического потенциала при образовании минимального кластера скоррелированных сдвигов ПУ слоев.

Описанная картина, количественной стороне которой посвящено последующее изложение, показывает, что после мгновенного перевода структуры k_h , отвечающей температуре T_h , в область T_c сначала происходят скоррелированные сдвиги одиночных ПУ слоев в кластерах минимального размера, отвечающих заполнению самых мелких минимумов зависимости $\Phi(k)$. Корреляция минимальных кластеров приводит к их объединению, что отражается заполнением минимумов следующего, более низкого порядка малости. В свою очередь, эти кластеры объединяются в более крупные, которым на зависимости $\Phi(k)$ отвечают еще более глубокие минимумы. Указанный процесс, означающий поэтапное установление корреляции, повторяется многократно, пока не будет достигнута структура k_c . Принципиальная особенность такого процесса состоит в его иерархической структуре — минимальные кластеры образуются только после сдвига отдельных ПУ слоев, более крупные кластеры объединяются из мелких (а не ПУ слоев!) и т. д. На зависимости $\Phi(k)$ это отражается в иерархической последовательности заполнения минимумов разной глубины — глубокие требуют предварительного заполнения более мелких (см. рис. 2.8а).

Исследование представленной картины требует использования пространства с ультраметрической топологией, геометрическим образом которого является иерархическое дерево Кейли (см. раздел 2.3). Как видно из рис. 2.8b, такое дерево, отражающее изменение топологии изоповерхности $\Phi(k) = \text{const}$, дает наглядное представление последовательности перестройки структуры. Так, если в момент времени, отвечающий $n - 1$ уровню, реализуются кластеры, характеризуемые волновыми числами k_{a_b} ($a, b = 1, 2, \dots$), то с переходом на n -й уровень состояния k_{a_1} объединяются в суперкластер k_1 , состояния k_{a_2} — в k_2 и т. д. На уровне $n + 1$ объединение суперкластеров k_a дает результирующую структуру k_c .

Таким образом, процесс структурного превращения через стадию одномерных длиннопериодных структур представляет поэтапное слияние кластеров ПУ слоев, не сводящееся к смещению отдельных слоев. Поэтому при исследовании кинетики уместно перейти от использования геометрического пространства (например, про-

странственных волн смещений [102]) к описанию эволюции системы в ультраметрическом пространстве. Топология последнего адекватным образом отражает иерархическую структуру процесса.

Для количественного описания введем числа заполнения $n_i, i=1, 2, \dots, N$, определенные таким образом, что $n_i = 1$, если i -й слой находится в положении s , и $n_i = 0$, — если в h ($N \rightarrow \infty$ — полное число ПУ слоев). Пусть заданным внешним условиям (температуре и концентрации) отвечает среднее значение \bar{n} , определяющее число s -слоев $N_c = \bar{n}N$. Задача состоит в описании пространственно-временного коррелятора флуктуаций $\delta n_i(t) = n_i(t) - \bar{n}$:

$$S_{ij}(t) = \langle \delta n_i(t) \delta n_j(0) \rangle, \quad (2.43)$$

где t — время, i, j — индексы слоев. В силу периодичности в их пространственном распределении удобно ввести решеточный фурье-образ

$$\delta n_k = N^{-1} \sum_i \delta n_i \exp(-ikR_i), \quad (2.44)$$

где k — волновое число; R_i — координата i -го слоя. Однако при этом упускается специфика представленной выше картины поэтапной перестройки структуры. Для ее учета следует разбить полный объем образца V на иерархически соподчиненную систему взаимно вложенных друг в друга объемов разной величины, каждый из которых отвечает кластерам скоррелированных сдвигов. Так, максимальный объем V составляется из задаваемых координатами r_{a_1} объемов $V_{a_1} \ll V$, где индекс $a_1 = 1, 2, \dots, N_1$, нумерует эти объемы. В свою очередь, каждый из кластеров V_{a_1} , состоит из еще меньших объемов $V_{a_1 a_2}$, положение которых задается координатами $r_{a_1 a_2}$, $a_2 = 1, 2, \dots, N_2$. Указанную процедуру поэтапного разделения объемов можно проводить бесконечно, выделяя объемы $V_{a_1 a_2 \dots a_n}$, задаваемые координатами $r_{a_1 a_2 \dots a_n}$, где наборы индексов $a_l = 1, 2, \dots, N_l$, $l = 1, 2, \dots, n \rightarrow \infty$ определяют каждый заданный кластер. Условие такого разбиения сводится к требованию $V_{a_1 \dots a_{l-1}} \gg V_{a_1 \dots a_l}$, которое обеспечивается неравенством $N_l \gg 1$.

После указанного разбиения решеточный фурье-образ необхо-

димо брать по минимальному кластеру $V^{(n)} \equiv V_{a_1 \dots a_n}$:

$$\delta n_k(r_{a_1 \dots a_{n-1}}) = \frac{1}{N_n} \sum_{R_i \in V^{(n)}} \delta n(R_i) \exp[-ik(R_i - r_{a_1 \dots a_{n-1}})]. \quad (2.45)$$

В результате получаем модулированную (зависимость от координаты $r_{a_1 \dots a_{n-1}}$) амплитуду пространственной волны $\delta n_k(r_{a_1 \dots a_{n-1}}) \equiv \delta n_k^{n-1}$. Указанную модуляцию [11] можно учесть, совершая последующее фурье-преобразование по координате $r_{a_1 \dots a_{n-1}} \in V^{(n-1)}$ с фазовым множителем $N_{n-1}^{-1} \exp[-ik(r_{a_1 \dots a_{n-1}} - r_{a_1 \dots a_{n-2}})]$. Продолжая эту процедуру до объема V , приходим к следующему обобщению ряда Фурье для иерархизованных структур:

$$\begin{aligned} \delta n_k &= \sum_{r_{a_1} \in V^{(1)}} \frac{1}{N_1} e^{-ikr_{a_1}} \sum_{r_{a_1 a_2} \in V^{(2)}} \frac{1}{N_2} \exp[-ik(r_{a_1 a_2} - r_{a_1})] \dots \\ &\quad \sum_{R_i \in V^{(n)}} \frac{1}{N_n} \exp[-ik(R_i - r_{a_1 \dots a_{n-1}})] \delta n(R_i) = \quad (2.46) \\ &= \frac{1}{N} \sum_{r_{a_1}} \dots \sum_{r_{a_{n-1}}} \sum_{R_i \in V^{(n)}} e^{-ikR_i} \delta n(R_i), \end{aligned}$$

где учтено, что $N = \prod_{i=1}^n N_i$.

Проведенное разбиение прямого пространства приводит к соответствующей кластеризации сопряженного k -пространства вблизи волнового числа обратной решетки ГПУ структуры. Нетрудно видеть, что наиболее грубой координатной зависимости от r_{a_1} отвечает задание соответствующей функции на N_1 точках k_{a_1} наименьшей зоны k -пространства $\tilde{V}^{(1)}$ размером $K_1 = (N_1/N)(2\pi/d)$, где d — расстояние между ПУ слоями. В свою очередь, координатам $r_{a_1 a_2}$ отвечают точки $k_{a_1 a_2}$, разделенные интервалом K_1 в области $\tilde{V}^{(2)}$ размером $K_2 = N_2 K_1 = (N_1 N_2/N)(2\pi/d)$. Наконец, изменению координаты R_i на межатомных расстояниях отвечают наиболее редко расположенные точки $k_{a_1 \dots a_n} \in \tilde{V}^{(n)}$, заполняющие зону Бриллюэна с интервалом

$K_n = 2\pi/N_n d$. Преобразование, обратное (2.46), имеет вид

$$\begin{aligned} \delta n_i &= \sum_{k_{a_1} \dots k_{a_n} \in \tilde{V}^{(n)}} \exp(-ik_{a_1 \dots a_n} R_i) \dots \sum_{k_{a_1} \in \tilde{V}^{(1)}} e^{-ik_{a_1} R_i} \times \\ &\times \delta n(k_{a_1}, \dots, k_{a_1 \dots a_n}) = \sum_{k \in \tilde{V}^{(n)}} \dots \sum_{k \in \tilde{V}^{(1)}} e^{-ik R_i} \delta n_k. \end{aligned} \quad (2.47)$$

Поскольку каждому последующему из введенных наборов волновых чисел $k_{a_1}, \dots, k_{a_1 \dots a_n}$ отвечают все бóльшие масштабы, то можно ожидать, что им соответствуют и более глубокие минимумы зависимости $\Phi(k)$. Таким образом, проведенное разбиение объемов $V^{(n)}$ прямого пространства и отвечающее ему разделение k -пространства на множества $\tilde{V}^{(n)}$ отражают иерархическую соподчиненность сопряженных пространств $V^{(n)}, \tilde{V}^{(n)}$ на разных уровнях n . Покажем, что такая связь наиболее просто отражается, если представить множества $V^{(n)}, \tilde{V}^{(n)}$ в ультраметрическом пространстве, расстояние между точками которого задается числом шагов по уровням иерархического дерева, приводящим к общему предку.

С этой целью перейдем от бесконечных последовательностей рядов (2.46), (2.47) к суммированию по уровням иерархии α , полагая, что каждый из них отвечает ансамблю объемов $\{V_\alpha\}$, имитирующему набор $\{V^{(l)}\}$ введенных выше объемов $V_{a_1 \dots a_l}$, $l = 1, \dots, n \rightarrow \infty$ (при этом $(\alpha - 1)$ -й ансамбль соподчинен α -му, тот, в свою очередь, $(\alpha + 1)$ -му и т. д.). Принимая, что распределение по ансамблям задается вероятностью p_α , $\sum_\alpha p_\alpha = 1$, представим ряды (2.46), (2.47) в виде

$$\delta n_k = \sum_\alpha p_\alpha \delta n_k^\alpha, \quad \delta n_k^\alpha = \frac{1}{N_\alpha} \sum_{R_i \in V_\alpha} \delta n_i e^{-ik R_i} \equiv \frac{1}{N_\alpha} \sum_i \delta n_i^\alpha e^{-ik R_i}, \quad (2.48)$$

$$\delta n_i = \sum_\alpha p_\alpha \delta n_i^\alpha, \quad \delta n_i^\alpha = \sum_{k \in \tilde{V}_\alpha} \delta n_k e^{ik R_i} \equiv \sum_k \delta n_k^\alpha e^{ik R_i}. \quad (2.49)$$

С физической точки зрения суммирование по индексу иерархии α означает, что кинетика перестройки одномерных длиннопериодных структур определяется переходами от низших уровней к высшим, которые обеспечивают движение к вершине иерархического дерева.

С учетом представлений (2.48), (2.49) структурный фактор (2.43) принимает вид

$$S_{ij}(t) = \sum_{\alpha, \beta} p_{\alpha} p_{\beta} S_{ij}^{\alpha\beta}(t), \quad S_{ij}^{\alpha\beta}(t) \equiv \langle \delta n_i^{\alpha}(t) \delta n_j^{\beta}(0) \rangle. \quad (2.50)$$

Для каждого из ансамблей $\{V_{\alpha}\}$ временная зависимость коррелятора (2.50) имеет дебаевский вид [106]:

$$S_{ij}^{\alpha\beta}(t) = S_{ij}^{\alpha} \exp(-t/\tau_{\alpha\beta}), \quad S_{ij}^{\alpha} \equiv \langle \delta n_i^{\alpha}(0) \delta n_j^{\alpha}(0) \rangle. \quad (2.51)$$

Поскольку в заданный момент времени корреляция осуществляется только внутри данного кластера V_{α} , статический коррелятор $S_{ij}^{\alpha\beta}(0)$ отличен от нуля лишь при $\alpha = \beta$. С другой стороны, перестройка кластеров с течением времени приводит к зависимости времени релаксации $\tau_{\alpha\beta}$ от расстояния $u = u_{\alpha\beta}$ между этими кластерами в ультраметрическом пространстве. Принимая последнее однородным³⁾ и переходя к фурье-образу по решеточным индексам i, j внутри наименьшего кластера, из (2.50), (2.51) получаем структурный фактор одномерной длиннопериодной структуры

$$S_k(t) = S_k \int p(u) \exp\{-t/\tau(u)\} du, \quad (2.52)$$

$$S_k \equiv \sum_{\alpha} p_{\alpha} S_k^{\alpha}, \quad S_k^{\alpha} \equiv \frac{1}{N_{\alpha}} \sum_{R_i - R_j} S_{ij}^{\alpha} \exp[-ik(R_i - R_j)]. \quad (2.53)$$

Здесь учтено, что минимальный кластер микроскопически однороден.

Хотя приведенная схема описания одномерных длиннопериодных структур напоминает предложенную в теории спиновых стекол [81], она принципиально отличается от нее. Действительно, состояние спинового стекла задается функцией $q(x)$, обратная к которой определяет суммарную вероятность x иметь иерархическому набору

³⁾Однородным является ультраметрическое пространство, изображаемое деревом Кейли с постоянной ветвистостью.

ансамблей перекрытие, не превышающее q :

$$x(q) = \int_{q_{min}}^q p(q') dq', \quad p(q) \equiv \sum_{\alpha, \beta} p_{\alpha} p_{\beta} \delta(q - S^{\alpha\beta}). \quad (2.54)$$

Случайный характер взаимодействия в спиновом стекле обуславливает вероятностный характер функции распределения $p(q)$ [83], в связи с чем ее моменты (в частности, момент первого порядка, сводящийся к структурному фактору (2.52)) являются случайными величинами. В нашем случае величина $S = \int_{q_{min}}^{q_{max}} qp(q) dq = \int_0^1 q(x) dx$ детерминирована. Кроме того, если в спиновом стекле статический коррелятор $S_{ij}^{\alpha\beta}(0) \neq 0$ и при $\alpha \neq \beta$ [81], то в сильно неравновесном кристалле он отличен от нуля только при условии $\alpha = \beta$, когда его значение отвечает параметру Эдвардса—Андерсона. Однако это вовсе не означает отсутствие корреляции различных состояний α, β ансамбля $\{V_{\alpha}\}$ — согласно (2.51) она осуществляется не за счет непосредственного взаимодействия, а посредством корреляции разных объемов $V_{a_1 \dots a_l}$ при переходе от l -го ансамбля к $(l + 1)$ -му. Именно этот переход отражается временной зависимостью в (2.51).

Для нахождения явного вида зависимости $S_k(t)$ в (2.52) требуется задать распределения $p(u), \tau(u)$ в ультраметрическом пространстве. Их определение сводится к микроскопической задаче, и в рамках феноменологического подхода мы ограничимся исследованием возможных видов $S_k(t)$ при допустимых мажорантах распределений $p(u), \tau(u)$. При фиксированной температуре T время релаксации задается высотой потенциального барьера $\Phi(u)$ согласно аррениусовскому соотношению

$$\tau(u) = \tau_0 \exp\{\Phi(u)/T\}, \quad (2.55)$$

где τ_0 — микроскопическое время Дебая. Для оценки возможных видов зависимостей $\Phi(u)$ будем исходить из того обстоятельства, что при больших размерах кластеров величина термодинамического потенциала пропорциональна их объему. Поэтому один шаг по дереву Кейли, отвечающий однократному объединению s кластеров, приведет к увеличению термодинамического потенциала в s раз. Расстоянию u отвечают l шагов, с которыми связано изменение

$\Delta\Phi \sim s^l = \exp(l \ln s) = \exp(\text{const } u)$. Таким образом, в термодинамическом пределе реализуется наиболее сильная экспоненциальная зависимость $\Phi(u)$ высоты термодинамического потенциала в ультраметрическом пространстве. При малых размерах кластеров и наличии дальнедействующих сил регулярный характер иерархической связи нарушается, и термодинамический потенциал с ростом объема увеличивается гораздо медленнее. В соответствии с этим следует ожидать, что зависимость $\Phi(u)$ приобретает более слабый характер, чем экспоненциальный. В разделе 2.3 мы видели, что на регулярном дереве Кейли иерархическая связь изменяется экспоненциальным образом, тогда как переход к нерегулярному и вырожденному деревьям приводит к ослаблению этой зависимости до степенной и логарифмической. Учитывая, что распределение термодинамического потенциала $\Phi(u)$ в ультраметрическом пространстве определяется силой иерархической связи, будем аппроксимировать зависимость $\Phi(u)$ логарифмической, степенной и экспоненциальной функциями:

$$\Phi_l(u) = Q \ln(u/u_0), \quad \Phi_p(u) = Qu^a, \quad \Phi_e(u) = Q \exp(u/u_0), \quad (2.56)$$

где постоянные Q , u_0 , a определяются параметрами состояния. Что касается функции $p(u) \equiv p_\alpha$, определяющей распределение по состояниям $\{V_\alpha\}$ в ультраметрическом пространстве, то она должна быть монотонно спадающей. Мажорируем ее зависимостями

$$p_s(u) = u^{-D}, \quad p_w(u) = \exp(-u/\epsilon), \quad (2.57)$$

где $D \in (0, 1)$ — фрактальная размерность; ϵ — параметр, определяющий глубину иерархической связи.

Подставляя в (2.52) зависимости (2.55) — (2.57), методом перевала находим асимптотики $t \rightarrow \infty$, представленные в таблице 2.1:

Таблица 2.1 — Возможные асимптотики коррелятора $S_k(t)$ при $t \rightarrow \infty$

$S_k(t)$	$\Phi_l(u)$	$\Phi_p(u)$	$\Phi_e(u)$
$p_w(u)$	$e^{-t^\beta}, \beta = \left(1 + \frac{Q}{T}\right)^{-1}$	$\exp \left[- \left(\frac{T}{Q} \ln \frac{t}{\tau_0} \right)^{\frac{1}{\alpha}} \right]$	$\left(\frac{T}{Q} \ln \frac{t}{\tau_0} \right)^{-\frac{u_0}{\epsilon}}$
$p_s(u)$	$t^{-\gamma}, \gamma = \frac{(1+D)T}{Q}$	$\left(\frac{T}{Q} \ln \frac{t}{\tau_0} \right)^{-\frac{D}{\alpha}}$	$\left[u_0 \ln \left(\frac{T}{Q} \ln \frac{t}{\tau_0} \right) \right]^{-D}$

Сильная иерархическая связь характеризуется медленно спадающим степенным распределением $p_s(u)$ уровней в ультраметрическом пространстве. При этом логарифмическое нарастание $\Phi_l(u)$ высоты фрактального рельефа дает степенное спадание коррелятора (2.52), степенное нарастание рельефа $\Phi_p(u)$ приводит к более медленной логарифмической зависимости $S_k(t)$ и, наконец, экспоненциальное $\Phi_e(u)$ дает двойную логарифмическую зависимость $S_k(t)$. Соответственно в слабоиерархических системах, характеризующихся быстро спадающим экспоненциальным распределением $p_w(u)$, имеем последовательно закон Колерауша [106], квазистепенное и логарифмическое спадание. Согласно [108] такая ситуация не зависит от ветвистости дерева Кейли и сохраняется при случайном ветвлении. Характерно, что при степенном и экспоненциальном нарастании высоты фрактального рельефа максимальное значение коррелятора $S_k(t) \sim 1$ удерживается при температурах ниже значения

$$T_f(t) \leq Q / \ln(t/\tau_0). \quad (2.58)$$

Как показывают зависимости $S_k(t)$, приведенные в таблице 2.1, критическое замедление процесса перестройки кристаллической структуры, отвечающее переходу от быстро спадающей экспоненциальной зависимости к более плавным степенной и логарифмической, реализуется для любого фрактального рельефа в случае сильно-

иерархических систем. В слабоиерархических для обеспечения критического замедления требуется, по крайней мере, степенное нарастание высоты рельефа в ультраметрическом пространстве. Следует, однако, иметь в виду, что указанное замедление проявляется лишь до некоторого момента τ_M , а при $t \gg \tau_M$ реализуется дебаевская зависимость $S_k(t) \sim \exp(-t/\tau_M)$ [106]. Физическая причина такого поведения обусловлена тем, что за указанное время устанавливается иерархическая связь на расстоянии u_M , задаваемом условием $p(u_M) = \tau_0/\tau_M$. Это приводит к преодолению фрактального рельефа высотой $\Phi \leq \Phi_M$, ограниченной заданным значением $\Phi_M \equiv \Phi(u_M)$. Учет вида (2.56), (2.57) зависимостей $\Phi(u)$, $p(u)$ дает выражения для максимального времени перестройки структуры τ_M , указанные в таблице 2.2:

Таблица 2.2 — Время t_M разрушения иерархической структуры

τ_M	$\Phi_l(u)$	$\Phi_p(u)$	$\Phi_e(u)$
$p_w(u)$	$\tau_0 \exp \left[\frac{u_0}{\epsilon} \exp \left(\frac{\Phi_M}{Q} \right) \right]$	$\tau_0 \exp \left[\frac{1}{\epsilon} \left(\frac{\Phi_M}{Q} \right)^{\frac{1}{a}} \right]$	$\tau_0 \left(\frac{\Phi_M}{Q} \right)^{\frac{u_0}{\epsilon}}$
$p_s(u)$	$\tau_0 u_0^D \exp \left(\frac{D\Phi_M}{Q} \right)$	$\tau_0 \left(\frac{\Phi_M}{Q} \right)^{\frac{D}{a}}$	$\tau_0 u_0^D \left[\ln \left(\frac{\Phi_M}{Q} \right) \right]^D$

Прежде всего обращает на себя внимание возрастание величины τ_M при переходе к менее выраженным зависимостям $\Phi(u)$. Поскольку экспоненциальное нарастание $\Phi_e(u)$ отвечает росту термодинамического потенциала пропорционально объему, а переход к более плавным зависимостям $\Phi_p(u)$ и $\Phi_l(u)$ связан с учетом неоднородности и дальнодействия, то указанная особенность означает стабилизацию одномерных длиннопериодных структур в неоднородных системах с дальнодействующими полями. С другой стороны, как показывает сравнение различных строк таблицы 2.2, ослабление иерархической соподчиненности приводит к усилению зависимости времени τ_M от внешних условий, определяющих параметры Q , u_0 , a фрактально-

го рельефа. Принимая их зависимость от температуры в простейшем виде $Q \propto T - T_0$; $T_0, u_0, a = \text{const}$, нетрудно видеть, что в сильноиерархических системах зависимость $\tau_M(T)$ принимает вид аппроксимации Фогеля—Фулчера при логарифмическом распределении рельефа $\Phi_l(u)$, а в слабоиерархических — при степенном $\Phi_p(u)$. В общем случае возможны также степенная и логарифмическая зависимости $\tau_M(T)$.

С физической точки зрения фрактальное распределение термодинамического потенциала в пространстве состояний обусловлено наличием объемных и тепловых эффектов превращения структуры, с одной стороны, и малостью энергии неоднородности — с другой. Действительно, в указанных условиях реализация структурного превращения в минимальном закритическом объеме приводит к локальному возрастанию плотности термодинамического потенциала, отвечающему минимальному барьеру. Малость энергии неоднородности обуславливает поэтапный рост кластеров одномерных длиннопериодных структур, которым выгоднее расти не за счет смещения границы, как это бывает при фазовых превращениях первого рода, а за счет корреляции кластеров. Этот процесс приводит к росту объемных и тепловых эффектов и, следовательно, к заполнению более глубоких минимумов термодинамического потенциала.

Выше указывалось, что медленно спадающее степенное распределение $p_s(u)$ расстояний в ультраметрическом пространстве реализуется в системах с сильно выраженной иерархичностью, а экспоненциальное $p_w(u)$ — в слабоиерархических системах. При заданном уровне вероятности $p_0 \leq 1$ это выражается в превышении характерного расстояния $u_0 \sim p_0^{-1/D}$ при степенном распределении в сравнении с расстоянием $u_w \sim \epsilon |\ln p_0|$ при экспоненциальном. Согласно таблице 2.1 системы с сильно выраженной иерархией обнаруживают более замедленную кинетику, чем со слабой. Для них, в частности, возможно практически полное замораживание процесса при всех температурах (в случае экспоненциально нарастающей высоты фрактального рельефа).

Применительно к перестройке кристаллической структуры это означает, что стабильные длиннопериодные структуры реализуются только в сильноиерархических системах с экспоненциальным нарастанием высоты рельефа. Легко видеть, что такие условия могут быть обеспечены наличием дальнедействующих сил. Действительно, если величине s^u , где s — ветвимость дерева Кейли, сопоставить размер кластера L/ξ , отнесенный к длине когерентности ξ , то для его образования характерный радиус взаимодействия должен превосходить величину $L = \xi s^{u_0} \sim \xi s^{p_0^{-1/D}} \gg \xi$. Что касается условия экспоненциального нарастания высоты рельефа, то оно

заведомо реализуется при больших размерах кластеров, когда достигается термодинамический предел: $\Phi(u) \propto L \propto \exp(u \ln s)$.

Если указанные условия не выполняются, то с течением времени наблюдается перестройка одного типа одномерной длиннопериодной структуры в другой. Для выяснения ее характера рассмотрим распределение высот фрактального рельефа, отвечающих набору структур, разрешимых в данном эксперименте. Пусть оно задается последовательностью $\Phi_1 < \Phi_2 < \dots < \Phi_n$. Тогда за микроскопическое время τ_0 атермически образуется длиннопериодная структура, характеризующая наибольшим значением Φ_l , удовлетворяющим условию $\Phi_l \leq T$. Она будет существовать до момента времени

$$t_{l+1} = \tau_0 \exp(\Phi_{l+1}/T),$$

пока термofлуктуационно не образуется структура, следующая в иерархическом ряду. В результате длительность $\Delta t_l = t_{l+1} - t_l$ существования данной длиннопериодной структуры определяется равенством

$$\frac{\Delta t_l}{t_l} = \exp\left(\frac{\Phi_{l+1} - \Phi_l}{T}\right) - 1. \quad (2.59)$$

Характерно, что значение $\Delta t_l/t_l$ зависит от соотношения температуры и ближайших в иерархическом ряду барьеров термодинамического потенциала.

2.5 Особенности низкотемпературной эволюции орторомбической фазы оксидов

2.5.1 Структурная релаксация

Высокотемпературные сверхпроводники (ВТСП) обладают слоистой структурой, представляющей, как правило, орторомбическую решетку типа показанной на рис. 2.9 для стехиометрической системы $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$, где сверхпроводимость обеспечивается заштрихованными слоями CuO_2 [109]. Переход $T \rightarrow 0$ из высокотемпературной тетрагональной фазы в низкотемпературную орторомбическую сводится к упорядочению кислородных вакансий в основании ячейки за счет перемещений кислорода из позиций $O(2)$ в $O(1)$. В результате вдоль направления $[100]$ образуется последовательность рядов CuO , ориентированных вдоль $[010]$. Как

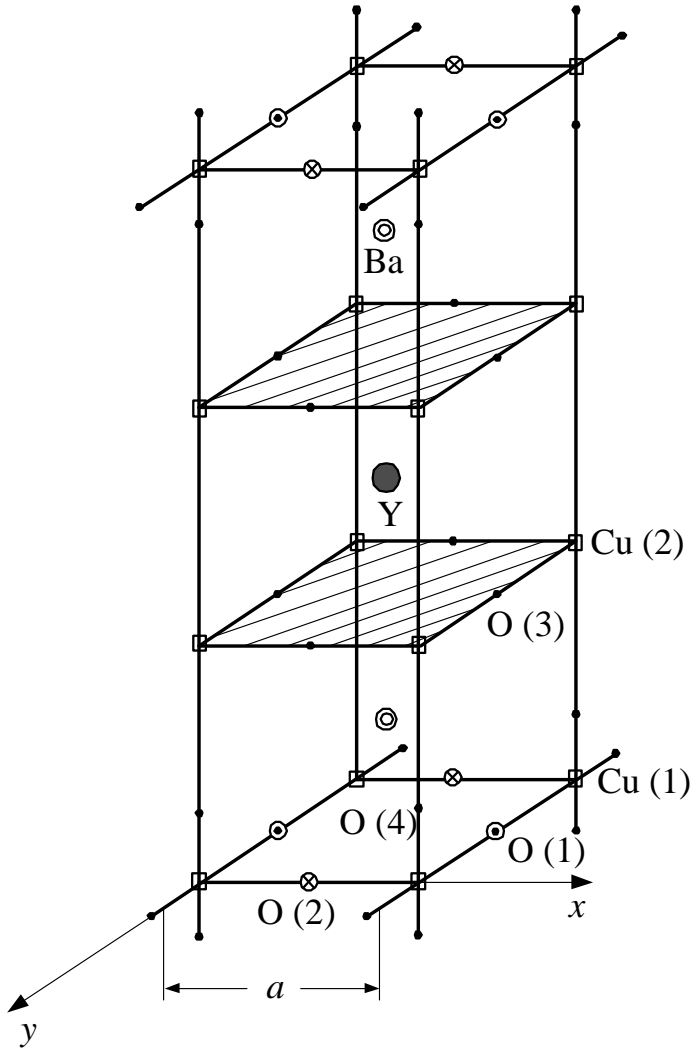
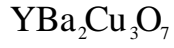


Рисунок 2.9 — Элементарная ячейка стехиометрического ВТСП соединения $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$

показывает кластерно-вариационный расчет [110], в нестехиометрической системе $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$ понижение температуры вблизи области сверхпроводимости приводит не к переходу $T \rightarrow O$, а к превращению $O_I \rightarrow O_{II}$, связанному с удвоением периода чередования рядов кислородных вакансий в направлении [100]. Однако из экспериментальных данных [111, 112] и их анализа [113] следует, что такой переход осуществляется не напрямую, а через последовательность гомологических структур $\{H\}_n$, отвечающих фиксированным значениям степени нестехиометричности $x = n/(2n + 1)$, $n = 1, 2, \dots$ При понижении содержания кислорода в локальных макрообъемах реализации перехода $O_I \rightarrow O_{II}$ H -структуры последовательно сменяют друг друга.

Гомологические структуры представляют пример одномерных длинно-периодных структур, описанных в разделе 2.4. Их основной особенностью является фрактальный характер зависимости $\Phi(k)$ термодинамического потенциала от волнового числа [114]. Действительно, H -структуры, описанные в [113], отвечают наиболее глубоким минимумам в распределении термодинамического потенциала по концентрационным волнам вакансий; с длиннопериодными структурами, отвечающими другим рациональным числам $x \neq n/(2n + 1)$, связано меньшее понижение термодинамического потенциала — тем в большей степени, чем хуже рациональное число x . Это означает, что термодинамический потенциал имеет в обратном пространстве фрактальную структуру — на глубокие минимумы H -структур накладываются более мелкие минимумы структур с более высокой длиной периода, на те — еще мельче и т. д. (см. рис. 2.8а).

В прямом пространстве это означает, что переход $O_I \rightarrow O_{II}$ через стадию H -структур протекает не гомогенно, а посредством иерархической кластеризации: сначала образуются найденные в [111, 112] микрокластеры, отвечающие наименьшим локальным изменениям термодинамического потенциала, их объединение в мезокластер приводит к заполнению минимума термодинамического потенциала следующего иерархического уровня и т. д. Такое поведение представляется движением по иерархическому дереву Кейли, показанному на рис. 2.8б. С физической точки зрения это означает, что перераспределение нестехиометрических вакансий сводится к эволюции иерархически соподчиненного ансамбля концентрационных волн, описание которого требует использования обратного и ультраметрического пространств (см. разделы 2.3, 2.4).

В результате течение структурной релаксации ВТСП оксидов представляется таблицей 2.1, а время развала иерархической структуры кластеров, означающее образование фазы O_{II} , дается таблицей 2.2. При физической

интерпретации указанных данных следует иметь в виду, что переход от медленно нарастающей логарифмической зависимости $\Phi_I(u)$ к быстро изменяющимся степенной $\Phi_p(u)$ и экспоненциальной $\Phi_e(u)$ (см. (2.56)) соответствует росту размеров образующихся кластеров. Применительно к H-структурам это означает рост периода n , обусловленный увеличением степени нестехиометричности x .

Согласно таблице 2.1 критическое замедление структурной релаксации происходит благодаря увеличению степени нестехиометричности x , а также за счет усиления иерархической связи при переходе от первой строки таблицы ко второй. При этом быстро спадающая дебаевская зависимость трансформируется в закон Колерауша, степенное спадание, логарифмическое и даже двойное логарифмическое замедление. Характерно, что рост нестехиометричности x приводит к стабилизации структуры O_I , и при температурах ниже точки замерзания (2.58) она становится практически неизменной. Так, при характерных значениях $\tau_0 \sim 10^{-12}$ с, $Q \sim 0.1 - 1$ эВ стабилизация в течение нескольких лет обеспечивается ниже точки $T_f \sim 2 \cdot (10 - 10^2)$ К.

Что касается времени развала иерархической структуры, то таблица 2.2 указывает на возрастание величины τ_M при уменьшении степени нестехиометричности x . Таким образом, упорядочение $O_I \rightarrow O_{II}$ наиболее быстро протекает с удалением от стехиометрии $x = 0$.

Таким образом, рост нестехиометричности в системе $YBa_2Cu_3O_{7-x}$ приводит к критическому замедлению структурного превращения $O_I \rightarrow O_{II}$, трансформируя дебаевский закон в растянутую экспоненту Колерауша, степенную, логарифмическую и двойную логарифмическую зависимости. При этом ослабляется влияние внешних условий на время развала иерархической структуры τ_M , величина которого определяет устойчивость исходной структуры O_I . Можно ожидать, что указанные особенности проявляются и в других нестехиометрических оксидах. Действительно, поскольку увеличение размера элементарной ячейки способствует росту кластеров и усилению фрактальной зависимости $\Phi(u)$, то следует ожидать, что оно приведет к замедлению структурной релаксации. Так, сравнение характерных энергий пиннинга для систем Y 1:2:3 и Tl 2:2:2:3 дает значения 0.18 эВ и 0.33 эВ соответственно [115]. Следует, однако, иметь в виду, что эти энергии получены в рамках логарифмической аппроксимации и, строго говоря, их соотношение выражает лишь факт замедления магнитной релаксации во второй системе. Если предположить, что центрами пиннинга являются рассмотренные выше структурные кластеры, то этот вывод подтверждает проведенный анализ.

2.5.2 Магнитная релаксация

Кроме описанных особенностей структурной релаксации, ВТСП оксиды обладают своеобразными магнитными свойствами [116], которые напоминают поведение спинового стекла [81]. Обычно объяснение особенностей магнитной релаксации достигается на основе андерсоновской модели пиннинга вихрей на дефектах кристаллической структуры (границы двойников, зерен и т. д.) либо в рамках модели сверхпроводящего стекла. Ниже излагается картина, предполагающая, что магнитная релаксация определяется течением структурной. При этом роль центров пиннинга играют кластеры структурных элементов, а не дефекты структуры. В пользу такой версии говорит тот экспериментальный факт [115], что магнитная релаксация наблюдается не только в монокристаллах $Y\ 1:2:3$, но и в $Tl\ 2:2:2:3$, где двойники отсутствуют, но центры пиннинга гораздо сильнее, чем в первом случае.

Для решения поставленной задачи следует найти связь между структурным коррелятором (2.43) и магнитной восприимчивостью, представляющей корреляцию намагниченности. Будем исходить из предположения, что стекольное поведение ВТСП обусловлено не электронной подсистемой или гранулированной структурой, а описанными в подразделе 2.5.1 особенностями структурной релаксации. Их суть состоит в том, что по истечении времени, необходимого для установления иерархической связи, структурный фактор S приобретает медленно спадающий характер, представленный таблицей 2.1. Соответственно полная восприимчивость $\chi_{AC} = dM/dH_a$, отвечающая намагниченности M в поле H_a , представляется суммой обратимой составляющей $\chi_{DC} = M/H_a$ и необратимого отклика Δ . В отличие от эргодических систем, где коррелятор и восприимчивость связаны флуктуационно–диссипационной теоремой, сингулярные составляющие S и Δ , обусловленные неэргодичностью, соотносятся более сложным образом. Как показывает пример спинового стекла [81], эта связь может быть установлена лишь для производных от S и Δ по сингулярному времени z , которое при разных степенях иерархической соподчиненности сводится к величинам $\exp(t/\tau_0)^\beta$, $(t/\tau_0)^\gamma$, $\ln(t/\tau_0)$, $\ln \ln(t/\tau_0)$ (см. таблицу 2.1). В духе подхода [117], использованного для необратимого отклика $\tilde{\chi}$ спинового стекла, можно записать $Td\tilde{\chi}/dz = -w(z)dS/dz$, где $w(z)$ — функция, монотонно спадающая в конечном интервале значений (ее выбор определяется условиями эксперимента). Связь между необратимой магнитной восприимчивостью Δ и структурной составляющей $\tilde{\chi}$ устанавливается соотношением $\Delta \propto j_c^2(T/Q)^2\tilde{\chi}$, вытекающим из стандартной модели крипа магнитного потока (j_c — критическая величина тока) [116]. В результате для необратимой магнитной восприимчивости и соответствующей составляю-

шей структурного коррелятора получаем связь

$$\Delta \propto \frac{T}{Q^2} j_c^2 \int_0^{y(z)} w(y) \frac{dS}{dy} dy, \quad (2.60)$$

где вид монотонно возрастающей зависимости $y(z)$ фиксируется выбором функции $w(y)$ [117]. Полная намагниченность определяется равенством

$$M = \chi_{DC} H_a - R\sigma(z); \quad (2.61)$$

$$R \propto T \int_0^{H_a} \left(\frac{j_c}{Q} \right)^2 dH, \quad \sigma(z) \equiv - \int_0^{y(z)} w(y) \frac{dS}{dy} dy.$$

Выражения (2.60), (2.61) получены на основе представлений, использующих как концепцию стекла — при описании эволюции иерархически соподчиненной кластерной структуры ВТСП, так и модель крипа. Последняя обуславливает вид (2.61) вклада R в намагниченность. С учетом температурно–полевой зависимости критического тока $j_c \sim \exp \left[-\frac{T}{T_0(H_a)} - \frac{H_a}{H_0(T)} \right]$ [118] легко видеть, что следующая из (2.61) зависимость $R(T, H_a)$ согласуется с имеющимися экспериментальными данными [115] — [120]. В частности, положение максимума зависимости $R(T)$, обусловленного множителем T и спаданием критического тока $j_c(T)$, определяется величиной $T_0(H_a)$, которая согласно [118] спадает с ростом поля. При этом высота максимума, как и следовало, возрастает.

Релаксация намагниченности определяется множителем $\sigma(z)$. Для эргодической системы $w(y) = 1$, $y(z) = z$ и согласно (2.61) $\sigma(z)$ сводится к $S(z)$. В этом случае магнитная релаксация протекает по закономерностям структурной, которые рассмотрены в предыдущем подразделе. Отсутствие самоусредняемости неэргодической системы [96] является причиной более сложной связи (2.61) между структурным коррелятором S и магнитным σ . Вид этой связи определяется зависимостями $w(y)$, $y(z)$, форма которых имеет случайный характер [117]. Отсюда следует важный вывод о неполной воспроизводимости структурных и магнитных свойств ВТСП — даже при полной воспроизводимости внешних условий.

В этой связи представляется актуальным вопрос о выборе выражения для скорости магнитной релаксации. Обычно она задается наклоном временной зависимости намагниченности $M(t)$, взятой в полулогарифмических координатах. Однако эта зависимость сводится к линейной только при

значениях $\ln(t, \text{мин})$, превышающих несколько единиц [118]. Отсюда можно заключить, что прямопропорциональная зависимость между $|M|$ и $\ln t$ является, строго говоря, аппроксимацией, отражающей критическое замедление процесса магнитной релаксации. Так, из рис. 2.10 видно, что более подходящей будет обратная логарифмическая зависимость, которая и фигурирует в таблице 2.1. Анализ [115] показывает, что, кроме того, магнитная релаксация может протекать как по закону Колерауша, так и степенным образом.

Структура первого равенства (2.61) показывает, что в общем случае не зависящая от времени скорость магнитной релаксации определяется производной $-dM/d\sigma$, сводящейся к множителю $R(T, H_a)$. Только такой выбор дает величину, не меняющуюся в процессе релаксации (с математической точки зрения это обеспечивается разделением множителей R, σ в выражении (2.61) для остаточной намагниченности). Физическая причина такого разделения состоит в том, что скорость релаксации R задается интенсивностью элементарных процессов крипа, а сингулярное время магнитной релаксации σ — эволюцией структуры. Отметим в этой связи, что интенсивность течения времени $\sigma(z)$ зависит как от температуры (см. таблицу 2.1), так и от поля (через характерную высоту рельефа Q [119]).

Развитая картина предполагает модификацию в трактовке линии необратимости, существование которой следует как из криповой, так и спиновой моделей [116]. На наш взгляд, существует не одна, а две не совпадающие линии необратимости — структурная и магнитная. Существование первой обусловлено наличием иерархической соподчиненности кластеров структуры типа наблюдающейся в спиновых стеклах. На фазовой диаграмме *концентрация кислорода — температура* положение этой линии определяется подобно точке потери устойчивости де Альмейды—Таулесса [81] (при этом совершенно не затрагивается магнитная структура). Можно полагать, что проявлением структурной необратимости обусловлена аномалия теплоемкости в области температур $\sim 240\text{К}$ [121]. Что касается линии магнитной необратимости, то ее положение определяется согласно криповой модели [116], где характерная высота барьера не сводится к соответствующей величине Q для структурной релаксации.

Таким образом, уже в нормальной области возможно критическое замедление структурной релаксации, приводящее к эволюции потенциального рельефа, действующего на вихри в сверхпроводящей фазе. Включение магнитной необратимости, происходящее в сверхпроводящей области, должно приводить к дополнительному вкладу в необратимую восприимчивость (2.60). Этот вклад обеспечивает излом скорости релаксации R , обна-

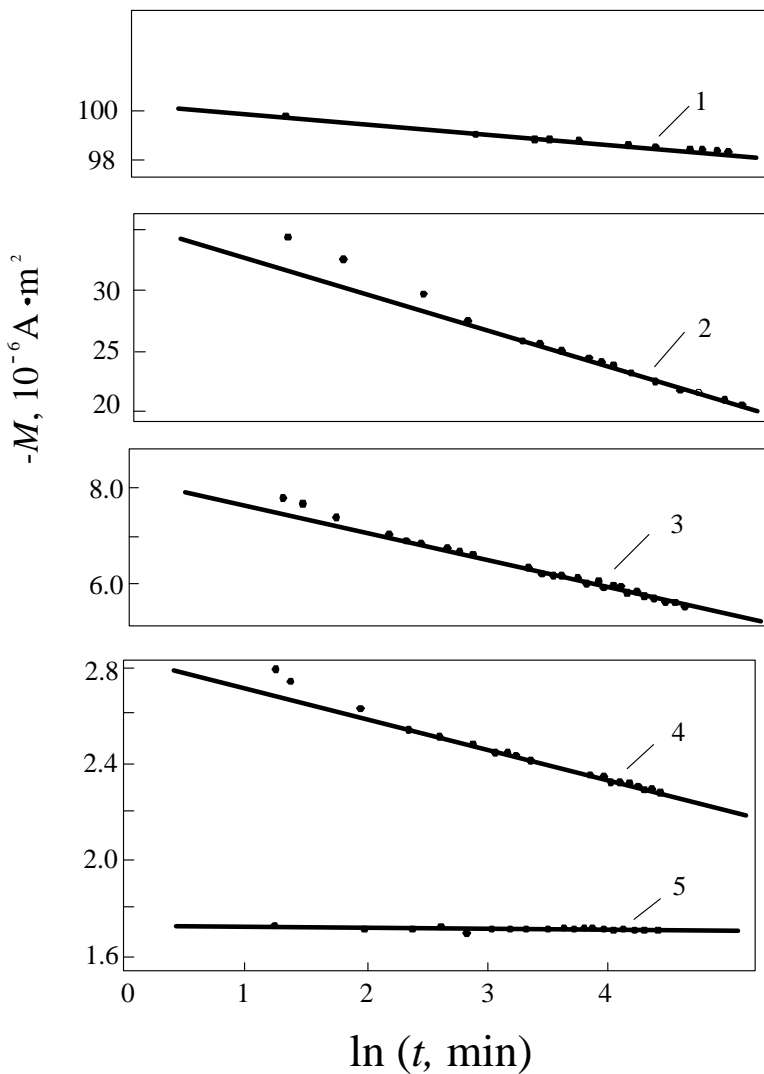


Рисунок 2.10 — Временная зависимость магнитного момента монокристалла $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_x$ в поле 52 мТл, параллельном оси z (кривые 1 — 5 отвечают температурам 4.2; 20; 30; 40 и 50 К [118])

руженный в [120].

2.6 Кинетика наводороживания и дегазации палладия

Один из примеров системы, поведение которой не может быть описано законами равновесной термодинамики, представляет палладий, электрохимически насыщенный водородом. Здесь отклонение от равновесия обеспечивается давлением

$$P(\text{атм}) \simeq 1.7 \cdot 10^7 \cdot j(\text{мА/см}^2), \quad (2.62)$$

возникающим вследствие пропускания тока j [122]. На фазовой диаграмме Pd – H в осях P — T существует куполообразная двухфазная область с вершиной в точке $T_c = 298^\circ\text{C}$, $P_c = 19.87$ атм [123]. Здесь сосуществуют α - и β -фазы, которые имеют одинаковую ГЦК решетку. Однако α -фаза, отвечающая твердому раствору H в Pd концентрацией не более 2 – 3%, обладает параметром решетки $a = 3.893\text{\AA}$, тогда как для β -фазы, представляющей гидрид палладия Pd_3H_5 , $a = 4.027\text{\AA}$ [122].

Характерная особенность α - β превращения состоит в наличии большой дилатации $\delta = 3.4 \cdot 10^{-2}$. При прямом превращении $\alpha \rightarrow \beta$, в процессе которого давление водорода удаляет систему от равновесия, расширение решетки δ приводит к упругим полям, наличие которых существенно влияет на процесс зарождения и роста β -фазы. Особенности этого процесса рассмотрены в подразделе 2.6.1 [124]. Сжатие решетки при обратном $\beta \rightarrow \alpha$ превращении, которое наблюдается в ходе дегазации, приводящей систему к равновесию, сопровождается образованием в α -фазе комплекса дефектов — дислокаций и их петель, вакансий, микропустот и т. д. [125] — [127]. При многократном циклировании процесса *наводороживание—дегазация* плотность этих дефектов приобретает настолько высокие значения, что они образуют иерархические структуры типа исследованных в разделах 2.4, 2.5. Возникающие при этом особенности процесса дегазации представлены в подразделе 2.6.2.

2.6.1 Образование и рост β -фазы

Образцы палладия, представляющие ленты толщиной 0.1 мм, насыщались водородом при комнатной температуре и плотности тока $j=2.5$ мА/см². Из-

мерения интенсивности рентгеновских дифракционных максимумов проводились в режиме автоматической записи на рентгеновском дифрактометре с монохроматическим $\text{Cu} - K_{\alpha}$ -излучением. Обеспечивались условия съемки, при которых дифракционный максимум (hkl) формируется лишь теми областями когерентного рассеяния, в которых отражающие плоскости параллельны поверхности образца. Содержание β -фазы в областях разной кристаллографической ориентировки рассчитывалось из сравнения интенсивностей дифракционных максимумов α - и β -фаз. При этом учитывалось ослабление за счет эффектов экстинкции и наличия дефектов [128]. Исследование субструктуры основано на анализе ширины дифракционных максимумов [70].

В зависимости от времени насыщения t объемная доля p выделений β -фазы, измеренная сразу после наводороживания, возрастает согласно рис. 2.11 (сплошные линии). На начальном этапе линии β -фазы не обна-

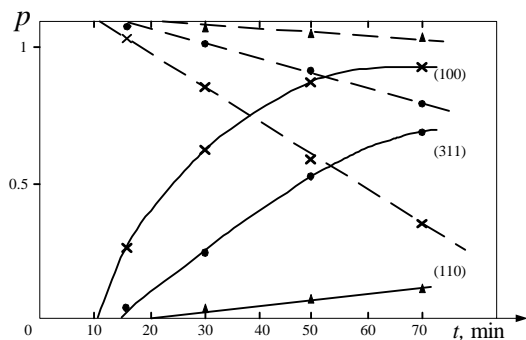


Рисунок 2.11 — Зависимость от времени наводороживания t объемного содержания β -фазы p в областях когерентного рассеяния разных ориентировок (сплошные линии). Штриховые отвечают полулогарифмической зависимости $\ln(1 - p)$ от t

руживаются вследствие инкубационного периода. Скорость роста объемного содержания β -фазы максимальна для области когерентного рассеяния (100) и уменьшается при переходе к (311) и (110). Указанные зависимости хорошо ложатся на прямые линии в полулогарифмических координатах $\ln(1 - p) - t$ (штриховые линии на рис. 2.11). Тангенс угла наклона γ характеризует скорость $\alpha \rightarrow \beta$ превращения в областях когерентного рассеяния данной ориентировки, а отсекаемый отрезок — длительность t_0 соответствующего инкубационного периода. Значения γ и t_0 , рассчитанные методом наименьших квадратов, приведены в таблице 2.3:

Таблица 2.3 — Параметры эмпирической зависимости (2.63)

Ориентировка	$t_0, 10^2$ с	$\gamma, 10^{-4}$ с $^{-1}$
(100)	6 ± 0.3	8.7 ± 0.3
(311)	9 ± 0.9	3.8 ± 0.2
(110)	10 ± 2.5	0.43 ± 0.06

Полученные данные показывают, что для области когерентного рассеяния каждой ориентировки объемное содержание β -фазы изменяется в соответствии с дебаевской зависимостью

$$p(t) = p_0 \{1 - \exp[-\gamma(t - t_0)]\}, \quad (2.63)$$

где p_0 — конечное содержание β -фазы; γ — логарифмическая скорость роста; t_0 — инкубационный период. Характерно, что величины t_0 для области когерентного рассеяния разных ориентировок соотносятся как 1 : 1.5 : 1.7, а значения γ^{-1} — как 1 : 2.3 : 20.

Для интерпретации эмпирической зависимости (2.63) воспользуемся кинетической теорией фазовых превращений первого рода, основанной на флуктуационной картине зарождения фазы и последующего роста ее выделений [11]. При постоянном числе зародышей n , возникающих за единицу времени в единичном объеме, содержание β -фазы представляется зависимостью Авраами [129]

$$p = p_0 \{1 - \exp[-nV_\beta(t - t_0)]\}, \quad (2.64)$$

где V_β — объем выделения β -фазы. Согласно [130] при электрохимическом насыщении зародыши β -фазы имеют форму пластин толщиной d и сечением S , которые ориентированы перпендикулярно потоку атомов водород. Объем $V_\beta = Sd$ определяется временной зависимостью $d(t)$ толщины

пластины вдоль нормали к поверхности образца. Субструктурные исследования показали, что в процессе насыщения величина d остается неизменной, сохраняя значение, равное размеру области когерентного рассеяния исходной α -фазы. Это связано с тем, что зародыши β -фазы растут в ограниченном объеме областей когерентного рассеяния α -фазы, достигая их размера за время $\Delta t \sim d^2/D \approx 4 \cdot 10^{-4}$ с, которое намного меньше характерного времени насыщения $t \geq 10^2$ с (здесь толщина пластины $d = 1.5 \cdot 10^{-5}$ см, коэффициент диффузии $D \approx 3 \cdot 10^{-7}$ см²/с)[131].

Таким образом, параметры зависимости (2.64) не меняются за время $t \gg \Delta t$, и она сводится к (2.63), где $\gamma = nV_\beta$. Поскольку объем $V_\beta = Sd$ определяется субструктурой исходной α -фазы, то внешние условия сказываются на его величине только через параметры этой структуры (размер области когерентного рассеяния α -фазы и величину микродеформации). Откладывая исследование соответствующей зависимости на конец подраздела 2.6.2, проанализируем влияние условий эксперимента на параметры t_0 , n .

Согласно флуктуационной теории инкубационный период образования зародыша критического размера R_c определяется равенством [12]

$$t_0 \simeq \frac{R_c}{v} \exp \left[\frac{\Delta F(R_c)}{T} \right], \quad (2.65)$$

где T — температура; $\Delta F(R_c)$ — изменение свободной энергии в результате образования критического зародыша; v — скорость движения границы. В рамках макроскопического приближения поверхностная энергия определяется коэффициентом натяжения σ , а объемная — выигрышем плотности энергии в результате превращения:

$$g = q \left(1 - \frac{T}{T_0} \right) - (E_e + E_d). \quad (2.66)$$

Здесь T_0 , q — температура и удельная теплота превращения; E_e , E_d — упругая энергия и энергия дефектной структуры, приходящиеся на единицу объема. Подстановка в (2.65) выражения для критического радиуса $R_c = \sigma/g$ [11] приводит к окончательному выражению для инкубационного периода:

$$t_0 \simeq \frac{\sigma}{gv} \exp \left(c \frac{\sigma^3}{g^2 T} \right), \quad (2.67)$$

где $c \sim 1-10$ — параметр формы зародыша.

Согласно (2.66) выигрыш свободной энергии $g > 0$ в результате превращения обеспечивается только при переохлаждениях

$$T_0 - T > \frac{E_e + E_d}{q} T_0. \quad (2.68)$$

При заданных величинах E_e , E_d , q это достигается либо уменьшением температуры эксперимента T , либо увеличением температуры превращения T_0 (последнее обеспечивается повышением давления (2.62) за счет увеличения плотности тока j). В этом случае условие (2.68) принимает вид

$$\Delta T(j) > \frac{E_e + E_d}{q} T_c, \quad (2.69)$$

где $\Delta T(j)$ — эффективное переохлаждение, обеспечиваемое плотностью тока j .

Согласно фазовой диаграмме Pd – H [123] критическая температура превращения, отвечающая вершине купола двухфазной области, составляет $T_c = 298^0$ С, соответствующее давление $P_c = 19.87$ атм. Поскольку насыщение ведется при комнатной температуре, то предельное переохлаждение $T_c - T \approx 280$ К может быть достигнуто уже при критической плотности тока $j_c = 1.17$ мА/см². В нашем эксперименте $j = 2.5$ мА/см², в связи с чем $P > P_c$ и система попадает в однофазную область. При значительном превышении тока j над критическим значением j_c переохлаждение (2.69), а вместе с ним и изменение свободной энергии (2.66) настолько возрастают, что инкубационный период (2.67) принимает исчезающе малые значения. Так, при плотности тока $j = 25$ мА/см² инкубационный период практически отсутствует.

Исследуем влияние упругой энергии. В континуальном приближении ее величина $E = E_e \Omega$, приходящаяся на один атом объемом Ω , имеет вид [11]

$$E = \frac{1}{2} A(\mathbf{n}) \delta^2, \quad (2.70)$$

где $A(\mathbf{n})$ — эффективный модуль упругости, умноженный на атомный объем; $\delta = 0.034$ — деформация решетки при $\alpha \leftrightarrow \beta$ превращении. Использование выражения (2.70) при известных упругих постоянных [132] и параметрах решетки α - и β -фаз [122] дает для разных ориентировок следующие значения: $E(100) = 183$ К, $E(311) = 236$ К, $E(110) = 313$ К и $E(111) = 346$ К. Таким образом, упругая энергия существенным образом зависит от кристаллографической ориентировки зародыша. Согласно

(2.66), (2.67) именно эта зависимость обуславливает разную длительность инкубационного периода для зародышей разных ориентировок. При указанных значениях $E(hkl)$ для областей когерентного рассеяния ориентировок (100), (311), (110) и (111) получаем соотношения t_0 как 1 : 1.2 : 1.6 : 1.8. Это находится в удовлетворительном согласии с приведенными выше экспериментальными данными 1 : 1.5 : 1.7.

Следует иметь в виду, что инкубационный период (2.67) определяется не только выигрышем свободной энергии g , но и поверхностным натяжением σ . Поэтому зависимость t_0 от ориентировки области когерентного рассеяния может быть связана и с зависимостью $\sigma(hkl)$. Так, для границы *ГЦК кристалл — жидкость* коэффициент поверхностного натяжения возрастает в ряду (111), (100), (110) и (311) [133], тогда как значение t_0 изменяется в совершенно другой последовательности. Это различие может быть обусловлено двумя причинами. Во-первых, при переходе от границы *кристалл—жидкость* к межфазной последовательность ориентировок, приводящая к росту σ , может измениться. Кроме того, изменение значений σ для разных ориентировок может оказаться менее существенным, чем соответствующее изменение упругой энергии.

Важную роль в кинетике зарождения β -фазы играет дефектная структура. Наиболее явным образом это проявляется в следующем эксперименте. Лента, предварительно насыщенная водородом в течение 30 мин, затем дегазировалась на воздухе в течение 1600 ч. При вторичном насыщении в том же режиме β -фаза в образце не была обнаружена. Процесс насыщения был повторен еще раз, и опять β -фаза не была обнаружена: тщательное исследование в области углов дифракции, соответствующих положению наиболее сильной линии (200) β -фазы, не выявило даже следов этой линии. Лишь повышение плотности тока до 3.75 мА/см^2 позволило получить β -фазу содержанием 85% в области когерентного рассеяния ориентировки (100).

При трактовке описанного эксперимента следует иметь в виду, что исходное состояние перед первым насыщением характеризовалось микродеформацией $\varepsilon = 1.5 \cdot 10^{-3}$, соответствующей плотности хаотически распределенных дислокаций $\rho = 1.2 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-2}$ (напомним, что $\varepsilon \propto \rho^{1/2}$) [70]. Перед вторым насыщением микродеформация возросла до величины $\varepsilon = 3 \cdot 10^{-3}$, отвечающей плотности дислокаций $\rho = 4.7 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-2}$. Поскольку $E_d \propto \rho$, то это означает, что перед вторым насыщением энергия E_d возросла примерно в 4 раза по сравнению со случаем, предшествующим первому насыщению. Это привело к нарушению условия зарождения (2.69), выполнение которого потребовало повышения плотности тока, обеспечива-

ющего рост $\Delta T(j)$. При этом изменение упругой энергии E_e составляет не более 1%.

Перейдем к анализу скорости образования зародышей n , величина которой определяет инкремент γ . Флуктуационная теория дает выражение [12]:

$$n \propto \exp\left(-c \frac{\sigma^3}{g^2 T}\right) \exp\left(-\frac{U}{T}\right), \quad (2.71)$$

содержащее энергию U миграции межфазной границы по ее потенциальному рельефу (ср. с (2.67)). В отличие от энергии упругих искажений, представляющей собственный вклад упругого поля, пропорциональный квадрату деформации превращения δ , энергия взаимодействия границы с этим полем изменяется линейным образом (следует учесть также деформацию ε , обусловленную дефектной структурой):

$$U = U_0 + B(\delta + \varepsilon). \quad (2.72)$$

Здесь энергия миграции в идеальном кристалле U_0 и параметр взаимодействия B границы с упругим полем определяются ориентировкой области когерентного рассеяния. Учитывая, что характерные деформации составляют $\delta \sim 10^{-2}$, $\varepsilon \sim 10^{-3}$, из сравнения равенств (2.70) и (2.72) видим, что для энергии миграции (2.72) ориентационная зависимость является более сильной, чем для выигрыша термодинамического потенциала (2.66). Поэтому изменение ориентировки области когерентного рассеяния должно влиять на величину инкремента γ более существенно, чем на инкубационный период t_0 . Действительно, в последовательности ориентировок (100), (311), (110) для t_0 имеем отношения 1 : 1.5 : 1.7, тогда как для γ^{-1} они составляют 1 : 2.3 : 20. Согласно (2.67), (2.71) такие соотношения выполняются, если $U(311) - U(100) \approx 128$ К, $U(110) - U(100) \approx 758$ К. Столь существенная разница значений $U(hkl)$ является подтверждением линейной зависимости (2.72). С другой стороны, это означает, что ориентационная зависимость параметра $\gamma(hkl)$ не должна подавляться значительным повышением плотности тока. Действительно, она наблюдалась даже при $j = 60$ мА/см².

Что касается влияния на инкремент γ переохлаждения $\Delta T(j)$, упругой энергии E_e и энергии дефектов E_d , то сравнение выражений (2.71), (2.67) показывает, что оно будет таким же, как и для инкубационного периода t_0 .

Из сказанного видно, сколь важное влияние оказывает на процесс наводороживания дефектная структура, характеризующаяся величиной микродеформации ε . Ее нарастание со временем насыщения показано на рис. 2.12. Поскольку дефекты образуются, как правило, в α -фазе, содержание

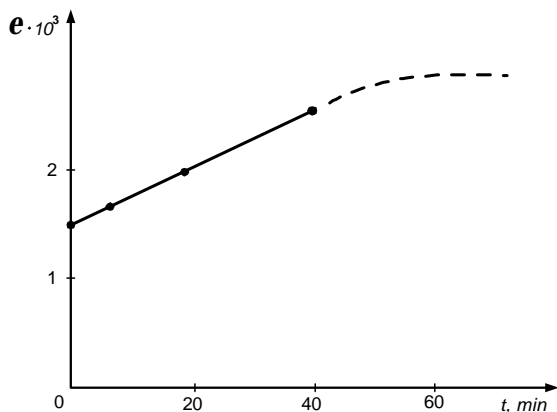


Рисунок 2.12 — Зависимость величины микродеформации ε от времени наводороживания t

которой $1 - p \ll 1$ при насыщении $t \geq 70$ мин, то зависимость $\varepsilon(t)$ носит линейный характер только при $t < 40$ мин, а затем благодаря исчезновению α -фазы рост деформации замедляется.

Далее мы покажем, что многократное циклирование процесса *наводороживание — дегазация* приводит к развитию иерархической дефектной структуры, обуславливающей фрактальную зависимость $U(\mathbf{r})$ потенциального рельефа по объему кристалла. Это приводит к критическому замедлению процесса дегазации, обеспечиваемого обратным $\beta \rightarrow \alpha$ превращением [127]. Однако отсюда вовсе не следует, что после такого циклирования кинетика наводороживания, задаваемая прямым $\alpha \rightarrow \beta$ превращением, будет значительно отличаться от дебаевской. Действительно, если обратное превращение $\beta \rightarrow \alpha$ требует последовательного термоактивируемого прохождения межфазной границы по всему потенциальному рельефу, то прямое $\alpha \rightarrow \beta$ превращение обеспечивается пропусканием плотности тока j , которая, согласно (2.62), приводит к давлению P , уменьшающему параметр взаимодействия B в выражении (2.72):

$$B = B_0 - bP, \quad (2.73)$$

где b — положительная константа. При этом потенциальный рельеф $U(\mathbf{r})$ приобретает наклон, пропорциональный плотности тока, и при больших значениях j его фрактальная структура размывается. В результате течение прямого $\alpha \rightarrow \beta$ превращения определяется не всей зависимостью $U(\mathbf{r})$, а только максимальной высотой барьера $U_{max} = U_{max}(j)$, определяющей дебаевскую кинетику с инкрементом $\gamma \propto \exp(-U_{max}/T)$.

2.6.2 Кинетика обратного $\beta \rightarrow \alpha$ превращения

Длительное время сведения о кинетике $\beta \rightarrow \alpha$ превращения ограничивались данными электронно-микроскопических исследований [125], согласно которым в тонких фольгах β -фаза может существовать от нескольких до сотен часов. Установив, что время прохождения межфазной границы через β -фазу намного меньше времени ее существования, авторы [125] высказали предположение о прерывистом характере $\beta \rightarrow \alpha$ превращения. Последующие исследования на тонких лентах и массивных образцах показали [134, 135], что при выдержке образцов в комнатных условиях β -фаза может сохраняться в течение 10^4 ч, что на несколько порядков превышает время диффузионного выхода водорода из образца. На основании этого был сделан вывод, что время дегазации определяется условиями существования β -фазы, устойчивость которой обеспечивается образованием дефектной структуры. Кроме того, оказалось, что процесс дегазации имеет многостадийный характер [135].

Для исследования влияния дефектной структуры на кинетику $\beta \rightarrow \alpha$ превращения использовались три пластины палладия, поверхность которых сначала шлифовалась, а затем проводилась механическая полировка [127]. Один образец оставался в деформированном состоянии, два других отжигались при температуре 700°C в течение 2 ч. Насыщение водородом проводилось при комнатной температуре электрохимическим методом (электролит — 4% водный раствор NaF) в течение 15 мин при плотности тока 40 mA/cm^2 . Один из отожженных образцов многократно наводороживался таким образом, что каждое насыщение сопровождалось последующей выдержкой при комнатных условиях в течение 70–120 ч. Два других образца (один — деформированный, другой — отожженный) наводороживались только один раз.

Измерялись интегральные интенсивности и ширины дифракционных максимумов на рентгеновском дифрактометре в монохроматическом $\text{Cu} - K_\alpha$ -излучении. Среднеквадратичная ошибка каждого измерения не превышала 5% — для интегральной интенсивности максимумов и 10% — для ин-

тегральной ширины. Среднеквадратичная ошибка в определении объемной доли β -фазы составила не более 7% и уменьшалась с ее ростом. Минимально обнаружимое содержание β -фазы — 2%. Точность в определении размера области когерентного рассеяния d и величины микродеформации ε не ниже 25%.

Результаты измерений показали, что однократное насыщение отожженного образца приводит к образованию β -фазы, занимающей 60% объема. Процесс дегазации начинается в первые минуты выдержки, и за 25 ч объемная доля p уменьшается до 2%. Данные о поведении параметров дефектной структуры в ходе выдержки приведены на рис. 2.13. В исходном состоянии размер области когерентного рассеяния $d = 2 \cdot 10^{-5}$ см, наводороживание привело к незначительному уменьшению d и появлению микродеформации α -фазы ε_α . Образующиеся при насыщении области β -фазы успевают дорасти до размеров области когерентного рассеяния α -фазы, в которых они образуются. Концентрация дефектов возрастает только в α -фазе, достигая максимального значения на участке, отвечающем наибольшей скорости дегазации. Рост плотности дислокаций происходит как за счет увеличения их содержания в стенках (на это указывает рост отношения интенсивностей $I(200)/I(400)$), так и за счет хаотической компоненты, приводящей к росту микродеформации $\varepsilon \propto \sqrt{\rho}$. После 25 ч выдержки процесс дегазации замедляется, перестает изменяться и дефектная структура.

Поведение деформированного образца отличается от отожженного благодаря наличию микродеформации ε и дефектов упаковки в исходном состоянии. Как видно из рис. 2.13, при насыщении в α -фазе исчезли дефекты упаковки, размер области когерентного рассеяния уменьшился до $(3-4) \cdot 10^{-6}$ см, а микродеформация возрасла на 50%. При последующей выдержке значения ε_α , d_α не изменяются, а отношение интенсивностей $I(200)/I(400)$ уменьшается, указывая на спадание плотности дислокаций в стенках блоков α -фазы. Что касается β -фазы, то в первые 25 ч, отвечающие наиболее существенному понижению содержания водорода, происходит значительное измельчение областей когерентного рассеяния, микродеформация спадает, а плотность дислокаций в стенках увеличивается. При дальнейшей выдержке области когерентного рассеяния β -фазы дорастают до размера исходной α -фазы, микродеформация также увеличивается, а содержание дислокаций в стенках остается неизменным. Таким образом, в деформированном образце выдержка приводит к релаксации дефектов дислокационного типа, но в β -фазе возникают вакансии, микропустоты и дислокационные петли малого радиуса. Содержание β -фазы сразу после насыщения составляет $p = 80\%$, процесс дегазации начинается после инку-

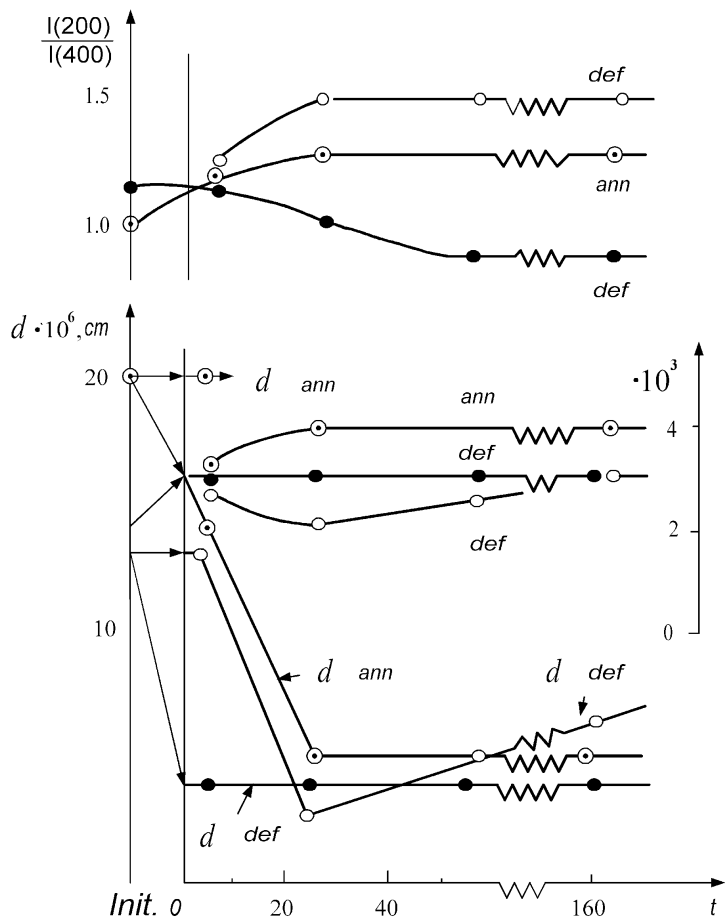


Рисунок 2.13 — Изменение параметров дефектной структуры α - и β -фаз при выдержке деформированного и отожженного образцов на воздухе при комнатной температуре

бационного периода продолжительностью 5 ч. В следующие 25 ч величина p уменьшается до 30%, а затем за 150 ч — всего на 5%.

Циклическое наводороживание представляется картиной, показанной на рис. 2.14. Рассмотрим сначала α -фазу. При первом насыщении исходный размер области когерентного рассеяния $d = 3 \cdot 10^{-5}$ см уменьшается до $d = 0.5 \cdot 10^{-5}$ см. Водород практически полностью выходит из образца за 25 ч. На 2-м цикле скорость дегазации практически не уменьшается и никаких изменений дефектной структуры не наблюдаются (равно как нет их и при наводороживании). В ходе 3-го и 4-го циклов величины d , ε остаются неизменными, но отношение интенсивностей $I(200)/I(400)$ возрастает. Наблюдается рост концентрации дефектов, приводящий к замедлению прироста концентрации водорода при насыщениях в каждом последующем цикле (так, при 3-м насыщении она выросла на 35%, а при 4-м на 15%). Кроме того, происходит коагуляция точечных дефектов как при обратном $\beta \rightarrow \alpha$, так и прямом $\alpha \rightarrow \beta$ превращениях.

При исследовании β -фазы оказалось, что для двух первых циклов интенсивность линии (400) измерить невозможно. Ширина линии (200) остается неизменной для всех циклов, откуда можно предположить неизменность дефектной структуры β -фазы. Образующиеся области когерентного рассеяния достигают гораздо больших размеров, чем области когерентного рассеяния α -фазы, на основе которых они растут. Поведение отношения $I(200)/I(400)$ свидетельствует о том, что при наводороживании происходит уменьшение плотности дислокаций в стенках вплоть до полного их исчезновения.

Проведем интерпретацию полученных данных. Учитывая гетерогенный характер системы, образуемой смесью α - и β -фаз, можно полагать, что процесс дегазации определяется не диффузией водорода, а движением межфазной границы в потенциальном рельефе, формируемом дефектами. В предыдущем подразделе было показано, что такой процесс определяет инкубационный период, который задается вероятностью флуктуационного преодоления барьера, разделяющего термодинамические состояния фаз. Исследуем теперь влияние дефектной структуры, возникающей при прямом $\alpha \rightarrow \beta$ и обратном $\beta \rightarrow \alpha$ превращениях, на эволюцию β -фазы. При однородном распределении дефектов плотностью $n \sim l^{-3}$ процесс дегазации описывается дебаевской зависимостью

$$p(t) = p_{\infty} - (p_0 - p_{\infty}) \exp(-t/\tau), \quad \tau \sim (l/v) \exp(U/T), \quad (2.74)$$

где p_0 , p_{∞} — начальное и конечное содержание водорода; v — скорость движения межфазной границы; U — высота барьера, создаваемого дефек-

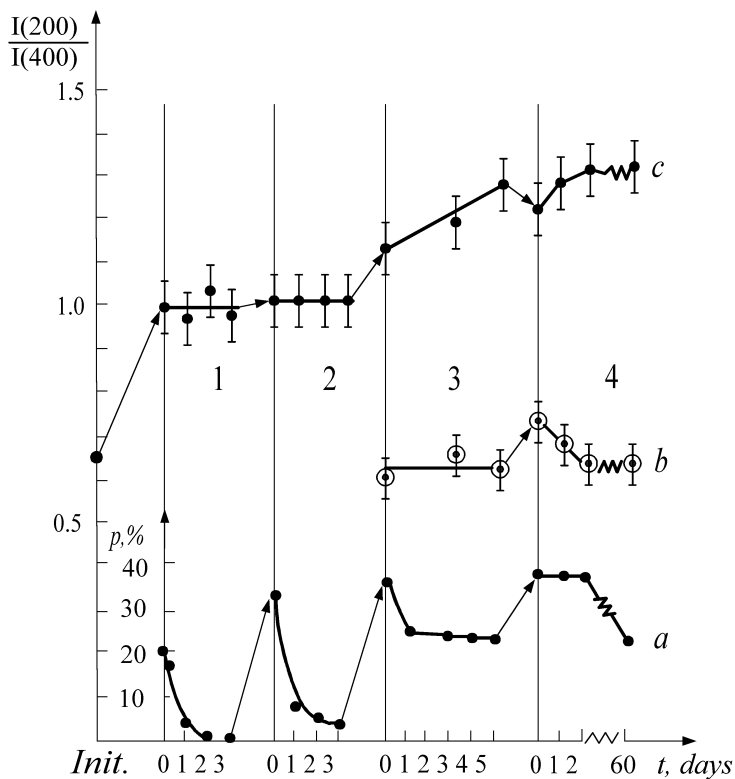


Рисунок 2.14 — Изменение содержания β -фазы при циклировании процесса насыщение–дегазация (кривая а). Соответствующее изменение отношения интенсивностей $I(200)/I(400)$ в β - и α -фазах (кривые b, c). Цифры указывают номера циклов

тами. Переход от одиночных дефектов, характеризующихся малыми значениями U , к их комплексам, отвечающим более высоким барьерам, приводит к увеличению времени релаксации, означая замедление процесса.

Следует, однако, иметь в виду, что деформация, обусловленная превращением, настолько отдаляет систему от равновесия, что дефекты решетки могут объединяться не только в простые комплексы, но и иерархические образования, отвечающие разным структурным уровням [54]. Так, вакансии, атомы внедрения и дислокационные петли образуют облака у дислокаций, которые, в свою очередь, выстраиваются в стенки, последние образуют блоки разной ориентировки и т. д. Таким образом, возникает иерархическая структура дефектов, потенциальный рельеф которой имеет фрактальный характер: на большие барьеры, отвечающие макроскопическим комплексам, накладываются более мелкие, мезоскопические, на них — еще мельче и т. д. В результате движение межфазной границы существенно замедляется и дебаевская зависимость (2.74) трансформируется согласно таблице 2.1.

Феноменологическое рассмотрение, изложенное в разделе 2.4, показывает, что поведение системы определяется законом нарастания термодинамического потенциала (2.56), где роль Φ играет высота потенциального рельефа U , а также силой иерархической связи, определяемой соотношениями (2.57). Для слабоиерархических систем, обладающих логарифмически медленным нарастанием потенциального рельефа, реализуется растянутая экспонента Колерауша

$$p \sim \exp[-(t/\tau_0)^\beta], \quad (2.75)$$

определяемая показателем $\beta < 1$ (τ_0 — дебаевское время). Более медленное степенное спадание

$$p \sim (t/\tau_0)^{-T/Q} \quad (2.76)$$

наблюдается при степенном нарастании рельефа в слабоиерархических системах либо при логарифмическом — в системах с сильной связью (Q — характерная высота рельефа). Если же высота барьера нарастает экспоненциально быстро (в слабоиерархических системах) или степенным образом (при сильной связи), то происходит логарифмическое замедление

$$p \sim \left(\frac{T}{Q} \ln \frac{t}{\tau_0} \right)^{-\alpha}, \quad (2.77)$$

где показатель $\alpha > 0$. Практически такое замедление означает остановку процесса дегазации, однако оно будет сказываться только до момента времени, пока существует иерархическая структура дефектов (см. таблицу 2.2).

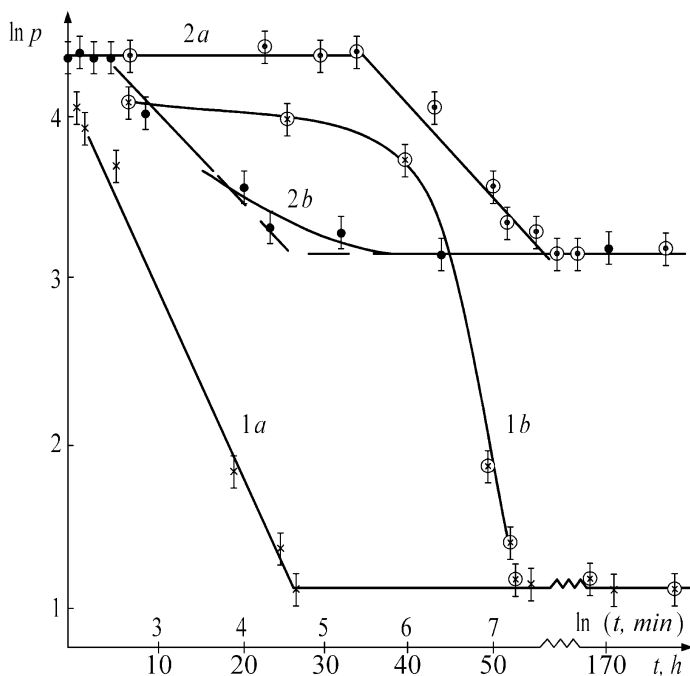


Рисунок 2.15 — Интерполяция экспериментальных данных зависимостями (2.74), (2.76) в осях $\ln p - t$ (a), $\ln p - \ln t$ (b): 1 — отожженный образец; 2 — деформированный

Для сравнения экспериментальных данных с теоретическими удобно использовать масштабы $\ln p - t$, $\ln |\ln p| - \ln t$, $\ln p - \ln t$ и $\ln p - \ln \ln t$, в которых зависимости (2.74) — (2.77) представляются прямыми линиями. Данные, приведенные на рис. 2.15, показывают, что для отожженного образца в первые 25 ч процесс дегазации описывается дебаевской зависимостью (2.74). Последующее усложнение дефектной структуры приводит к стабилизации β -фазы. Для деформированного образца выбор зависимости $p(t)$ не столь однозначен, поскольку и дебаевский, и степенной законы удовлетворительно аппроксимируют экспериментальные данные. Однако, учитывая, что исходное содержание дефектов в деформированном образце выше, чем в отожженном, принимаем степенную зависимость (2.76). При этом в первые 5 ч, отвечающие установлению иерархической связи, содер-

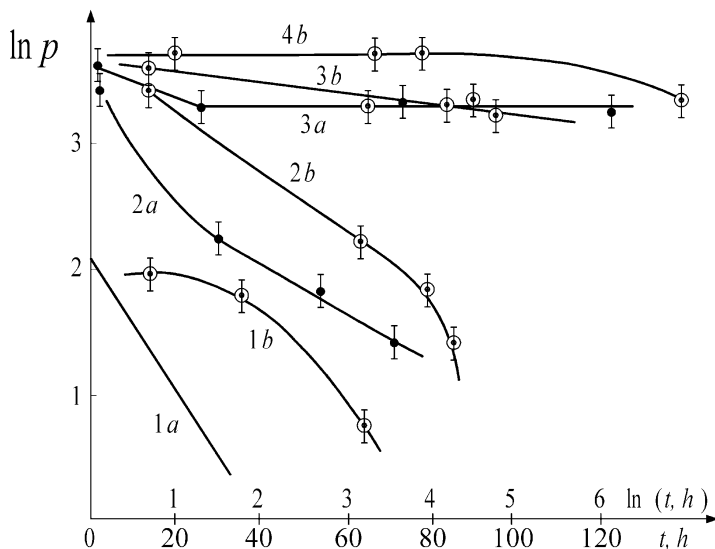


Рисунок 2.16 — Интерполяция экспериментальных данных для образца, подвергнутого циклической обработке, зависимостями (2.74), (2.76) в осях $\ln p - t$ (a), $\ln p - \ln t$ (b). Цифры указывают номера циклов

жание β -фазы остается постоянным, а выход на замедление после 45 ч выдержки предшествует переходу в логарифмический режим (2.77).

Рассмотрим результаты, полученные для отожженного образца при циклировании процесса *насыщение — дегазация* (рис. 2.16). Первый цикл представляется простейшей зависимостью (2.74). В течение 2-го цикла сделать выбор между дебаевской и степенной зависимостями не представляется возможным. Для 3-го цикла наиболее предпочтительной будет степенная зависимость (2.76), однако загиб прямой на 4-м цикле показывает, что при $t \sim 10^3$ ч процесс дегазации переходит в быструющую стадию. Это означает развал иерархической структуры дефектов, переводящий систему в дебаевский режим $p \sim \exp(-t/t_M)$ со временем релаксации t_M , определенным таблицей 2.2.

Приведенные данные показывают, что кинетика $\beta \rightarrow \alpha$ превращения определяется запасом упругой энергии, обусловленной превращением, и типом дефектной структуры, возникающей в ходе процесса. Насыщение приводит к существенному изменению этой структуры, которое задает как

прямое $\alpha \rightarrow \beta$ превращение, так и кинетику обратного $\beta \rightarrow \alpha$ процесса. Иными словами, в сильнонеравновесном состоянии дефектная структура и $\beta \rightarrow \alpha$ превращение проявляют самосогласованное поведение, на котором существенным образом сказывается начальное состояние системы. В результате дефекты могут выстраиваться в иерархически соподчиненные структуры, наличие которых приводит к критическому замедлению процесса дегазации.

Однако нельзя исключить, что при циклировании процесса *насыщение — дегазация* указанное поведение является артефактом процедуры циклирования и не имеет отношения к критическому поведению дефектов. Для выяснения ситуации исследовалось влияние продолжительности наводороживания на закон дегазации $p(t)$ [137]. Во избежание неконтролируемого нарастания плотности дефектов величина тока снижалась от 40 мА/см² до 2.5 мА/см². Из данных, приведенных на рис. 2.17, видно, что дебаевская зависимость $p(t)$ реализуется при временах насыщения $t_s = 15$ мин, а с ростом величины t_s до 70 мин она существенно усложняется. В частности, оказалось, что в рамках кусочно—дебаевской аппроксимации время релаксации на каждом последующем участке уменьшается по сравнению с предыдущим.

Такое поведение объясняется зависимостью (2.74) времени релаксации от вкладов E_d , E_e дефектной структуры и упругой энергии в характерное значение U потенциального рельефа. Действительно, из рис. 2.18 видно, что микродеформация ε претерпевает значительные изменения только на первой стадии дегазации при достаточно длительном наводороживании ($t_s > 15$ мин). Следовательно, в интервале $5 \cdot 10^2 \text{ ч} < t < 10^4 \text{ ч}$ энергия дефектной структуры $E_d \propto \varepsilon^2$ изменяется незначительно и не может сказываться на времени релаксации τ . В результате основное влияние оказывает упругая энергия E_{ep} гетерофазной смеси α - и β -фаз, пропорциональная объемной доле β -фазы. Поскольку величина $p(t)$ спадает в процессе дегазации, то время релаксации $\tau \propto \exp(E_{ep}/T)$ уменьшается в соответствии с данными, приведенными на рис. 2.17 для времен насыщения $t_s = 30$ мин и 50 мин.

С ростом продолжительности насыщения до $t_s = 70$ мин зависимость $p(t)$ становится настолько полой, что не может быть представлена конечным набором дебаевских экспонент. Очевидно, это обусловлено столь значительным нарастанием плотности дефектов, что становятся существенными эффекты иерархического соподчинения, приводящие к бесконечному набору времен релаксации, наличие которого критически замедляет процесс дегазации [126]. Однако степенное и логарифмическое поведения

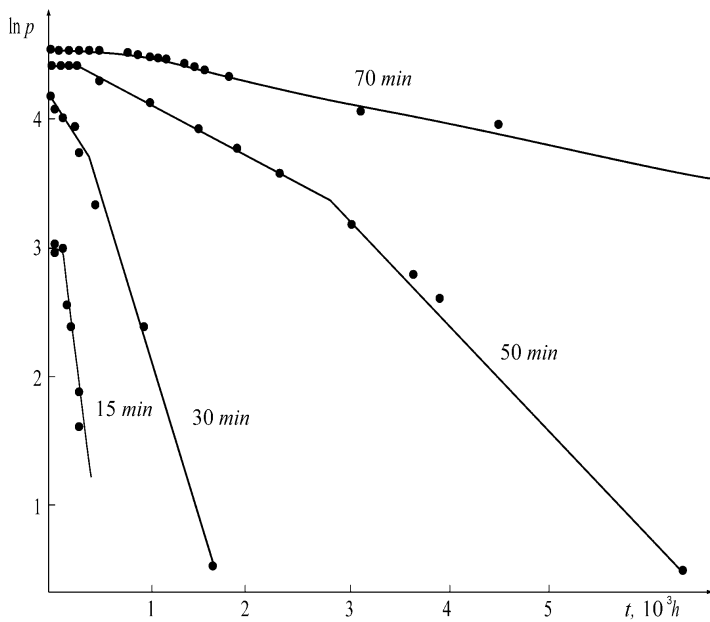


Рисунок 2.17 — Зависимость объемной доли β -фазы от времени дегазации при различных временах насыщения (указаны цифрами у кривых)

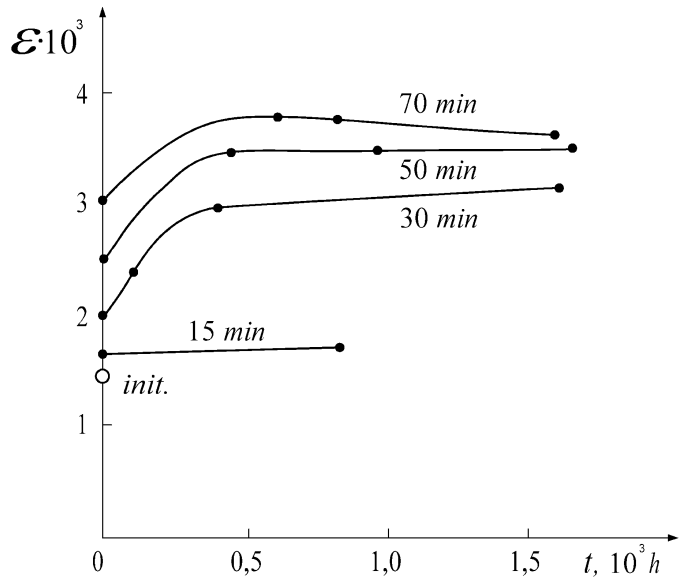


Рисунок 2.18 — Зависимость микродеформации от времени дегазации при различных временах насыщения (указаны цифрами у кривых)

(2.76), (2.77) реализуются при образовании больших иерархических комплексов. На начальной стадии следует ожидать, что эти комплексы не столь значительны и замедление процесса дегазации будет минимально выраженным. В результате закон дегазации принимает вид растянутой экспоненты Колерауша (2.75), поведение которой определяется показателем $\beta < 1$. Обработка данных рис. 2.17 методом наименьших квадратов показывает, что величина β спадает с ростом времени наводороживания таким образом, что значение $\beta < 1$, означающее формирование иерархической структуры, достигается только для $t_s = 70$ мин. При столь длительном наводороживании $\beta \rightarrow \alpha$ превращение обеспечивает критическую плотность дефектов, требуемую для образования следующего структурного уровня.

Следует иметь в виду, что в системе Pd–H дефекты образуются в основном в α -фазе [126]. Поэтому изменение микродеформации ε в процессе насыщения и дегазации, показанное на рис. 2.18, во многом определяется кинетикой роста α -фазы. Из рис. 2.18 видно, что при кратковременном насыщении $t_s = 15$ мин объемная доля $1 - p$ этой фазы настолько велика, что рост ее содержания не сказывается на процессе дегазации, а дефектная структура остается неизменной. При увеличении длительности насыщения до $t_s \geq 30$ мин появляется начальный участок роста микродеформации $\varepsilon(t)$, связанный с увеличением объема α -фазы. Для выдержки $t > 500$ ч дальнейшее изменение микродеформации зависит от времени t_s : при $t_s = 30$ мин величина ε незначительно нарастает, при $t_s = 50$ мин она постоянна, а при $t_s = 70$ мин слабо спадает. Можно полагать, что такое поведение определяется характером эволюции дефектной структуры α -фазы. Действительно, при $t_s = 30$ мин, когда плотность дефектов не достигла предельного значения, выдержка приводит к слабому росту их содержания и микродеформации ε . При $t_s = 50$ мин достигается плотность, близкая к критической, и величина $\varepsilon(t)$ практически не изменяется в интервале дегазации $5 \cdot 10^2$ ч $< t < 7 \cdot 10^3$ ч. И наконец, при насыщении $t_s = 70$ мин достигается закритическая плотность дефектов. Кроме указанного выше значения $\beta < 1$, в законе дегазации (2.75) на это указывает слабое спадание микродеформации $\varepsilon(t)$ в результате объединения хаотических дефектов в иерархические комплексы, что понижает их плотность, а следовательно, и величину ε [126].

2.7 Проявление неравновесности в поведении мартенситной макроструктуры

Мартенситные превращения существенно отличаются (нередко при той же кристаллографии фаз) от высокотемпературных полиморфных превращений [87, 138]. Последние, как известно, осуществляются поатомным термомфлюктуационным переносом через межфазную границу. Данный механизм хорошо укладывается в рамки представлений о стохастическом процессе эргодической системы. Что касается мартенситного превращения, то его течение определяется двумя типами процессов. С одной стороны, это — элементарные акты кооперативного, *цепного* перемещения когерентной мартенситной границы, формирующие микроструктуру мартенсита и протекающие со скоростью порядка звуковой (они описаны в разделе 2.2). С другой стороны, вследствие неизбежного накопления упругой энергии и образования кристаллографических дефектов и доменного строения кристаллов новой фазы формируется специфическая мартенситная макроструктура. Времена релаксации этой макроструктуры могут принимать геологический масштаб (во всяком случае, значительно превышают время наблюдения). Характерное сочетание больших скоростей образования указанных структур с исчезающе малым (в обычных масштабах времени) производством энтропии обуславливает их стационарную природу, а следовательно, и долгоживучесть. Такая система существенно неравновесна и неэргодична, поскольку заморожена в некоторой конфигурации (или в ограниченной области конфигурационного пространства) [139].

При изменении температуры или нагрузки система проходит в процессе мартенситного превращения через дискретный (но очень плотный) ряд стационарных состояний. Экспериментальные данные [140] — [165] показывают, что такой процесс не может быть отнесен ни к стохастическому, ни к динамическому в чистом их проявлении (см. [75], [88], [166] — [170]). С другой стороны, присущие мартенситному превращению эффект памяти формы и особенности поведения макроструктуры указывают на неэргодический характер системы и иерархическую соподчиненность в её эволюции. Данные аспекты — соотношение динамического и стохастического в процессе мартенситного превращения, неэргодичность и иерархичность системы — имеют принципиальное значение, однако пока в полной мере не изучены. Как показывает пример спиновых стекол [81], их разрешение требует использования специальных подходов к теоретическому описанию, которому должно предшествовать определенное переосмысление известных экспериментальных фактов [139] и постановка специальных экспериментов.

Проведенный ниже анализ показывает, что исходной причиной указанной двойственности поведения мартенситной структуры является ее неравновесность. В свою очередь, неэргодичность процесса мартенситного превращения обусловлена иерархическим соподчинением деталей мартенситной макроструктуры, отвечающих различным ее уровням. Закрытое описание такого рода неравновесных процессов достигается использованием неэргодической теории [81] — [83], [96], [139]. На ее основе удастся единым образом представить микроскопические и макроскопические детали мартенситного превращения (сочетание взрывной кинетики роста микроструктуры при практически полной замороженности макроструктуры, температурную зависимость дефекта модуля макроструктуры, особенности поведения макродеформации при изменении внешних условий и т. д.).

2.7.1 Обзор экспериментальных данных

В первых работах [140, 141] по исследованию термоупругих мартенситных превращений и позже [142] — [146] особое внимание привлекли экспериментальные факты, которые свидетельствуют о проявлениях детерминированности процесса в сравнении с высокотемпературными полиморфными превращениями. Здесь можно выделить следующие положения:

- Обратимость перестройки грубого поверхностного рельефа мартенсита — при обратном превращении мартенситные кристаллы сокращаются и исчезают в последовательности, обратной той, в которой они зарождаются и растут при прямом превращении [141, 142].
- Наблюдается (правда, не всегда) *микроструктурная* память: при повторных циклах превращения в ходе охлаждения воспроизводится поверхностный мартенситный рельеф — морфология мартенсита (форма, размеры и расположение мартенситных кристаллов). В одних случаях для этого требуется предварительная *нацикловка* материала, в других — достаточно одного предварительного цикла превращения. Это свидетельствует о гетерогенном характере зарождения мартенсита на дефектах, созданных в ходе нацикловки, и унаследованных высокотемпературной фазой после ее завершения. *Микроструктурная* память исчезает после нагрева до достаточно высокой температуры, обеспечивающей разрушение субструктуры дефектов [142] — [145].

- Известны эффекты памяти формы, для реализации которых требуется не только обратимость превращения в целом, но и движение точно назад каждого атома при обратном превращении [146].

Эти факты бесспорно исключают классическую стохастичность мартенситного превращения. Действительно, при их абсолютизации термоупругое мартенситное превращение выступает как однозначно детерминированный, чисто динамический процесс, для которого в конфигурационном пространстве существует единственный путь.

Имеются, однако, экспериментальные факты, отвергающие такую чрезмерно идеализированную картину [147] — [158]. Это прежде всего наличие петли гистерезиса. Следуя [147], будем различать два класса мартенситных превращений (рис. 2.19): первый, реализующийся в системах типа NiTi, обладает широкой петлей, характеризуемой соотношением $A_s > M_s$ между точками начала обратного и прямого мартенситного превращения; второму классу отвечает узкая вытянутая петля, наблюдающаяся, например, в Cu — Zn (здесь $A_s < M_s$). Следует отметить, что класс мартенситного превращения не является признаком данной системы: так, в Ti — 40%Ni — 10%Cu сначала структура B2 переходит в B19 и реализуется первый класс, а на следующей стадии $B19 \rightarrow B19''$ — второй [148, 149]. Существенно, что здесь петля мартенситного превращения первого класса имеет малую ширину $\Delta = A_s - M_s$ и практически прямоугольна.

Само по себе наличие петли гистерезиса не противоречит допущению о единственности конфигурационного пути мартенситного превращения, поскольку гистерезис должен возникать уже из-за локального перегрева (переохлаждения) окрестности межфазной границы вследствие выделения (поглощения) теплоты превращения. Однако детерминированности конфигурационного пути мартенситного превращения противоречат данные об изменении петли гистерезиса при смене режима циклирования [150] — [152]. На рис. 2.19 показана эволюция изменения вида этой петли для указанных выше классов мартенситных превращений при неполном циклировании. Если бы петля $A_f M_s M_f A_s A_f$ была связана лишь с диссипацией энергии превращения, то переход от охлаждения к нагреву через точку a привел бы систему в конечное состояние A_f через промежуточную точку a' , лежащую на полной петле (соответственно охлаждение после неполного нагрева до точки b отвечало бы траектории $bb' M_f$). В действительности, как при полном, так и неполном циклировании отклонение от горизонтальных участков петли происходит при температуре M_s в случае охлаждения, и в точке A_s — при нагреве. Поэтому если циклирование выполняется неполностью — и в прямом, и в обратном направлениях, — то отвечающая ему

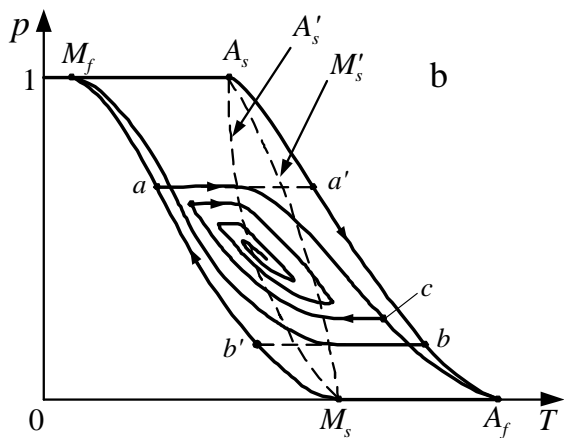
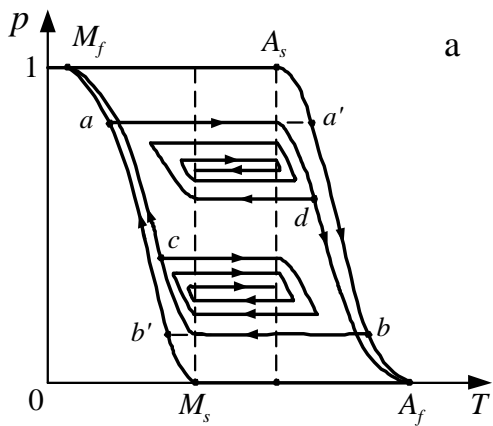


Рисунок 2.19 — Схема неполного циклирования при мартенситном превращении первого (а) и второго (б) классов

петля гистерезиса будет целиком помещаться внутри полной петли, не касаясь ее ни в одной точке. Постепенно уменьшая предельные температуры циклирования, отвечающие точкам c , d , можно стянуть петлю до минимального размера, как это показано на рис. 2.19. При этом ситуация существенно зависит от класса мартенситного превращения.

Для первого класса ($A_s > M_s$) минимальная петля вырождается в горизонтальную линию, концы которой образуют (при разных объемных долях мартенсита p) внутреннюю петлю, имеющую форму, близкую к прямоугольнику со сторонами M_s , A_s . Эта линия отвечает переохлаждению (или перегреву) локальной области вблизи межфазной границы при переходе от обратного превращения к прямому (и наоборот). Ширина внутренней петли $\Delta = A_s - M_s$ определяется теплотой превращения q , температуропроводностью χ и характерным размером l неоднородности структуры: $\Delta \sim q(vl/\chi)$, v — характерное значение скорости межфазной границы. Большое значение $\Delta \approx 40$ К в NiTi обусловлено значительной теплотой превращения $q = 370$ кал/моль и малой температуропроводностью $\chi \approx 0.04$ см²/с [153]; напротив, малое значение $\Delta \approx 10$ К в Cu — Zn связано с уменьшением теплоты превращения до $q = 75$ кал/моль и ростом температуропроводности до $\chi \approx 0.2$ см²/с [154].

Если существование внутренней петли гистерезиса связано с локальным перегревом—переохлаждением, то наличие *крыльев* обусловлено перестройкой макроструктуры при изменении внешних условий. Действительно, в системе Ti — 40%Ni — 10%Cu, где кинетика прямого мартенситного превращения обеспечивается микровзрывным ростом постепенно зарождающихся мартенситных кристаллов, петля гистерезиса почти прямоугольна (нет крыльев) [155]. Автокаталитический характер кинетики подтверждается здесь фактом минимального накопления микродеформации и микронапряжений под нагрузкой [156]. Напротив, в NiTi значительной ширине крыльев ~ 30 К отвечает постепенный рост кристаллов мартенсита, зародившихся в самом начале процесса [155].

В системах с мартенситным превращением второго класса также можно выделить внутреннюю петлю гистерезиса, но в отличие от рассмотренной прямоугольной она имеет линзообразный вид и отклонена от вертикали (см. рис. 2.19b). Принципиально важно, что внутренняя петля при мартенситном превращении второго класса *вывернута наизнанку* в сравнении с петлей мартенситного превращения первого класса: если в первом случае $A'_s < M'_s$, то во втором $A_s > M_s$. В соответствии с этим при постепенном уменьшении интервала циклирования процесс приближается к обратимому (идеальная термоупругость), а мартенситная кривая стягивается в точ-

ку (рис. 2.19b). Это свидетельствует о том, что движение единичной межфазной границы не обнаруживает рассеяния энергии превращения. Данный вывод подтверждается малой величиной теплоты превращения в системах Cu – Zn ($g \approx 40$ кал/моль) и Ti – 40%Ni – 10%Cu на второй стадии мартенситного превращения, где реализуется переход B19 → B19' [148]. Это и обуславливает узость полной петли гистерезиса для мартенситного превращения второго класса. Ее вытянутость связана, по-видимому, с неоднородностью исходной мартенситной структуры B19, в которой облегчено зарождение, но затруднен рост мартенситных кристаллов.

В соответствии с представленной множественностью возможных циклов превращения следует предположить наличие множества конфигурационных путей мартенситного превращения. Наиболее ярко это проявляется во взрывной эволюции мартенситной структуры при переходе от неполного циклирования к полному (см. рис. 2.20) [151, 157]. Так, если при понижении температуры от точки A_f (или выше) перейти к её повышению от температуры $M_f < T < M_s$, то неполное циклирование от точки T_a до T_c не изменяет долю мартенсита, а при T_c она скачком возрастает от p_c до p_d . Подобное поведение наблюдается при увеличении температуры, только здесь система эволюционирует по траектории $M_f A_s e f g h A_f$, отвечающей скачкообразному спаданию $p_g \rightarrow p_h$.

Характерно, что указанный *взрыв* проявляется только для некоторых систем с мартенситными превращениями первого класса: так, его наблюдали в Ti – 49.8%Ni и на первой стадии превращения в Ti – 40%Ni – 10%Cu, тогда как в Ti – 51%Ni, где также $A_s > M_s$, он не обнаруживается. Этот факт можно было бы связать с отсутствием в последней системе склонности к фазовому наклепу, однако она слабо проявляется и в сплаве Ti – 40%Ni – 10%Cu [155]. Причина отсутствия *взрыва* в Ti – 51%Ni состоит, по-видимому, в том, что здесь мартенситная фаза B19' образуется из фазы R, тогда как во *взрывных* сплавах Ti – 49.8%Ni, Ti – 40%Ni – 10%Cu имеем соответственно B2 → B19', B2 → B19. Податливость R-структуры к переориентации доменов под действием напряжений, возникающих при циклировании [158], препятствует удержанию системы на горизонтальных участках *ac* и *eg*.

Важное значение для понимания механизма формирования макроструктуры мартенсита имеют данные по акустической эмиссии [159] — [165], которые несут информацию об элементарных актах перестройки этой макроструктуры (см. подраздел 2.7.3). При мартенситном превращении в сплавах с микровзрывной кинетикой и малой склонностью к фазовому наклепу (например, B2 → B19 в $Ti_{0.5}Ni_{0.5-x}Cu_x$, $0.09 \leq x \leq 0.11$) параметры

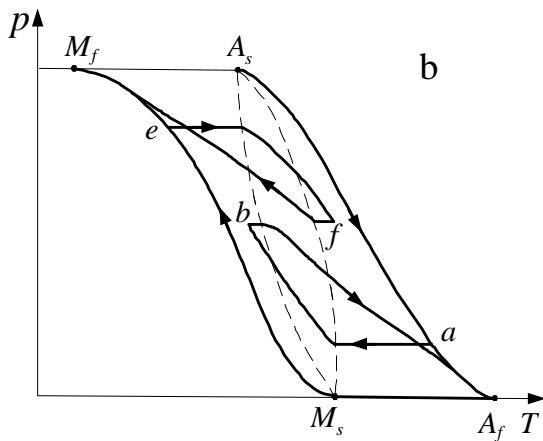
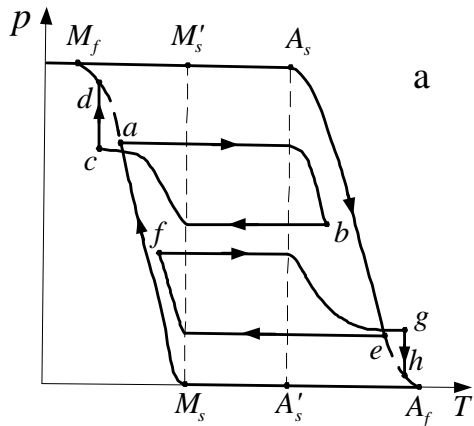


Рисунок 2.20 — Схема взрывного мартенситного превращения первого (а) и второго (б) классов при переходе от неполного циклирования к полному

акустической эмиссии при прямом и обратном мартенситном превращении имеют одинаковый порядок и слабо снижаются при повторных циклах. В системах с кинетикой медленного роста, не склонных к фазовому наклепу ($\text{Ti}_{0.49}\text{Ni}_{0.51}$, а также $\text{Au} - \text{Cd}$ [160, 161]), уровень эмиссии при обратном мартенситном превращении намного выше, чем при прямом и не меняется при циклировании. При медленной кинетике и большой склонности к фазовому наклепу ($\text{Ti}_{0.502}\text{Ni}_{0.498}$) эмиссия наблюдается только при прямом мартенситном превращении и снижается в ходе циклирования. В сплавах $\text{Ti}_{0.5-x}\text{Ni}_{0.5+x}$, $0.003 \leq x \leq 0.01$ на первом цикле мартенситного превращения параметры эмиссии снижаются при прямом превращении, а при обратном возрастают на 2–3 порядка. При прямом превращении во всех сплавах циклирование уменьшает уровень эмиссии до величин одинакового порядка, а при обратном повышает его.

2.7.2 Термодинамическое описание мартенситных состояний

Приведенные данные показывают, что мартенситная структура образуется в результате ряда последовательных скачкообразных преобразований микроструктуры, описание которых требует привлечения методов неравновесной термодинамики [75], [88], [166] (см. также раздел 2.2). Однако хорошо известно, что использование стандартных методов термодинамики позволяет простейшим образом объяснить многие закономерности мартенситного превращения [167]. Поэтому прежде чем приступить к изложению подхода [139], претендующего на представление эволюции мартенситной структуры во всей ее сложности, приведем краткий обзор основных этапов термодинамического описания мартенситного превращения.

Теория Ландау

Здесь мартенситное превращение рассматривается как фазовый переход первого рода [168], в результате которого образуется макроскопически однородная, монокристаллическая, однодоменная и неискаженная фаза. При этом состояние системы характеризуется удельным термодинамическим потенциалом $\varphi_0 = \varphi_0(T, P; \epsilon)$, являющимся функцией температуры T , давления P (в общем случае вместо P следует использовать тензор напряжений σ_{ij}) и внутреннего параметра — собственной деформации мартенситного превращения ϵ [168]. Если величины T, P представляют независимые параметры состояния, то равновесное значение $\epsilon_0 = \epsilon_0(T, P)$ параметра мартенситно-

го превращения ϵ фиксируется условием равновесия $\partial\varphi_0/\partial\epsilon|_{T,P} = 0$, причем для его устойчивости требуется $\partial^2\varphi_0/\partial\epsilon^2|_{T,P} > 0$ [12]. Данный подход позволяет представить характерную черту мартенситного превращения — сосуществование фаз. В этом случае неоднородность системы, характеризуемая координатной зависимостью $\epsilon_0(\mathbf{r})$, определяется средним по объему кристалла $|\overline{\epsilon_0(\mathbf{r})}|^2$, которое, очевидно, сводится к объемной доле мартенситной фазы p . В макроскопическом приближении средний термодинамический потенциал неоднородной системы $\overline{\varphi_0} = \overline{\varphi_0(T, P, \epsilon_0(\mathbf{r}))}$ имеет вид

$$\overline{\varphi_0}(p, \epsilon_0) = p\varphi_0^M(\epsilon_0) + (1 - p)\varphi_0^A, \quad (2.78)$$

где $\varphi_0^{M,A}$ — термодинамический потенциал изолированных мартенситной и аустенитной фаз. Поскольку в рамках данного приближения $\varphi_0^{M,A}$ независимы от p , то условие экстремума $\partial\overline{\varphi_0}/\partial p|_{T,P} = 0$ сводится к тривиальному условию равновесия фаз $\varphi_0^A(T, P) = \varphi_0^M(T, P, \epsilon_0)$, не фиксирующему равновесное значение p .

В последнее время осознано, что мартенситное превращение представляет не термодинамический, а кинетический переход системы *атомы + фононы* вдали от равновесия [90], [91]. При всей принципиальной важности такого заключения оказывается (см. раздел 2.2), что оно оставляет неизменной формальную сторону изложенной картины, с той лишь разницей, что под термодинамическим потенциалом φ_0 надо понимать синергетический потенциал, а ϵ означает параметр кинетического мартенситного превращения, а не термодинамический параметр Ландау.

Термодинамический учет дальнедействующих полей и структурных неоднородностей

Мартенситное превращение всегда связано со значительными деформациями и, как правило, осуществляется в неоднородной многофазной системе, обладающей различными дефектами структуры. Поэтому в ходе превращения возникают упругие дальнедействующие поля, существенно влияющие на его термодинамику. Для их учета к *химической* составляющей термодинамического потенциала φ_0 , использованной в предыдущем подразделе, следует добавить обусловленную дальнедействующими полями *нехимическую* добавку φ_1 в полный термодинамический потенциал $\varphi = \varphi_0 + \varphi_1$ [147]. Это позволяет получить замкнутое описание неоднородного мартенситного состояния на основе макроскопического приближения, ограничивающегося представлением структуры с помощью единственного внутреннего параметра p . В результате средний термодинамический потенци-

ал $\bar{\varphi} = \bar{\varphi}(T, P, p, \epsilon_0)$ можно представить тем же равенством (2.78), что и в отсутствие упругого поля, однако к независимым от p химическим составляющим $\varphi_0^{M,A}$ добавляются обусловленные дальнедействием *нехимические* вклады $\varphi_1^{M,A}$, существенно зависящие от p . В этой связи условие фазового равновесия $\varphi^M(T, P, \epsilon_0, p) = \varphi^A(T, P, p)$ выполняется не на отдельной линии плоскости $T - P$, а в области, границы которой определяются условиями $0 \leq p_0(T, P) \leq 1$ для равновесного значения p_0 . Характерно, что в условие устойчивости $\partial^2 \varphi / \partial p^2|_{T,P} = \partial^2 \varphi_1 / \partial p^2|_{T,P} > 0$ входит только *нехимическая* составляющая термодинамического потенциала φ_1 , поскольку *химическая* φ_0 зависит от p линейно. По существу, такой подход использовался впервые Курдюмовым при исследовании термоупругого равновесия [141].

Квазиравновесное описание мартенситных состояний

Согласно Курдюмову [87, 138] принципиально важной особенностью мартенситного превращения является его незавершенность в температурном интервале, отвечающем равновесию фаз. Такая незавершенность свидетельствует об остаточном изменении внутреннего состояния аустенитной и мартенситной фаз, которое связано с формированием макроструктуры. Как правило, мартенситному превращению присуща атермическая кинетика [169], позволяющая сопоставить каждой мартенситной макроструктуре, отвечающей заданным T, P , квазиравновесное состояние [89]. Возможность указанного представления мартенситных структур, которые, строго говоря, неравновесны, обусловлена исчезающе малым производством энтропии в обычных условиях (геологическим масштабом времен релаксации макроструктуры мартенсита). Неравновесность мартенситных состояний проявляется в том, что они определяются не только заданием параметров среды T, P , но и режимом эксперимента и предысторией системы.

Скачкообразная перестройка макроструктуры при плавном изменении T, P означает, что в квазиравновесном состоянии система удерживается силами типа сухого трения. Переход между состояниями сопровождается диссипацией энергии, которая связана не только с рассеянием теплоты превращения, но и с перестройкой макроструктуры.

Простейшим образом указанные особенности можно представить, используя единственный внутренний параметр p [89]. С этой целью введем термодинамическую движущую силу

$$g \equiv - \left(\frac{\partial \varphi}{\partial p} \right)_{T,P} = g_0(T, P) + g_1(T, P, p), \quad g_0 = \varphi_0^A - \varphi_0^M. \quad (2.79)$$

Здесь учтено, что полный термодинамический потенциал φ представляется суммой *химической* составляющей φ_0 , линейно зависимой от p , и *нехимического* вклада φ_1 , нелинейность которого обуславливает зависимость от p соответствующей составляющей g_1 движущей силы. Условие квазистационарного равновесия $g(T, P; p) = 0$, задающее объемную долю мартенсита $p_0 = p_0(T, P)$, представим в виде

$$g_0(T, P) = -g_1(T, P; p), \quad (2.80)$$

удобном для графического анализа. Если зависимость $-g_1(p)$ не имеет неустойчивых участков, характеризуемых условием $-\partial g_1/\partial p = \partial^2 \varphi/\partial p^2 < 0$, то решение уравнения (2.80) при разных температурах дается набором точек пересечения горизонтальных прямых, отвечающих постоянным $g_0(T)$, с монотонно возрастающей зависимостью $-g_1(p)$ (см. рис. 2.21). В результате для равновесной доли мартенсита получается температурная зависимость $p_0(T)$, характеризуемая скоростью спадания

$$\frac{dp_0}{dT} = - \left(\frac{\partial s/\partial p}{\partial g_1/\partial p} \right)_{p=p_0}. \quad (2.81)$$

Ее выражение получается дифференцированием тождества $g(T, p_0(T)) = 0$ с учетом равенства (2.79) и определения удельной энтропии s . Из рис. 2.21 видно, что всегда выполняется условие $-\partial g_1/\partial p_0 > -(\partial g_1/\partial p)_{p=p_0}$. Оно вытекает из соотношения

$$\frac{\partial g_1}{\partial p_0} = \left(\frac{\partial s_0/\partial p}{\partial s/\partial p} \frac{\partial g_1}{\partial p} \right)_{p=p_0}, \quad (2.82)$$

получаемого дифференцированием зависимости $g_1(T(p_0), p_0)$ с использованием равенства (2.81). Указанное неравенство обусловлено отличием от нуля производной $(\partial s_1/\partial p)_{p=p_0}$ для *нехимической* энтропии $s_1 = s - s_0$, являющейся мерой беспорядка в формировании макроструктуры мартенсита. На рис. 2.21 это отражается несовпадением кривых $-g_1(p)$, отвечающих разным температурам, с линией $-g_1(p_0)$ квазиравновесных состояний.

Выше представлена простейшая ситуация монотонной зависимости $-g(p)$. Проявление взрывного характера мартенситного превращения указывает на наличие неустойчивых участков, где $-\partial g_1/\partial p < 0$. Как видно из рис. 2.22, в этом случае понижение температуры до значения T_1 приводит к скачкообразному росту p по траектории acf , сопровождаемому диссипацией энергии, величина которой определяется площадью сегмента cdf . Характерно, что на луче cf условие равновесия (2.80) не выполняется. Его

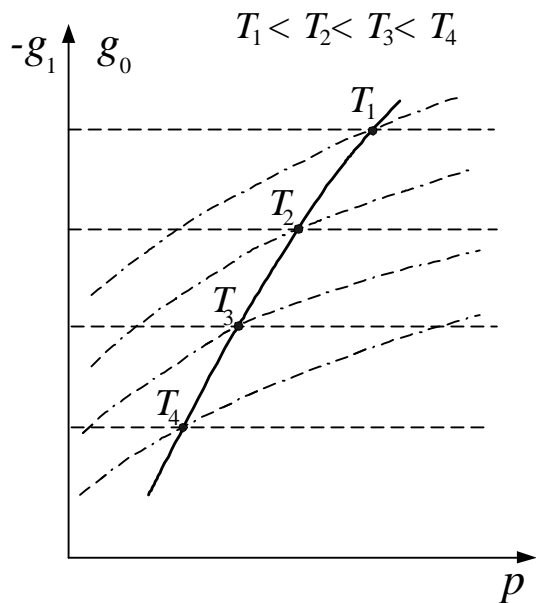


Рисунок 2.21 — Зависимость от объемной доли мартенсита *химической* g_0 (штриховая) и обратной *нехимической* $-g_1$ (штрихпунктирная) составляющих движущей силы при разных температурах. Точки пересечения (сплошная) дают зависимость $-g_1(p_0)$ от равновесной величины $p_0(T)$

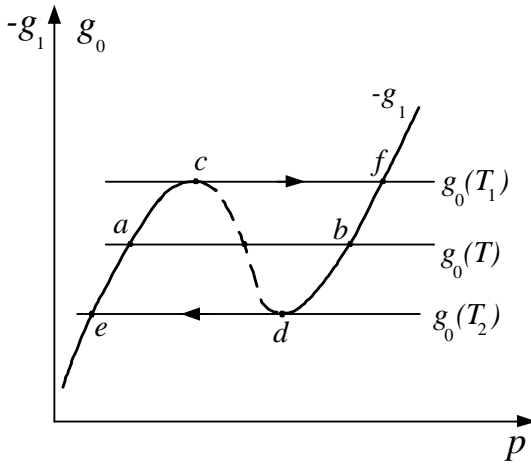


Рисунок 2.22 — Зависимость химической g_0 и нехимической g_1 движущих сил от объемной доли мартенсита p

можно формально восстановить, вводя диссипативную силу g_d :

$$g_0(T, P) + g_1(T, P; p) = g_d(T, P; p). \quad (2.83)$$

Строго говоря, g_d представляет релаксируемую в результате диссипации составляющую нехимической движущей силы, которая изменяется за микроскопическое время $\tau \sim l/c$ (l — размер неоднородности, c — скорость звука). В макроскопическом приближении, отвечающем временам $t \gg \tau$, величину g_d можно считать независимой от времени, определяя ее обычным соотношением $g_d = T_1(\delta s/\delta p)$ через производную энтропии δs . Графически диссипативная сила представляется вертикальным отрезком, заключенным между лучом cf и кривой cdf (см. рис. 2.22). Условие (2.83) принимает наглядную форму, если под g_0 понимать активную (внешнюю) силу, под g_1 — упругую силу реакции и под g_d — силу сухого трения.

Как видно из рис. 2.22, даже при наличии однозначной зависимости $-g_1(p)$ наличие неустойчивого участка приводит к необратимости мартенситного превращения. Действительно, при понижении температуры до T_1 прямое мартенситное превращение протекает по траектории acf , а обратное — при ее повышении до T_2 — по bde . На рис. 2.22 изображен элементарный участок зависимости $-g_1(p)$, содержащий лишь один провал,

отвечающий неустойчивости системы. В действительности на полной оси значений $0 \leq p \leq 1$ таких участков, каждый из которых отвечает элементарному акту перестройки макроструктуры, может быть сколь угодно много. Поэтому для развитой макроструктуры немонотонности зависимости $g_1(p)$ образуют практически сплошной ряд, и в рамках макроскопического приближения сила $g_1(p)$ представляется не линией, а полосой, огибающими которой являются траектории прямого и обратного мартенситного превращения. Именно этими огибающими представляется кривая петли гистерезиса, перестроенная в осях $p - T$. Принципиально важно, что каждая ветвь этой петли имеет тонкую структуру, отвечающую набору локальных участков устойчивого квазиравновесного состояния, переходы между которыми осуществляются посредством цепи взрывных перестроек деталей макроструктуры [167].

Для выяснения их природы рассмотрим изменение вида зависимости $g_1(p)$ при понижении температуры. С этой целью вместо единственного внутреннего параметра p следует ввести их набор p_1, \dots, p_n . Макроскопическое приближение отвечает переходу от полной зависимости $g_1(p_1, \dots, p_n)$ к эффективному представлению $g_1(p)$. Оно достигается проектированием особенностей этой зависимости в n -мерном пространстве на ось $p_1 \equiv p$ (строго говоря, при этом параметр p приобретает смысл не истинной доли мартенсита, а ее эффективного значения). Откладывая дальнейшее выяснение деталей такого перехода до подраздела 2.7.3, остановимся на изменениях, к которым он приводит в макроскопическом представлении.

Поскольку при заданной температуре каждый элемент макроструктуры отвечает внутреннему параметру p_i , $i = 1, \dots, l$, $l \leq n$, значение которого определяется пересечением линий $g_0(T)$ и $-g_1(T, p)$, то при заданной температуре T_l неединственность значений p_i требует, чтобы зависимость $-g_1(p)$ обладала развитой немонотонностью типа показанной на рис. 2.23. Это означает, что с изменением температуры вместо одной линии равновесия $p_0(T)$ (см. рис. 2.21) реализуется их набор $p_i(T)$. Его графическое представление дается деревом, изображенным на рис. 2.23 сплошной линией. Точки этого дерева отвечают элементам макроструктуры, реализующимся при изменении внешних условий, а ветви — переходам между ними. В отличие от иерархического дерева в теории спиновых стекол [81], где понижение температуры всегда приводит к дальнейшему ветвлению, в нашем случае после начального разветвления макроструктуры, связанного с зарождением мартенситных монокристаллов, происходит последующее срастание ветвей, означающее коалесценцию этих монокристаллов. Поэтому набор возможных траекторий $p_i(T, P)$ в пространстве состояний представ-

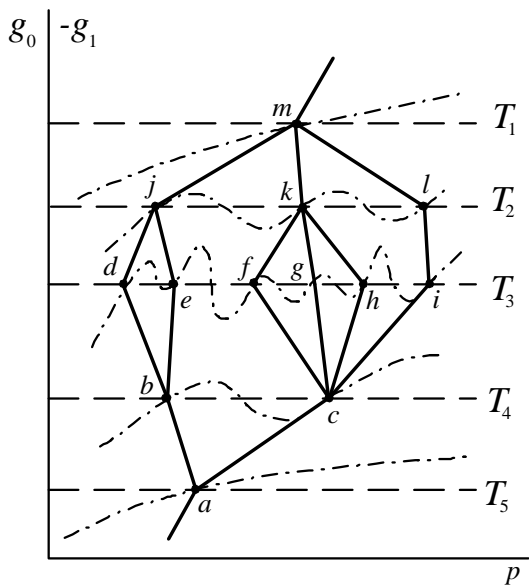


Рисунок 2.23 — Зависимость составляющих движущей силы мартенситного превращения от внутреннего параметра. Точки пересечения отвечают различным элементам макроструктуры

ляет пучок, сжимающийся в точках, отвечающих монокристаллам аустенита и мартенсита, которые занимают весь образец (точки a , m на рис. 2.23). Бифуркация ствола дерева в точке a означает зарождение монокристалла мартенсита, а последующее множественное ветвление в точке c отвечает микровзрыву, представленному на рис. 2.20.

Таким образом, развитая картина позволяет существенно продвинуться в описании мартенситной макроструктуры. Однако эта картина представляется логически незамкнутой и, более того, непоследовательной. Так, внимательное рассмотрение рис. 2.23 показывает, что структура дерева траекторий $p_i(T)$ обусловлена наличием иерархии высот барьеров зависимости $g(p)$. В результате возникает вопрос: чему отвечает такое деление физически? Кроме того, следует выяснить закономерность и следствия перехода от набора внутренних параметров $\{p_i\}$ к единственному p . Поскольку при этом полное описание, определяемое семейством функций $\{g(p_i)\}$, заменяется представлением с помощью единственной функции $g(p)$, то следует ожидать, что система представляется не одним деревом типа изображенного на рис. 2.23, а их множеством. Выяснению вопросов такого типа посвящен следующий раздел, где процесс формирования макроструктуры мартенсита представлен как эволюция системы по набору иерархических деревьев Кейли.

2.7.3 Фрактальная картина формирования мартенситной структуры

Резюмируя развитую картину эволюции мартенситных состояний, следует иметь в виду, что с микроскопической точки зрения мартенситное превращение представляет атермический бездиффузионный процесс, протекающий по механизму перехода первого рода (см. раздел 2.2). Термодинамическое описание мартенситной макроструктуры достигается использованием усредненной по элементарным актам ее перестройки зависимости $\bar{g}_1(p)$, представляющей полосу возможных значений *нехимической* движущей силы в зависимости от объемной доли мартенсита. Огибающие этой полосы определяются дальнедействующим упругим полем, а ее ширина — диссипацией энергии при процессах типа сухого трения.

Указанное макроскопическое приближение позволяет представить адекватным образом отдельные особенности эволюции мартенситной структуры [89]. Однако такой подход носит прагматический характер, поскольку единственный параметр p не может представить все детали макроструктуры. Полную информацию содержит пространственная зависимость $\epsilon(\mathbf{r})$

параметра мартенситного превращения, тогда как объемная доля мартенситной фазы $p = |\epsilon(\mathbf{r})|^2$ представляет момент низшего порядка. Определение полного вида зависимости $\epsilon(\mathbf{r})$, требующее решения вариационной задачи по минимизации функционала $\varphi\{\epsilon(\mathbf{r})\}$, в общем случае не представляется возможным. Поэтому для описания тонких деталей макроструктуры мартенсита следует расширить рамки макроскопического приближения, дополняя объемную долю $p \equiv |\epsilon(\mathbf{r})|^2$ моментами более высоких порядков $|\epsilon(\mathbf{r})|^{2n}$, $n > 1$. Очевидно, использование высших моментов $|\epsilon(\mathbf{r})|^{2n}$ требует детализации вида термодинамического потенциала $\varphi\{\epsilon(\mathbf{r})\}$ (или соответствующей движущей силы $g\{\epsilon(\mathbf{r})\}$) в конфигурационном пространстве квазиравновесных состояний. Действительно, если вдоль оси p , характеризующей наиболее грубые детали структуры мартенсита, зависимость $\varphi(p)$ имеет набор бесконечно большого числа минимумов, отвечающих квазиравновесным мартенситным состояниям низшего порядка, то естественно положить, что и вдоль других осей $|\epsilon(\mathbf{r})|^{2n}$ сохраняется подобная структура минимумов более высоких порядков. Поскольку они представляют более тонкие детали макроструктуры, то являются менее выраженными и накладываются на более глубокие.

Таким образом, можно полагать, что зависимость $\varphi\{\epsilon(\mathbf{r})\}$, стационарные значения которой отвечают различным элементам макроструктуры, имеет фрактальный вид: на глубокие минимумы, соответствующие наиболее грубым деталям, накладываются более мелкие, на последние — еще мельче и т. д. Поскольку эти минимумы соответствуют устойчивым (но не обязательно равновесным) элементам макроструктуры — блокам макрокристаллов мартенситной фазы, самим макрокристаллам, их частям, выделенным кристаллографически, двойникам, дислокациям и т. д., то такое предположение означает иерархическую соподчиненность их поведения в ходе эволюции макроструктуры: перестройка грубых ее деталей обеспечивается соответствующим изменением мелких (например, перемещение мартенситной границы требует коррелированного движения частичных дислокаций превращения [171]). В соответствии с этим эволюция системы требует, чтобы сначала заполнялись самые мелкие минимумы зависимости $\varphi\{\epsilon(\mathbf{r})\}$, затем — более глубокие и т. д. Графически это можно представить, если каждому минимуму зависимости $\varphi\{\epsilon(\mathbf{r})\}$ сопоставить точку в ультраметрическом пространстве. Тогда эволюция макроструктуры отвечает перераспределению по узлам иерархического дерева Кейли (см. рис. 2.23), представляющего геометрический образ ультраметрического пространства. Наиболее густо расположенные узлы дерева связаны с мельчайшими деталями макроструктуры, при движении к стволу переходим к более крупным. Вет-

ви дерева отвечают элементарным актам перестройки макроструктуры, когда согласованное и взаимно обусловленное поведение ее деталей на одном уровне приводит к спонтанной перестройке на более высоком (графически это изображается срастанием нескольких ветвей в один узел дерева).

Поскольку в ходе монотонного понижения температуры исходный монокристалл аустенита сначала приобретает сложную мартенситную макроструктуру, а при наложении внешних напряжений происходит ее огрубление, то ясно, что полный цикл мартенситного превращения не может быть представлен одномерным деревом Кейли. Его размерность должна быть не менее двух: образование сложной макроструктуры мартенсита из монокристалла аустенита отвечает движению от ствола дерева к его ветвям, а огрубление этой структуры до монокристалла мартенсита связано с обратным движением, отвечающим огрублению макроструктуры. Однако обратное движение не должно совершаться по тому же дереву, что и прямое, поскольку указанные процессы развития макроструктуры и ее огрубления необратимы. Поэтому полный цикл мартенситного превращения представляется набором горизонтального и вертикального деревьев Кейли, сопряженных согласно рис. 2.24. Такое сопряжение, дающее геометрический образ двумерного ультраметрического пространства, возможно как для деревьев с одинаковой ветвимостью (рис. 2.24а), так и с разной (рис. 2.24б). В принципе представляется возможной и более сложная ситуация, когда деревья, отвечающие разным осям ультраметрического пространства, имеют нерегулярное ветвление.

Различные узлы двумерного дерева Кейли отвечают возможным элементам макроструктуры мартенсита. Одна из вершин (выберем левую нижнюю A) соответствует монокристаллу аустенита, другая, M — мартенситу. Правый нижний угол, где срастаются корни вертикального и горизонтального деревьев, отвечает наиболее разветвленной макроструктуре. Большое значение показателя ветвимости в каком-либо узле означает образование (или коллапс) большого числа структурных элементов мартенсита. Очевидно, рост ветвимости приводит к укорочению дерева. Продвижение по горизонтальному дереву от точки A к корням отвечает росту объемной доли p мартенсита с высокодисперсной структурой. Такое движение обуславливается в основном понижением температуры. Следовательно, можно сразу заключить, что ступенчатая зависимость $p(T)$, реализуемая при микровзрывной кинетике, описывается укороченным горизонтальным деревом. Движение от корней к вершине M вертикального дерева осуществляется обратными бифуркациями (слиянием ветвей), которые отвечают росту макродеформации ϵ превращения за счет *фазировки* деформаций ϵ_α отдель-

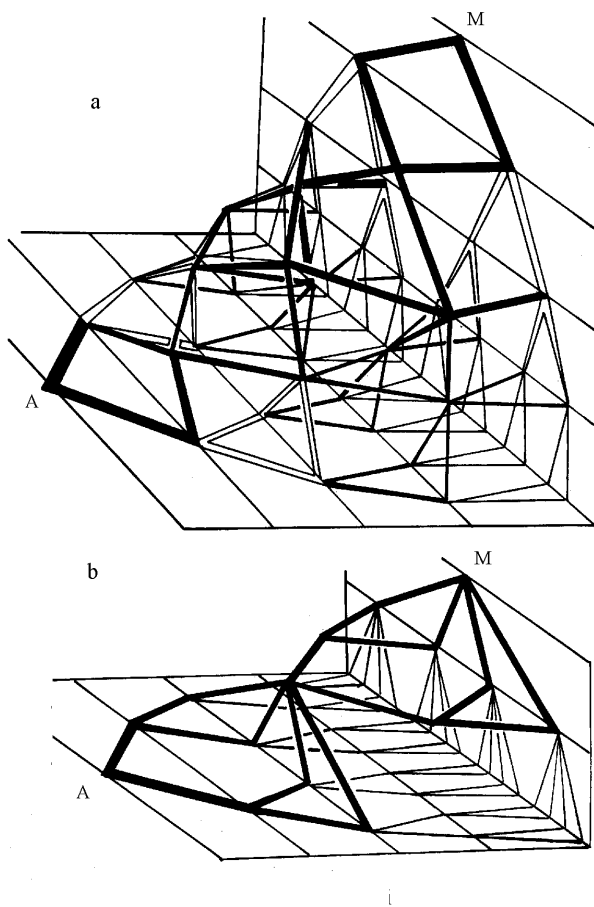


Рисунок 2.24 — Сопряжение ортогональных деревьев Кейли с одинаковой (а) и различной (b) ветвимостями

ных макрокристаллов мартенсита. Вертикальное движение осуществляется наложением поля напряжений σ_{ext} . Следовательно, укороченное вертикальное дерево отвечает быстрому росту макродеформации ϵ с увеличением внешней нагрузки σ_{ext} . Грубые детали макроструктуры представляются внешними узлами деревьев, расположенными у вершин A и M , тонкие — внутренними узлами, близкими к корням в правом нижнем углу. Наиболее быстрая (в смысле малости числа актов эволюции элементов макроструктуры) микровзрывная перестройка аустенита в мартенсит (и наоборот) отвечает наикратчайшим траекториям AM на рис. 2.24. При этом зависимость $p(T)$ имеет вид, характерный для первого класса мартенситного превращения с микровзрывной кинетикой. При детальной проработке макроструктуры в ходе превращения, как это наблюдается при значительной ширине крыльев петли гистерезиса для первого класса мартенситного превращения и всегда — для второго (рис. 2.19), траектория движения существенно захватывает правую нижнюю область на рис.2.24.

Нетрудно видеть, что различным классам мартенситных превращений, представленным в подразделе 2.7.1, отвечают разные типы сопряжения ортогональных деревьев на рис.2.24a,b. Так, сопряжение деревьев с одинаковой ветвимостью отвечает мартенситное превращение второго класса (рис.2.19b). Действительно, как видно из рис.2.24a, происходящие с понижением температуры бифуркации горизонтального дерева, отвечающие зарождению элементов мартенситной структуры, сопровождаются обратными бифуркациями вертикального дерева, означающими рост и слияние этих элементов. Поэтому здесь исключено укорочение обоих деревьев, в связи с чем понижение температуры приводит к плавному росту объемной доли p и макродеформации ϵ , что характерно для мартенситного превращения второго класса. Напротив, при сопряжении деревьев разного типа обусловленные изменением внешних параметров T , σ_{ext} бифуркации одного дерева не всегда сопровождаются обратными бифуркациями другого (рис.2.24b) и зависимости $p(T, \sigma_{ext})$, $\epsilon(T, \sigma_{ext})$ приобретают горизонтальный участок, характерный для мартенситного превращения первого типа (рис.2.19a).

Развитая картина приводит к естественной интерпретации экспериментальных данных, изложенных в подразделе 2.7.1. Так, детерминированные мартенситные превращения отвечают узким пучкам траекторий, соединяющих точки A , M на рис.2.24. Эти пучки имеют вид изогнутых сигар с заострениями на концах A , M , окрестность которых отвечает грубым деталям макроструктуры, а тонким — средняя часть пучка. Поэтому можно сделать вывод, что детерминированность перестройки грубой макроструктуры должна быть выражена в большей степени, чем микроструктурная память.

Это и наблюдается на опыте. Явление фазового наклепа связано с деформацией пучка в ходе циклического изменения внешних параметров.

Стохастизация перестройки мартенситной макроструктуры связана со случайным распределением по пучку возможных траекторий в ультраметрическом пространстве (явления типа фазового наклепа приводят к изменениям функции распределения по этим траекториям). При этом следует иметь в виду, что в процессе мартенситного превращения дерево Кейли не сохраняет жесткий каркас — при циклировании макроструктуры оно может изменять свою структуру. Это изменение связано прежде всего с образованием дефектов в ходе фазового наклепа. Поскольку они препятствуют течению мартенситного превращения, то это означает локальное удлинение горизонтального дерева — в отдельных областях ультраметрического пространства происходит изменение метрики, отвечающее уменьшению ветвистости горизонтального дерева за счет увеличения числа бифуркаций.⁴⁾ При обратном изменении внешних параметров T , σ_{ext} указанная область остается неизменной, но в ходе следующего цикла мартенситного превращения система может эволюционировать по траекториям, не захватывающим ее. В связи с этим при циклировании не будет повторяемости в эволюции макроструктуры до тех пор, пока образование дефектов при фазовом наклепе не приведет к перестройке всего ультраметрического пространства. Только после этого достигается воспроизводимость перестройки макроструктуры в ходе циклирования. Кроме того, в ходе мартенситного превращения может происходить перестройка, связанная с выделением теплоты превращения. Поскольку в соответствии с принципом Ле—Шателье она препятствует течению мартенситного превращения, то это отвечает нелокальному удлинению горизонтального дерева Кейли, характерному для мартенситного превращения первого класса. Именно такие особенности строения ультраметрического пространства ответственны за задержку мартенситного превращения в пределах внутренней петли гистерезиса (см. рис.2.19а). Очевидно, что при неполном термоциклировании в интервале, не приводящем к перестройке макроструктуры, тепловой эффект мартенситного превращения приводит к удлинению горизонтального дерева, превосходящему его величину при полном циклировании. Такое изменение обуславливает взрывное мартенситное превращение, показанное на рис.2.20. Это подтверждается отмеченными в подразделе 2.7.1 условиями реализации взрыва — система

⁴⁾ Наложение поля σ_{ext} , отвечающее росту ϵ , приводит, как видно из рис.2.24, к укорочению горизонтального дерева, что способствует мартенситному превращению. Это согласуется с экспериментальными данными о том, что приложение внешней нагрузки увеличивает крутизну мартенситной кривой $p(T)$ [172].

должна обладать либо склонностью к фазовому наклепу, либо иметь макроструктуру с малой податливостью к действию внешних напряжений. Оба этих условия обеспечивают удлинение горизонтального дерева, а следовательно, и взрывной характер мартенситного превращения.

Прямым проявлением элементарных актов перестройки макроструктуры мартенсита является акустическая эмиссия. Согласно общепринятой картине [160, 161] излучение звука при обратном мартенситном превращении обусловлено рассеянием *нехимической* энергии, запасенной в ходе прямого превращения; акустическая эмиссия при прямом мартенситном превращении связана с взаимодействием межфазной границы с дефектами. Неполнота второго из указанных механизмов сказывается при интерпретации данных по системе $Ti - 39\%Ni - 11\%Cu$, где источником эмиссии является микровзрывное образование и исчезновение мартенситных кристаллов [163]. Поскольку элементарные акты такого процесса отвечают бифуркациям дерева Кейли, то можно сделать вывод, что акустическая эмиссия является следствием указанных бифуркаций, причем на вертикальном дереве они обеспечивают обратное мартенситное превращение, а на горизонтальном — прямое. Акустическое излучение реализуется лишь в том случае, если бифуркация в одном направлении двумерного дерева не сопровождается срастанием его ветвей в другом, т. е. отсутствует блокировка узлов одного дерева ветвями другого (как показано на рис.2.24а). Тогда если при сопряжении ортогональных деревьев Кейли остаются свободными узлы горизонтального дерева (как на рис.2.24б), то эмиссия проявляется в ходе прямого превращения, а если это имеет место для вертикального дерева — для обратного мартенситного превращения; наконец, разреженное сопряжение деревьев, при котором остаются свободными узлы и на вертикальном, и на горизонтальном, обуславливает акустическую эмиссию в обоих направлениях мартенситного превращения.

Указанные особенности позволяют интерпретировать данные, приведенные в конце подраздела 2.7.1, если учесть, что горизонтальное дерево восприимчиво к термическому воздействию, а вертикальное — к механическому. Поэтому при изменении внешних условий перестройка горизонтального дерева, приводящая к незаблокированному каскаду бифуркаций, всегда выражена сильнее, чем для вертикального дерева. Циклирование материалов, склонных к фазовому наклепу, приводит к блокированию этих каскадов за счет прорастания ветвей вертикального дерева из свободных узлов горизонтального.

В результате становится очевидным, почему в системе $Ti_{0.5}Ni_{0.5-x}Cu_x$, где акустическая эмиссия наблюдается в обоих направлениях мартенсит-

ного превращения [163], ее интенсивность и мощность в прямом направлении выше, чем в обратном, а циклирование уравнивает их. Неспособность системы к взрывному поведению означает отсутствие каскадов бифуркаций на горизонтальном дереве, в результате чего становится невозможной эмиссия в прямом направлении. Большая интенсивность и возможность проявления эмиссии только в одном из направлений, характерные для систем с плавной кинетикой [162, 164] объясняются тем, что здесь ширина пучка траекторий мартенситного превращения намного больше, чем для систем с микровзрывной кинетикой. В связи с этим для последних лишено смысла учитывать действие фазового наклепа, изменяющего структуру деревьев внутри пучка. Для систем с плавной кинетикой фазовый наклеп, действие которого проявляется лишь на структуре горизонтального дерева, сопровождается эмиссией в прямом направлении; при этом, естественно, сказывается циклирование, приводящее к блокированию бифуркаций, а следовательно, и уменьшению интенсивности эмиссии. Намного меньшая интенсивность при мартенситном превращении второго класса [163] связана с характером сопряжения горизонтального и вертикального деревьев: как видно из рис.2.24, для мартенситного превращения второго класса характерно сопряжение деревьев с одинаковой ветвимостью, приводящее к максимальному блокированию узлов.

2.7.4 Сравнение теории с экспериментом

В подразделе 2.7.1 мы привели экспериментальные данные, указывающие направление развития термодинамической картины эволюции макроструктуры мартенсита, изложенной в подразделе 2.7.2. В результате была разработана фрактальная концепция, основывающаяся на представлении об иерархической соподчиненности в эволюции элементов макроструктуры, принадлежащих разным уровням (подраздел 2.7.3). На каждом из них устанавливается квазистационарное распределение неравновесной системы, позволяющее использовать неэргодическую теорию [81] — [83]. Покажем, что основной объект этой теории — параметр неэргодичности — сводится к структурно зависимому дефекту модуля упругой податливости.

Действительно, при дисторсионном превращении комбинации модулей упругости типа $C' = (C_{11} - C_{12})/2$ и $2C' + C_{44}$ принимают нулевые значения в точке потери устойчивости T_c (см., например, [173]). Это означает расходимость в температурной зависимости соответствующих упругих податливостей, которая отвечает неограниченному нарастанию восприимчивости $\chi(T)$ при фазовых превращениях второго рода [12]. При перехо-

де первого рода расходимость зависимости $\chi(T)$ при T_c заменяется изломом в точке превращения $T_0 > T_c$, а внешнее поле размывает указанные особенности. В случае классического (реконструктивного) мартенситного превращения, где наблюдается лишь частичное размягчение модулей упругости, восприимчивость $\chi(T)$ конечна при любых температурах, поскольку данный класс мартенситных превращений относится к первому роду. Принципиально важным обстоятельством является наличие гистерезиса в температурной зависимости $f^2(T)$ квадрата частоты свободных колебаний, пропорциональной размягчающейся комбинации упругих модулей; гистерезис проявляется также для внутреннего трения $Q^{-1}(T)$, величина которого определяется действительной частью восприимчивости (рис.2.25). Поскольку в случае однородного состояния или слабо развитой (грубой) макроструктуры такой гистерезис отсутствует, то ясно, что он связан с ее неравновесностью, степень которой определяется разностью между статическим и низкочастотным динамическим значениями упругой податливости. Именно эта разность задает величину параметра неэргодичности Δ .

Помимо Δ поведение иерархически соподчиненной макроструктуры представляется параметром ее стабильности q , который задается структурным фактором (2.52), определенным при волновом числе $k = 0$. Следуя феноменологическому подходу, изложенному в разделе 2.4, легко видеть, что объединение статистических ансамблей, отвечающих различным деталям макроструктуры, приводит к временным зависимостям $\Delta(t)$, $q(t)$, типа показанным на рис. 2.26. Они характеризуются наличием двух областей, в которых система ведет себя совершенно разным образом: в микроскопической $t \leq \tau_0$ за дебаевское время τ_0 происходит формирование микроструктуры, в результате которого полный статистический ансамбль разбивается на подансамбли, отвечающие различным деталям макроструктуры, а указанные параметры достигают максимальных значений Δ_1 , q_1 ; в макроскопической области $t \gg \tau_0$ происходит объединение подансамблей, приводящее к медленной релаксации структуры, в ходе которой параметр неэргодичности принимает нулевую величину, а параметр стабильности — минимальное значение Эдвардса—Андерсона q_0 , задаваемое внешними условиями. Течение структурной релаксации характеризуется сингулярным временем z , связь которого с физическим t определяется сопоставлением дебаевской экспоненты e^{-z} зависимостям, приведенным в таблице 2.1: так, для экспоненты Колерауша $z \equiv (t/\tau_0)^\beta$, в случае степенной зависимости $z \equiv \gamma \ln(t/\tau_0)$ и при логарифмическом поведении $z \equiv (D/a) \ln(T/Q) + (D/a) \ln \ln(t/\tau_0)$.

При включении внешней нагрузки величина ϵ макроскопической де-

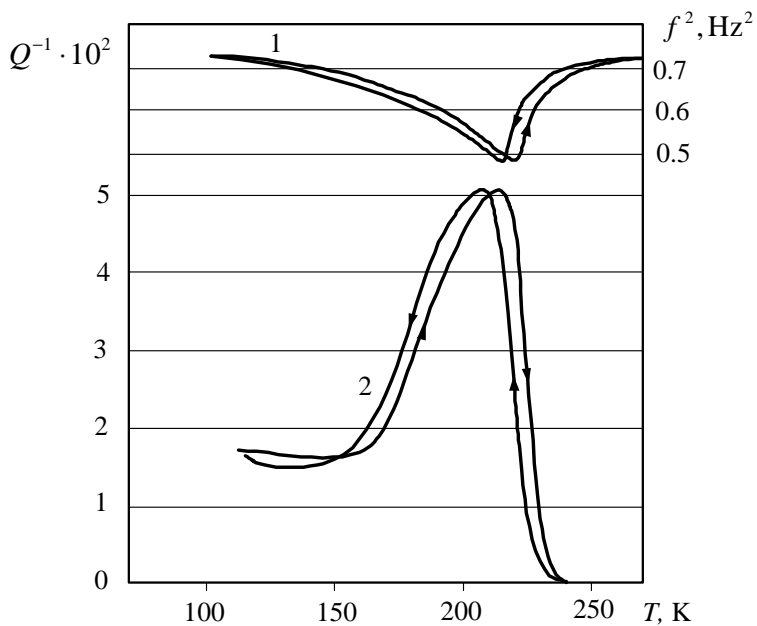


Рисунок 2.25 — Необратимое изменение квадрата частоты свободных колебаний (кривые 1) и внутреннего трения (кривые 2) при мартенситном превращении в сплаве Ti – 45%Ni – 5%Fe [174]

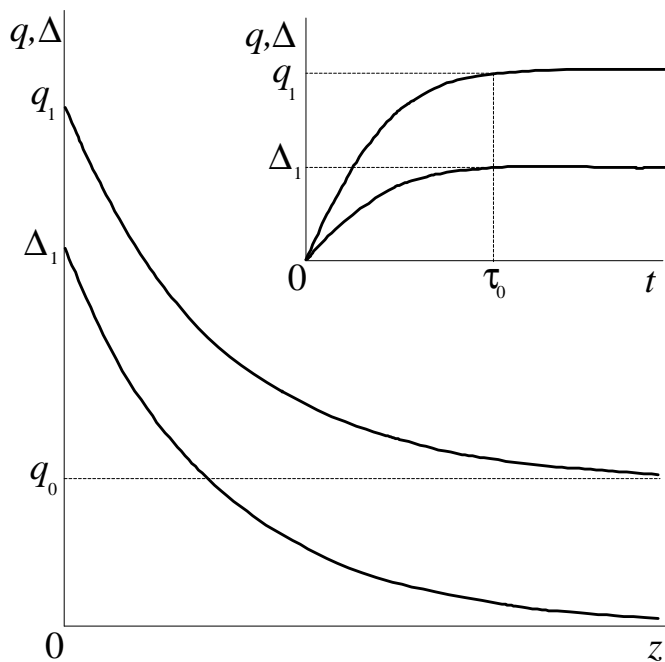


Рисунок 2.26 — Временная зависимость параметров стабильности q и неэргодичности Δ макроструктуры мартенсита в масштабах сингулярного z и физического t времен

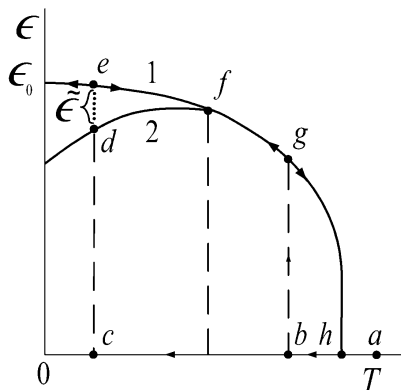


Рисунок 2.27 — Изменение вида температурной зависимости деформации мартенситного превращения в отсутствие и при наличии дисперсии поля напряжений (кривые 1, 2 соответственно). Латинскими буквами указано поведение системы при различных температурах включения поля: траектория $acdfha$ отвечает включению в области неэргодичности $T < T_c$, $abgfefgha$ — при $T > T_c$. Постоянная компонента внешней нагрузки равна нулю

формации превращения изменяется согласно данным, приведенным на рис.2.27. Отклонение зависимости $\epsilon(T)$ от равновесной (кривая 1) происходит благодаря случайному разбросу упругих напряжений по объему образца (кривая 2). При этом становится возможным проявление эффектов памяти: так, при включении поля в точке c система попадает в точку d , характеризуемую малой деформацией ϵ , тогда как при охлаждении под нагрузкой получаем точку e с максимальной величиной деформации $\epsilon \leq \epsilon_0$. Разница $\tilde{\epsilon}$ между этими значениями обусловлена иерархическим соподчинением элементов макроструктуры, возникающим в отсутствие внешней нагрузки.

Одним из центральных моментов предлагаемого подхода является утверждение о множественности путей эволюции системы в конфигурационном пространстве. Оно позволяет естественным образом трактовать эксперименты по изучению зависимости $\epsilon(p)$ макроскопической деформации от объемной доли мартенсита [175]. Такая зависимость (см. рис.2.28) получается исключением температуры из прямых экспериментальных данных

$\epsilon(T)$ и $p(T)$ при постоянной растягивающей нагрузке. Параметры нагружения подбираются таким образом, чтобы реализовался мартенситный механизм деформации, не сопровождавшейся существенным пластическим течением. Тогда циклирование под нагрузкой приводит к полному восстановлению формы образца.

Существенной особенностью полученной зависимости $\epsilon(p)$ является ее нелинейный характер. При единственном кристаллографическом варианте мартенсита зависимость $\epsilon(p)$ должна быть линейной с тангенсом угла наклона, равным деформации решетки ϵ_0 . В том случае, если мартенситное превращение обеспечивает инвариантность плоскости габитуса под действием внешней нагрузки, наклон прямой $\epsilon(p)$ равен деформации формы $\epsilon_f \leq \epsilon_0$ [176]. В действительности оба указанных случая не представляются возможными, поскольку для аккомодации кристаллических решеток мартенсита и матрицы требуются дополнительные варианты мартенситных кристаллов и зависимость $\epsilon(p)$ существенно отклоняется от линейной. Для прямого мартенситного превращения при малой нагрузке σ_{ext} наблюдается горизонтальный начальный участок, означающий, что в начале образуются разориентированные кристаллы мартенсита, которые гасят вклады ϵ_α друг друга в среднюю деформацию $\epsilon = \bar{\epsilon}_\alpha$. С дальнейшим увеличением p сначала происходит ускоренный рост ϵ , свидетельствующий об ориентировании мартенситных кристаллов внешним полем, а затем он замедляется ввиду образования малых кристаллов неориентированного мартенсита, необходимых для аккомодации крупных ориентированных. С увеличением σ_{ext} начальный участок зависимости $\epsilon(p)$ сокращается и исчезает, однако нелинейность не пропадает. Проявляется она и при обратном мартенситном превращении.

Очевидно, представленное поведение обусловлено наличием многих путей эволюции мартенситной структуры в конфигурационном пространстве. С особой наглядностью эта множественность проявляется в несовпадении линий $\epsilon(p)$ для прямого и обратного мартенситного превращения, хотя здесь в отличие от зависимости $p(T)$, исследованной в подразделе 2.7.1, исключены эффекты диссипации энергии, приводящие к внутренней петле гистерезиса. Как видно из рис. 2.28, при любых нагрузках σ_{ext} в начале обратного превращения доля мартенсита p убывает без заметного изменения макродеформации ϵ . Таким образом, основная часть неориентированного мартенсита, образующегося в начале прямого мартенситного превращения, исчезает в начале обратного. Данное обстоятельство указывает на ошибочность утверждения, согласно которому при обратном мартенситном превращении мартенситные кристаллы коллапсируют в последовательно-

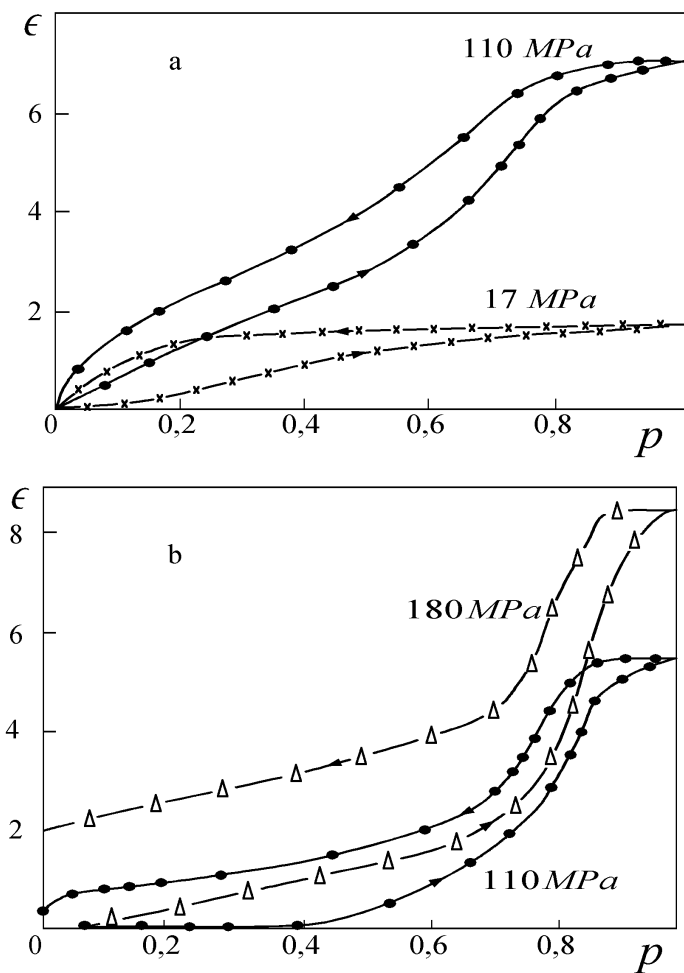


Рисунок 2.28 — Зависимость макродеформации ϵ от доли мартенситной фазы p при разных значениях внешнего напряжения σ_{ext} . Сплав Ti — 50.3%Ni: а — первый цикл мартенситного превращения под нагрузкой; б — цикл мартенситного превращения под нагрузкой после 40 циклов без нагрузки

сти, обратной прямому мартенситному превращению. Наличие неориентированного мартенсита и различная последовательность образования и исчезновения мартенситных кристаллов при прямом и обратном мартенситном превращении вовсе не препятствуют реализации эффекта памяти формы (пока отсутствует пластическая деформация). При этом, разумеется, полное восстановление формы в ходе обратного мартенситного превращения требует движения *точно назад* для большинства атомов [146]. Однако пространственная обратимость такого движения осуществляется при нарушении временной последовательности. Иными словами, обратимость движения атомов соблюдается на нижнем структурном уровне иерархии, но нарушается на верхних.

В рамках представлений, развитых в подразделе 2.7.3, это означает, что в случае небольших напряжений при прямом мартенситном превращении система сначала разветвляется по горизонтальному дереву Кейли (см. рис. 2.24), узлы которого отвечают неориентированным мартенситным кристаллам. Их последующая ориентация отражается сужением пучка траекторий за счет срастания ветвей вертикального дерева. Характер зависимостей $\epsilon(p)$, приведенных на рис. 2.28, воспроизводится, если при прямом (обратном) мартенситном превращении разветвление (срастание) ветвей пучка происходит в начале процесса (для малых p — при прямом и больших — при обратном мартенситном превращении). Рост внешнего напряжения, ориентирующего кристаллы, сужает ширину пучка в обоих направлениях. Наличие эффекта памяти формы означает, что при любых изменениях внешних условий система эволюционирует по пучкам траекторий, стягивающимся к начальной точке двумерного дерева Кейли, отвечающей исходной форме образца (очевидно, такая точка должна лежать вблизи одной из вершин дерева). Обратимость в движении атомов отвечает совпадению пучков траекторий прямого и обратного мартенситного превращения в наиболее широкой области в правом нижнем углу дерева на рис. 2.24.

Если нагрузка столь велика, что обеспечение деформации ϵ требует вклада пластического течения, то зависимость $\epsilon(p)$ теряет обратимость [175]. Вследствие механического наклепа, создаваемого пластической деформацией, петля гистерезиса на рис. 2.29 значительно вытягивается вдоль оси температур. Согласно подразделу 2.7.3 это обусловлено усложнением структуры дерева Кейли и связано с включением в процесс деформации наиболее глубоких структурных уровней, соответствующих дислокациям, дисклинациям, точечным дефектам и прочим носителям пластической деформации. Поскольку они отвечают легко перестраиваемой области двумерного дерева, расположенной в правом нижнем углу рис. 2.24, то в ходе

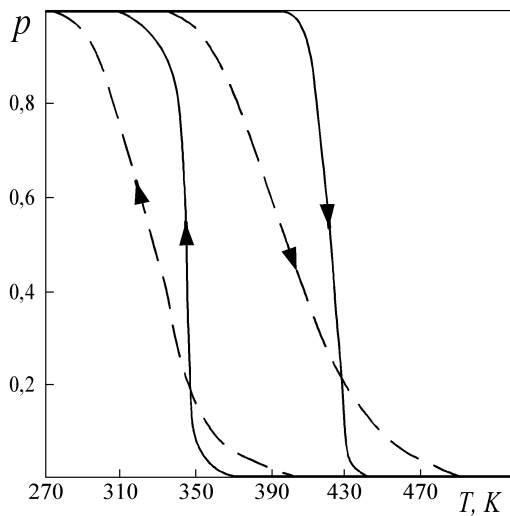


Рисунок 2.29 — Влияние механического наклепа на петлю гистерезиса.
 Сплошная линия — без наклепа, штриховая — после 40% обжатия системы
 Ti – 49.8%Ni

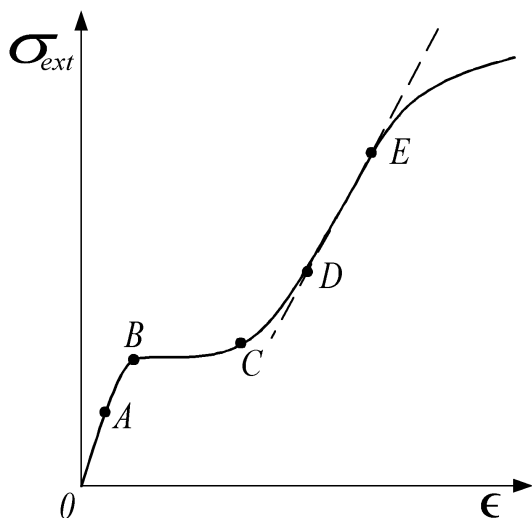


Рисунок 2.30 — Вид зависимости внешнего напряжения от макродеформации в мартенситном состоянии

каждого цикла мартенситного превращения будет активно протекать блокировка узлов, типа той, что имеет место при нацикловке (см. подраздел 2.7.3). Именно это обстоятельство обуславливает пластическую необратимость, которая в отличие от связанной с циклированием мартенситного превращения проявляется только на зависимости $\epsilon(T)$ (а следовательно, и $\epsilon(p)$), но не $p(T)$. Указанное различие связано со следующим обстоятельством: в ходе нацикловки включение в процесс мартенситного превращения дефектов кристаллической решетки отражается изменением ветвимости дерева Кейли на структурных уровнях, отвечающих мартенситным кристаллам, тогда как течение пластической деформации приводит к включению более глубоких уровней, слабо связанных с теми, что непосредственно определяют мартенситную структуру. При очень больших напряжениях мартенситное превращение протекает не полностью, и в ходе нацикловки зависимость $p(T)$ становится необратимой.

Постепенное включение деталей макроструктуры проявляется на зависимости $\sigma_{ext}(\epsilon)$ в согласии с рис.2.30 [175]. Для температур, лежащих в интервале от M_s до M_d на участке AB , в исходном аустенитном состоянии образуются единичные кристаллы мартенсита, отвечающие начально-

му ветвлению горизонтального дерева Кейли. Дальнейшее ветвление на отрезке BC приводит к заполнению всего объема этими кристаллами. Реализуемое в результате мартенситное превращение является обратимым, поскольку деформация полностью пропадает после разгрузки и нагрева (явление псевдоупругости). На участке CDE (иногда границы линейного отрезка DE стягиваются) осуществляется монодоменизация, соответствующая движению по вертикальному дереву Кейли (рис. 2.24); после точки E начинается пластическое течение, отвечающее ветвлению на структурных уровнях дефектов кристалла. Если образец подвергается растяжению в мартенситном состоянии (исходная точка лежит над плоскостью горизонтального дерева), то деформация ниже точки E осуществляется различными механизмами переориентации мартенсита. При этом в точке C происходит смена легких механизмов переориентации, отвечающих обратным бифуркациям корней вертикального дерева, тяжелыми, которым соответствует область вблизи его вершины. В точке D в основном исчерпывается мартенситный механизм деформации за счет монодоменизации и система приближается к вершине M на рис. 2.24.

Температурные зависимости характерных напряжений $\sigma_B \equiv \sigma|_{\epsilon \approx 0}$, $\sigma_D \equiv \sigma|_{\epsilon \approx \epsilon_0}$ в точках B, D , а также предела текучести σ_E и напряжения $\sigma_M \equiv \sigma|_{p=0}$, при котором рентгенографически обнаруживается мартенсит, показаны на рис. 2.31 [175]. Как и следовало, предел текучести σ_E спадает с температурой. Нарастающий характер зависимости $\sigma_M(T)$, а также кривых $\sigma_B(T)$, $\sigma_D(T)$ при $T > M_s$ объясняется соотношением Клаузиуса–Клайперона $d\sigma_{ext}/dT = \delta s_0/v\epsilon_0 > 0$, где $\delta s_0 \equiv s_0^A - s_0^M > 0$ — изменение удельной энтропии при мартенситном превращении, v — удельный объем, ϵ_0 — спонтанная деформация мартенсита в свободном состоянии. При $T < M_f$ зависимости $\sigma_B(T)$, $\sigma_D(T)$ — спадающие, а в интервале двухфазности $M_f < T < M_s$ их наклон изменяется. Понимание отмеченных особенностей может быть достигнуто на основе термодинамического анализа [177]. Действительно, дифференцируя тождество $\partial\varphi/\partial p|_{p=p_0(T), \sigma_{ext}} \equiv 0$, с учетом определений энтропии $s = -\partial\varphi/\partial T$ и деформации $\epsilon = -v^{-1}(\partial\varphi/\partial\sigma_{ext})$ получаем

$$v \left(\frac{d\sigma_{ext}}{dT} \right)_{p_0} = \frac{\delta s_0 - \partial s_1/\partial p|_{p=p_0}}{\epsilon_0 + \partial\epsilon_1/\partial p|_{p=p_0}}, \quad \delta s_0 \equiv s_0^A - s_0^M > 0. \quad (2.84)$$

Здесь учтено, что полные величины s, ϵ энтропии и деформации разбиваются на *химические* составляющие $s_0 = s_0^M p + s_0^A(1-p)$, $\epsilon_0 p$ и дальнедействующие $s_1(p)$, $\epsilon_1(p)$. Поскольку первые вносят подавляющий вклад, то выше точки M_s выражение (2.84) всегда положительно. Ниже тем-

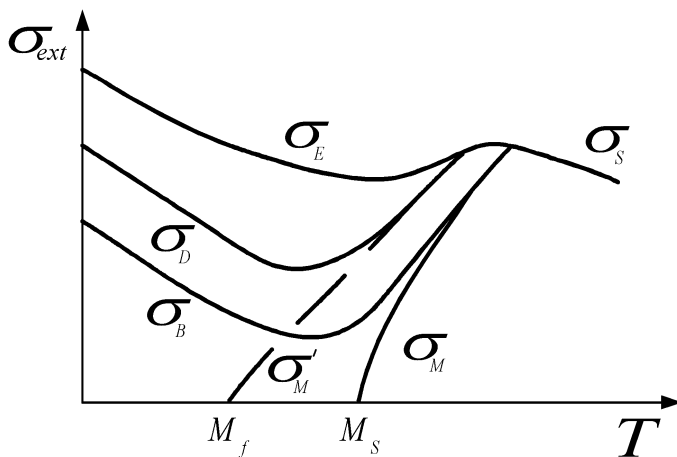


Рисунок 2.31 — Схема температурной зависимости характерных значений внешнего напряжения: σ_B , σ_D , σ_E — напряжения, соответствующие одноименным точкам на рис. 2.30; σ_S — предел текучести высокотемпературной фазы; σ_M , σ'_M — напряжения начала и конца мартенситного превращения при изотермическом нагружении

пературы M_f , где $p_0 = 1$, наклон зависимости $\sigma_{ext}(T)$ характеризуется производной $d\sigma_{ext}/dT$, взятой при условии $\epsilon = \text{const}$, которое отвечает постоянной ориентации мартенситных макрокристаллов. Используя метод якобианов, можно показать, что всегда выполняется неравенство $(d\sigma_{ext}/dT)_\epsilon \leq (d\sigma_{ext}/dT)_{p_0}$. Тогда ниже точки M_s , где $\delta s_0 \equiv 0$, равенство (2.84) приводит к условию $(d\sigma_{ext}/dT)_\epsilon < 0$. Такая картина и наблюдается экспериментально (рис. 2.31).

Термодинамический подход [177] позволяет объяснить наклон зависимости $\sigma_{ext}(T)$. Однако ниже M_s она может проявлять аномальное поведение, приводящее к положительной кривизне. Понимание этой особенности требует использования неэргодической теории [54]. Действительно, если вклад в кривизну $d^2\sigma_{ext}/dT^2$ определяется температурной зависимостью упругих модулей $C(T)$, для которых $d^2C/dT^2 < 0$, то должно выполняться противоположное условие $d^2\sigma_{ext}/dT^2 < 0$. С другой стороны, температурная зависимость $\Delta(T)$ параметра неэргодичности дает положительный вклад [54], который может обеспечить нужный знак кривизны $d^2\sigma_{ext}/dT^2 > 0$. Однако экспериментальные данные о зависимости $\sigma_{ext}(T)$ недостаточно систематичны, и требуется специальное экспериментальное исследование, разделяющее указанные вклады в зависимость $\sigma_{ext}(T)$.

Заканчивая обсуждение, отметим, что вопрос об эффектах неэргодичности при мартенситных превращениях поставлен впервые в работе [139]. Проведенное рассмотрение показывает удовлетворительное согласие результатов использованного подхода с экспериментальными данными. Разумеется, можно было бы привлечь к обсуждению ряд других экспериментов: различное деформационное поведение мартенсита под внешней нагрузкой и при изотермическом нагружении, закономерности накопления пластической деформации при повторных циклах мартенситного превращения и т.д. Однако они не добавляют ничего существенно нового в развитие изложенной картины. Вместе с тем количественные результаты неэргодической теории [54] требуют постановки экспериментальных исследований, специально ориентированных на выявление эффектов неэргодичности при мартенситном превращении и пластической деформации.

2.8 Взрывная кристаллизация ультрадисперсных аморфных пленок

Метастабильные аморфные пленки получают быстрым охлаждением расплава или конденсацией пара на холодную подложку [178] — [181]. Экс-

перименты показывают сложность и многообразие проявлений происходящего при этом процесса кристаллизации [178] — [183]. При малых толщинах пленки тепло, выделяющееся в результате кристаллизации, успевает отводиться в термостат, и реализуется обычный механизм холодной кристаллизации [178]. При этом пленки полупроводников приобретают волнистую поверхность с гребнями, направленными перпендикулярно движению фронта кристаллизации [182]. Такой механизм реализуется при малой частоте зарождения центров кристаллизации [182, 183].

В некоторых случаях взрывная кристаллизация может быть вызвана локальным тепловым воздействием (например, лазерным или электронным импульсом). Такой случай реализуется благодаря неустойчивости движения межфазной границы, которая возникает, когда тепло, выделяющееся под воздействием излучения, не успевает отводиться в подложку [182, 183]. Указанная неустойчивость обеспечивается нелинейной зависимостью скорости роста кристалла от температуры. Более того, возможна колебательная неустойчивость, проявляющаяся в волнистом рельефе поверхности кристаллизации, который обнаруживается при неполном течении процесса [182, 183].

Совершенно другая картина наблюдается в аморфной среде, где большими значениями обладают как скорость роста кристалла u , так и частота зародышеобразования J . Действительно, при низких температурах величины J , u возрастают с нагревом пленки, так что выделение тепла кристаллизации способствует ее течению. Поэтому с ростом пленки может наступить такая ситуация, когда тепло кристаллизации не успевает отводиться в окружающую среду, и возникает тепловая неустойчивость, обеспечивающая спонтанный переход в режим взрывной кристаллизации [184]. Примеры такого перехода дают процессы кристаллизации в слоях аморфного льда и некоторых органических веществ [178, 180], а также в аморфных ультрадисперсных порошках германия с вкраплениями кристаллической фазы [180, 181]. Исследованию механизма взрывной кристаллизации, обусловленного указанной неустойчивостью, посвящен настоящий раздел.

Экспериментальные данные, приведенные в подразделе 2.8.1, показывают, что картина кристаллизации ультрадисперсных аморфных материалов определяется высокой плотностью зародышей кристаллической фазы. При этом распространение фронта кристаллизации подобно образованию перколяционного кластера в задаче о протекании жидкости в случайной среде [99]. Образующийся кластер имеет разветвленную фрактальную структуру, характерную для агрегатов, возникающих в результате процесса, ограниченного теплопроводностью. Это приводит к заключению об иерар-

хическом характере взрывной кристаллизации.

В подразделе 2.8.2 проводится исследование условий развития тепловой неустойчивости в результате самоорганизации процессов движения фронта кристаллизации и температуропроводности, течение которых связано с разностью термодинамических потенциалов аморфного и кристаллического состояний. Оказывается, что при выделении тепла, превышающем критическое значение, появляется стационарное состояние, в котором скорость фронта кристаллизации приобретает аномально большие значения. Для малой толщины пленки такой режим обеспечивается внешним воздействием, а с ростом толщины до закритического значения теплота кристаллизации, удерживаемая в объеме пленки, становится достаточной для развития неустойчивости, которая приводит к спонтанному росту скорости фронта, наблюдаемому в эксперименте [180].

Подраздел 2.8.3 посвящен исследованию процесса взрывной кристаллизации, представляющего результат самоорганизуемой критичности в стохастическом распространении тепла по узлам иерархического дерева. Исследование эффективного уравнения движения показывает, что в согласии с предыдущим подразделом неустойчивость развивается только в том случае, когда тепловой эффект кристаллизации (или энергия, вводимая извне) превышает критическое значение, величина которого определяется температуропроводностью. Стационарная функция распределения тепла кристаллизации определяется уравнением Фоккера-Планка, решение которого приводит к выражениям для потока тепла, выделяющегося в результате кристаллизации, и вероятности спонтанной кристаллизации в пленке докритической толщины (см. подраздел 2.8.4). Оказывается, что эта вероятность логарифмически медленно нарастает со временем до значения, монотонно спадающего с ростом температуропроводности.

2.8.1 Экспериментальные данные

До настоящего времени взрывная кристаллизация сплошных пленок аморфного германия в чистом виде не обнаружена. Это связано с тем, что максимальное значение частоты зародышеобразования кристаллов германия имеет сравнительно малое значение ⁵⁾ $J_{max} \sim 10^{14} \text{ с}^{-1} \text{ см}^{-3}$, которое отвечает более высоким температурам, чем реализуются в процессе кристаллизации [178]. Поэтому в германии естественный процесс нуклеации

⁵⁾Так, в слоях аморфного льда, подверженных взрывной кристаллизации, имеем $J_{max} \sim 10^{20} \text{ с}^{-1} \text{ см}^{-3}$.

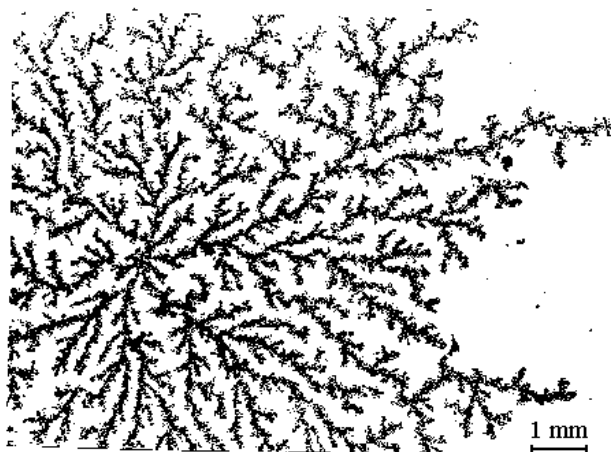
не может обеспечить взрывную кристаллизацию, и для его усиления следует ввести кристаллические зародыши. Эксперименты проводились на тонких слоях аморфных нанопорошков германия с вкраплениями мельчайших кристаллов, доля которых составляла не более 3–10% от полной массы [181]. Слои аморфного порошка с характерным размером частиц 3–10 нм получали термическим испарением и конденсацией германия в атмосфере инертного газа при давлениях 10–100 Па. Доля кристаллических частиц регулировалась изменением интенсивности испарения, а интенсивность теплоотвода — степенью пористости пленки.

Спонтанный механизм взрывной кристаллизации наблюдался в слоях нанопорошков толщиной 0.01–0.1 мм при температуре подложки 300–400 К. В зависимости от начального содержания кристаллической фазы скорость движения волны кристаллизации изменялась в диапазоне 0.01–0.1 м/с. В отличие от обычного механизма, когда формируется волнистая поверхность с гребнями, направленными перпендикулярно движению фронта кристаллизации, в исследуемой системе гребни оказываются направленными вдоль его движения. На рис. 2.32, где светлый фон отвечает незакристаллизовавшимся областям, приведен характерный вид картины, получающейся в результате взрывной кристаллизации. Видно, что лавина кристаллизации может возникать из одного или нескольких центров, играющих роль зародышей. Принципиально важным является фрактальный характер распределения кристаллической фазы, который наблюдается в процессе формирования агрегатов, ограниченном диффузией [99].

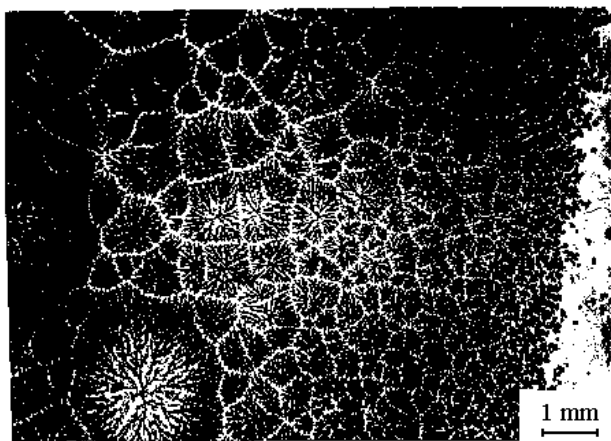
2.8.2 Исследование условий взрывной кристаллизации

Экспериментальные данные показывают, что в зависимости от внешних условий и наличия зародышей возможны два механизма кристаллизации аморфных пленок: медленный рост холодного кристалла и взрывная кристаллизация, обусловленная тепловой неустойчивостью. Скачкообразный переход между этими режимами протекает по механизму фазового перехода первого рода [181]. Покажем, что такой переход является следствием самоорганизации системы, обусловленной положительной обратной связью теплоты перехода со скоростью движения фронта кристаллизации. Впервые указанная неустойчивость обсуждалась в [184].

Для решения задачи рассмотрим временные зависимости скорости фронта кристаллизации $u(t)$, удельной теплоты превращения $f(t)$ и эффективной температуры $T(t)$, определяемой как разность температур $T_0 - T_\infty$



a



b

Рисунок 2.32 — Узоры, возникающие в слое аморфного порошка Ge при взрывной кристаллизации: а — из одного центра; б — из нескольких спонтанно возникших центров

на фронте кристаллизации и в термостате. В рамках синергетического подхода, изложенного в разделе 1.1, уравнения эволюции содержат диссипативные вклады и слагаемые, представляющие положительную обратную связь скорости u и термодинамического фактора f с эффективной температурой T , с одной стороны, и отрицательную обратную связь u и T с f — с другой. В результате поведение системы представляется уравнениями Лоренца (1.1) — (1.3), где параметр порядка η сводится к скорости u , сопряженное поле h к эффективной температуре T , а управляющий параметр S к теплоте превращения f .

В стационарном состоянии $\dot{u} = 0$ первое из указанных уравнений дает линейную связь $u = A_u T$ между скоростью и температурой. Как и (1.1), нелинейное уравнение (1.2) для скорости изменения температуры T содержит диссипативное слагаемое, определяемое мезоскопическим временем τ_T , величина которого намного меньше макроскопического масштаба τ_u . В стационарном случае $\dot{T} = 0$ получаем связь

$$T_0 = T_\infty + A_T u f, \quad (2.85)$$

согласно которой рост скорости фронта кристаллизации и термодинамического фактора приводит к разогреву среды. Кинетическое уравнение (1.3) для разности термодинамических потенциалов фаз f отличается от (1.1), (1.2) тем, что величина f релаксирует не к нулевому, а конечному значению f_e , представляющему плотность тепловой энергии, вводимой в систему. Отрицательная обратная связь величин u и T с f означает уменьшение термодинамического фактора превращения с ростом скорости фронта кристаллизации и его температуры. Очевидно, это спадание является отражением принципа Ле-Шателье для рассматриваемой задачи. Действительно, взрывная кристаллизация обусловлена положительной обратной связью скорости u и термодинамического фактора f с температурой T в уравнении (1.2), которая приводит к разогреву фронта кристаллизации, способствующему развитию неустойчивости. С другой стороны, согласно (1.3) этот разогрев приводит к уменьшению термодинамического фактора f , препятствующему ее течению.

Аналитическое исследование системы дифференциальных уравнений (1.1) — (1.3) возможно при выполнении адиабатических условий

$$\tau_T \ll \tau_u, \quad \tau_f \ll \tau_u, \quad (2.86)$$

означающих, что в ходе эволюции разность температур T и термодинамический потенциал f следуют за изменением скорости фронта кристаллизации.

Первое условие, определяющее соотношение мезоскопического времени τ_T с макроскопическим τ_u , выполняется по определению; второе обеспечивается оценкой $\tau_f \sim \tau_T$. Согласно разделу 1.1 при постоянных значениях времен релаксации τ_u, τ_T, τ_f система (1.1) — (1.3) описывает переход второго рода. Однако, как отмечалось выше, переход от режима холодной кристаллизации к взрывной осуществляется по механизму первого рода. Для учета этого обстоятельства положим, что величина τ_u зависит от скорости кристаллизации u согласно зависимости (1.41). В результате поведение системы определяется синергетическим потенциалом (1.42), вид которого показан на рис. 1.7а, где параметр внешнего воздействия сводится к удельной теплоте кристаллизации f_e . Минимум потенциала $u_0 = 0$ отвечает режиму холодной кристаллизации, а стационарное значение $u_0 \neq 0$, определенное равенством (1.45), — взрывной. Согласно рис. 1.7б при плавном увеличении энергии системы происходит скачкообразное увеличение скорости фронта кристаллизации от нуля до значения $u_0 \neq 0$ в точке $f_e = f_c$, фиксируемой условием (1.44). Очевидно, это и означает переход к механизму взрывной кристаллизации. Согласно рассмотрению, проведенному в подразделах 1.1.2, 1.1.3 и рис. 1.12, в интервале реализации перехода первого рода (f_c^0, f_c), где нижний предел дается равенством (1.43), стационарное значение разности термодинамических потенциалов фаз не превышает плотности вводимой энергии f_e .

Барьер синергетического потенциала $V(u)$, разделяющий режимы холодной и взрывной кристаллизации, пропадает, если плотность тепловой энергии f_e превышает критическое значение f_c . Таким образом, при $f_e < f_c$ переход к взрывной кристаллизации требует активации, а в обратном случае протекает спонтанно. Первый случай реализуется под воздействием пучка на тонкую пленку (см. рис. 2.32а). С ростом толщины напыляемого покрытия теплота кристаллизации не успевает отводиться во внешнюю среду, что приводит к возрастанию параметра f_e , и при критической толщине достигается значение f_c , при котором зависимость $V(u)$ теряет барьер. В результате система спонтанно переходит в режим взрывной кристаллизации (рис. 2.32б).

2.8.3 Описание взрывной кристаллизации в представлении самоорганизующей критичности

Согласно рассмотрению, проведенному в разделе 1.2, самоорганизующая критичность отличается от фазового перехода тем, что не требует внешнего воздействия (например, накачки энергии). Настоящий подраздел посвя-

щен развитию картины, позволяющей представить взрывную кристаллизацию как режим самоорганизуемой критичности. В рамках такого представления эволюция системы развивается как иерархическая последовательность элементарных актов самоорганизации, называемых лавинами [59]. В соответствии с иерархической соподчиненностью суперлавина верхнего уровня может возникнуть только после формирования элементарных лавин нижнего уровня иерархии. Затем этот процесс повторяется на более высоких уровнях — вплоть до формирования глобальной лавины, отвечающей вершине иерархического дерева. Указанная иерархическая картина взрывной кристаллизации проявляется на микроскопических фотографиях узлов кристаллизации, приведенных на рис. 2.32, где она обнаруживается в форме древовидной фрактальной структуры. Как было выяснено в разделе 2.3, такое иерархическое дерево представляет геометрический образ ультраметрического пространства, в котором реализуются состояния системы [96]. Представим сначала геометрическую картину распределения узлов иерархического дерева по его уровням [107].

Будем считать, что максимальное число узлов N находится на нижнем иерархическом уровне, отвечающем расстоянию в ультраметрическом пространстве $u = 0$. Этот уровень соответствует элементарным лавинам, число которых равно N . На верхнем уровне ($u = u_0 \gg 1$) имеется единственный узел, отвечающий глобальной лавине. Найдем зависимость $N(u)$, определяющую распределение числа узлов иерархического дерева по его уровням.

На рис. 2.3 представлены основные типы иерархических деревьев: *регулярное дерево* с целым показателем ветвления s , *регулярное дерево Фибоначчи* с ветвимостью, сводящейся к *золотому сечению* $\tau \simeq 1.618$, *дерево отбора*, имеющее единственный узел ветвления на уровень, и *нерегулярное дерево*, представляющее основной объект нашего исследования. Пусть номер уровня n возрастает сверху вниз. Тогда расстояние в ультраметрическом пространстве определяется переменной

$$u = u_0 - n. \quad (2.87)$$

Элементарные акты самоорганизации отвечают узлам нижнего уровня $n=u_0$. Расстояние между узлами, определяемое числом шагов к общему предку, сводится к номеру уровня (2.87), отсчитанному снизу вверх.

Согласно рис. 2.3а в простейшем случае регулярного дерева с целым показателем ветвимости число узлов экспоненциально спадает с расстоянием u (см. (2.18)):

$$N(u) = N \exp(-u \ln s), \quad N \equiv s^{u_0}. \quad (2.88)$$

Согласно (2.20) экспоненциальная зависимость сохраняется и для дерева Фибоначчи (рис. 2.3с), где максимальное число узлов $N \equiv f\tau^{u_0}$, $f \simeq 1.171$, а показатель ветвимости $s = \tau \simeq 1.618$. Для вырожденного дерева (рис. 2.3б) равенства (2.19), (2.87) дают линейную зависимость

$$N(u) = N - (s - 1)u, \quad N \equiv (s - 1)u_0 + 1. \quad (2.89)$$

Наконец, для нерегулярного дерева (рис. 2.3д) распределение (2.21), где $\nu = 1$, приводит к степенной зависимости

$$N(u) = N(1 - u/u_0)^a, \quad N \equiv u_0^a, \quad a > 1. \quad (2.90)$$

Она отражает самоподобный характер распределения лавин в ультраметрическом пространстве, благодаря чему функция $N(n)$ удовлетворяет условию однородности $N(qn) = q^a N(n)$, где параметр подобия q сводится к n^{-1} .

Согласно обобщенному соотношению Онзагера

$$j_n = -\chi(Q_n) \frac{dQ_n}{dn} \quad (2.91)$$

тепловой поток между уровнями иерархии n определяется теплотой кристаллизации Q_n и эффективным коэффициентом температуропроводности

$$\chi(Q) = \chi Q^\beta, \quad (2.92)$$

где $\chi, \beta > 0$. В стационарном состоянии полный поток равномерно распределен по иерархическим уровням согласно условию

$$j_n N_n = \text{const} \equiv J. \quad (2.93)$$

Использование выражений (2.90) — (2.92) дает тепловой эффект кристаллизации

$$Q_n = Q n^{-b}, \quad b = \frac{a - 1}{1 + \beta} > 0, \quad (2.94)$$

нормированный максимальным значением $Q \equiv Q_{n=1}$. Подставляя сюда (2.87), получаем

$$Q(u) = q(1 - u/u_0)^{-b}, \quad (2.95)$$

где тепловой эффект на нижнем уровне $u = 0$ составляет

$$q \equiv Q u_0^{-b} = Q N^{-b/a}. \quad (2.96)$$

В общем случае условие сохранения потока (2.93) не выполняется, и поведение системы задается скейлинговым соотношением

$$Q_n = N^{b/a} n^{-b} q_n, \quad (2.97)$$

вид которого следует из равенств (2.94), (2.96). Согласно (2.91) — (2.93) медленно изменяющаяся функция q_n удовлетворяет уравнению Ландау—Халатникова (2.33), где роль эффективного времени n и координаты x_n играют величины ϑ , x , определенные равенствами

$$\vartheta \equiv \ln n^b; \quad x \equiv q_n/q_c, \quad q_c^{1+\beta} \equiv (J/b\chi) N^{-(a-1)/a}, \quad (2.98)$$

а синергетический потенциал (2.35) приобретает вид

$$V = \frac{x^{1-\beta}}{1-\beta} - \frac{x^2}{2}, \quad (2.99)$$

показанный на рис. 2.6. Максимальное значение $V_0 = (1 + \beta)/2(1 - \beta)$ достигается при $x_c = 1$, а при $x > 1$ величина V неограниченно спадает. Таким образом, процесс взрывной кристаллизации требует флуктуационного преодоления барьера V_0 лавиной нижнего уровня, обладающей предкритической интенсивностью $q < q_c$. Этот процесс описывается стохастическим уравнением Ланжевена (ср. с (2.33))

$$\frac{dx}{d\vartheta} = -\frac{\partial V}{\partial x} + \zeta, \quad (2.100)$$

с белым шумом $\zeta(\vartheta)$, определенным условиями

$$\langle \zeta(\vartheta) \rangle = 0, \quad \langle \zeta(\vartheta)\zeta(\vartheta') \rangle = 2\chi\delta(\vartheta - \vartheta'), \quad (2.101)$$

где интенсивность шума χ сводится к коэффициенту температуропроводности, введенному в определении (2.92).

Решения стохастического уравнения (2.100) распределены в ультраметрическом пространстве согласно функции $w(\vartheta, x)$, удовлетворяющей уравнению Фоккера—Планка [40]

$$\frac{\partial w}{\partial \vartheta} + \frac{\partial j}{\partial x} = 0, \quad j \equiv -w \frac{\partial V}{\partial x} - \chi \frac{\partial w}{\partial x}. \quad (2.102)$$

В равновесном состоянии поток отсутствует ($j = 0$), и функция распределения

$$w_0(x) \propto \exp\{-V(x)/\chi\} \quad (2.103)$$

определяется потенциалом (2.99). С переходом в стационарное состояние постоянный поток приобретает ненулевое значение, определяемое равенством (2.93), а плотность вероятности w остается независимой от номера иерархического уровня $n \equiv \exp(\vartheta/b)$. Согласно (2.102) стационарное $w(x)$ и равновесное $w_0(x)$ распределения связаны равенством [98]:

$$\frac{w(q)}{w_0(q)} = \frac{j}{\chi} \int_{q/q_c}^{\infty} \frac{dx}{w_0(x)}, \quad (2.104)$$

где учтено граничное условие $w \rightarrow 0$ при $q \rightarrow \infty$.

Выражение (2.104) определяет поток j по заданному тепловому эффекту q . При этом следует иметь в виду, что величина q ограничена снизу щелью G , появление которой отражает иерархический характер ансамбля центров кристаллизации. Действительно, после их слияния в кластер размером u_b , все субкластеры, разделенные меньшими расстояниями $u < u_b$, обладают тепловыми эффектами $q < q(u_b) \equiv G$ и не подлежат учету. В результате уравнение (2.104), дополненное граничным условием $w(G) = w_0(G)$, приводит к потоку

$$j = 2\chi W \left\{ 1 + \operatorname{erf} \left[\sqrt{\frac{1+\beta}{2\chi}} \left(1 - \frac{G}{q_c} \right) \right] \right\}^{-1}, \quad (2.105)$$

где коэффициент

$$W \propto \exp(-V_0/\chi), \quad V_0 = \frac{1}{2} \frac{1+\beta}{1-\beta} \quad (2.106)$$

представляет вероятность преодоления барьера потенциала (2.99). Согласно (2.105) при $G \ll q_c$ поток j имеет значение $W\chi$, удваивающееся при $G = q_c$. Такое поведение легко понять, если представить влияние щели по аналогии с зеркалом, отражающим диффундирующие частицы в точке $q = G$: при $G \ll q_c$ частица, преодолевающая барьер, может двигаться в обоих направлениях, тогда как при $G = q_c$ зеркало располагается в точке, отвечающей вершине барьера, и все частицы перемещаются только в сторону неограниченного возрастания q .

При заданном потоке j стационарная функция распределения $w(x)$ определяется уравнением (2.104), согласно которому в предкритической области $q < q_c$ имеем $w(x) \approx w_0(x)$, тогда как при закритических значениях $q \gg q_c$ неограниченное нарастание равновесной функции $w_0(x)$ приводит к условию $w_0(x) \gg w(x)$. В результате равновесная вероятность $w_0(q)$

остается практически неизменной ($w(q) \approx w(q_c)$) в области $q \in (q_c, q_b)$, расположенной между критическим и граничным значениями, тогда как при $q > q_b$ имеем $w(q) \approx 0$.⁶⁾ При этом рост граничного значения q_b задается уравнением [186]

$$\frac{dq_b}{d\vartheta} = \chi \frac{q_b - q_c}{q_b^2}. \quad (2.107)$$

Для определения критического значения теплового эффекта q_c сравним макроскопический поток J в (2.93) и микроскопический j в (2.102). Они отличаются множителем $N^{(a-1)/a} \equiv u_0^{a-1}$, величина которого определяется полным числом зародышей N (см. (2.90)). Тогда последнее равенство (2.98) и выражение (2.105), взятое при $G = 0$, $\chi \ll 1$, дают

$$q_c = Q \exp\left(-\frac{(1-\beta)^{-1}}{2\chi}\right), \quad (2.108)$$

где предэкспоненциальный множитель Q представляет вероятность преодоления барьера, не подлежащую определению в рамках использованного подхода. Равенство (2.108) подобно известному результату теории БКШ для температуры сверхпроводящего перехода. Согласно (2.108) критический тепловой эффект q_c медленно возрастает с увеличением температуропроводности χ , играющей роль параметра эффективного взаимодействия.

2.8.4 Временная зависимость вероятности кристаллизации

Иерархический ансамбль центров кристаллизации представляет самоподобное множество, в котором вероятность $P(Q, u)$ распределения тепла, выделяемого зародышами, представляет однородную функцию расстояния u в ультраметрическом пространстве (ср. с (1.71))

$$P(Q, u) = u^{-\tau} w(q), \quad (2.109)$$

где $w(q)$ — стационарное распределение зародышей, рассмотренное в предыдущем подразделе; τ — положительный показатель. Физический смысл скейлингового соотношения (2.109) состоит в том, что в масштабе $(1-u/u_0)^{-b}$ полное тепло Q сводится к вкладу одного зародыша q

⁶⁾Более точно определение потока (2.102), где диффузионный вклад пренебрежимо мал, дает $w \approx -j(\partial V/\partial x)^{-1}$.

(см. (2.95)), и распределение (2.109) представляет обобщенную диффузию теплового потока в ультраметрическом пространстве.

Дальнейшая задача состоит в описании временного поведения вероятности иерархической кристаллизации, приводящей к образованию фрактального кластера, показанного на рис. 2.32. Обратная вероятность $\bar{\mathcal{P}}(t)$ отсутствия кристаллизации за время t определяется интегрированием по u распределения (2.109) с весовой функцией

$$p_u(t) = \exp\{-t/t(u)\}, \quad t(u) = t_0 \exp\{Q(u)/\chi\}, \quad (2.110)$$

определяющей дебаевскую релаксацию со временем $t(u)$, задаваемым высотой барьера (2.95) (микроскопический масштаб t_0 подлежит определению, см. (2.115)). Использование метода перевала приводит к асимптотической зависимости ($t \gg t_{ef}$)

$$\bar{\mathcal{P}}(t) = \left(\frac{q}{\chi}\right)^{\tau/b} \left[1 - \left(\frac{\chi}{q} \ln \frac{t}{t_{ef}}\right)^{-1/b}\right]^{-\tau}, \quad t_{ef} \equiv \frac{\tau}{b} \left(\frac{q}{\chi}\right)^{1/b} t_0, \quad (2.111)$$

где предполагается условие $1 \ll u_m \leq u_0$, в котором u_m отвечает максимуму подынтегрального выражения и удовлетворяет уравнению

$$\frac{\chi\tau}{bq} \frac{(1-x)^{1+b}}{x} = \frac{t}{t_0} \exp\left\{-\frac{q}{\chi}(1-x)^{-b}\right\}, \quad x \equiv \frac{u_m}{u_0}. \quad (2.112)$$

Учитывая скейлинговое соотношение

$$u_0 \propto (q_c - q)^{-1/\sigma}, \quad \sigma > 0 \quad (2.113)$$

для обрезающего параметра u_0 , приходим к неравенствам

$$q - q_c \ll q, \quad t \gg t_{ef} \exp\left\{(q_c/\chi)^{-1/b} - 1\right\}^{-b}, \quad (2.114)$$

обеспечивающим указанные условия. При этом тепловой эффект q в равенствах (2.111), (2.112) можно заменить критическим значением q_c .

Согласно (2.111) вероятность кристаллизации $\mathcal{P}(t) \equiv 1 - \bar{\mathcal{P}}(t)$ логарифмически возрастает со временем до значения $\mathcal{P} = 1 - (q_c/\chi)^{\tau/b}$. Условие $\mathcal{P} \geq 0$ выполняется, если в равенстве (2.108) теплота $Q = \frac{q}{2}(1 - \beta)^{-1}$, а коэффициент температуропроводности ограничен максимальным значением $\chi_0 = \frac{1}{2}(1 - \beta)^{-1}$.

Изложим в заключение полученную картину взрывной кристаллизации аморфных пленок. Согласно рассмотрению, проведенному в подразделе 2.8.2, переход от холодной кристаллизации к взрывной представляет процесс самоорганизации, реализуемый как переход первого рода. Поведение системы определяется параметром f_e , величина которого представляет тепловую энергию кристаллизации, которая может вводиться извне. При величине f_e , превышающей критическое значение (1.44), синергетический потенциал (1.42) принимает минимальное значение $-q$ в точке $u = u_0$ и максимальное V_m при $u = u^m$ (стационарные значения скорости фронта кристаллизации u и термодинамического фактора f задаются равенствами (1.45) и (1.48)). Процесс взрывной кристаллизации становится выгодным при отрицательных значениях минимального синергетического потенциала, т. е. при положительной теплоте $q > 0$. Высота энергетического барьера V_m задает время зарождения центра кристаллизации в (2.110):

$$t_0 \approx \tau_D \exp(V_m/\Delta), \quad (2.115)$$

где параметр Δ представляет разброс значений f_e , $\tau_D \sim 10^{-12}$ с — дебаевское время.

Зародыши кристаллизации формируют иерархически соподчиненный статистический ансамбль, характеризуемый распределением тепла Q по координате u ультраметрического пространства. В рамках такого представления процесс кристаллизации сводится к эффективной диффузии частицы с координатой q по узлам иерархического дерева, положение которых задает время u . Процесс диффузии описывается уравнением Ланжевена (2.100) с белым шумом (2.101) и эффективным коэффициентом диффузии (температуропроводностью) χ ; соответствующее уравнение Фоккера-Планка имеет вид (2.102). Стационарные распределения тепла и его потока даются выражениями (2.104), (2.105). Условие сохранения потока (2.93) определяет распределение (2.95) теплоты кристаллизации в ультраметрическом пространстве. Будучи слабо зависимым от u , поведение ансамбля зародышей задается синергетическим потенциалом (2.99), который имеет максимум при критическом тепловом эффекте (2.108) (см. рис. 2.6). Подобно формированию закритического зародыша в ходе фазового перехода первого рода [98], преодоление барьера V_0 , обеспечивающее закритический тепловой эффект $q > q_c$, происходит за время (ср. с (2.106))

$$t_c \approx t_0 \exp(V_0/\chi). \quad (2.116)$$

Последующий рост зародыша обеспечивается иерархической теплопроводностью, приводящей к логарифмической зависимости вероятности фор-

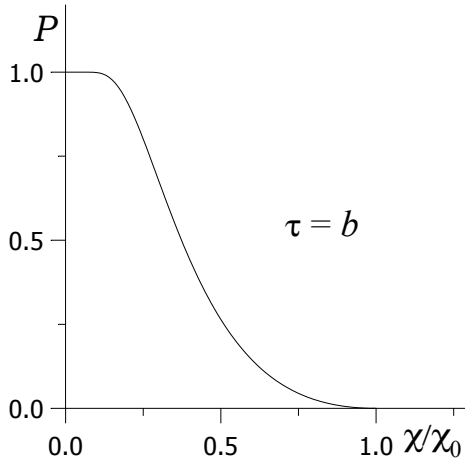


Рисунок 2.33 — Зависимость максимальной вероятности кристаллизации \mathcal{P} от температуропроводности χ

мирования полного кластера

$$\mathcal{P}(t) = 1 - \bar{\mathcal{P}} \left[1 - \bar{\mathcal{P}}^{1/\tau} \left(\ln \frac{t - t_c}{t_{ef}} \right)^{-1/b} \right]^{-\tau}, \quad t_{ef} \equiv (\tau/b) \bar{\mathcal{P}}^{1/\tau} t_0, \quad (2.117)$$

где время t отсчитано от значения (2.116). Минимальная вероятность отсутствия кристаллизации

$$\bar{\mathcal{P}} = \left(\frac{\chi_0}{\chi} \right)^{\tau/b} \exp \left\{ -\frac{\tau}{b} \left(\frac{\chi_0}{\chi} - 1 \right) \right\} \quad (2.118)$$

определяется отношением интенсивности шума χ (см. (2.101)) к максимальному значению $\chi_0 = \frac{1}{2}(1 - \beta)^{-1}$. Согласно (2.118) с ростом температуропроводности χ максимальная вероятность кристаллизации $\mathcal{P} \equiv 1 - \bar{\mathcal{P}}$ стремится к нулю согласно рис. 2.33.

Глава 3

Синергетика пластической деформации

Под пластической деформацией понимают широкий круг явлений, обусловленных перемещением дефектов или необратимой перестройкой кристалла, в результате которых наблюдается остаточная деформация [187], [188]. При малых степенях деформирования описание процессов пластического течения достигается в рамках наглядных представлений об эволюции ансамбля носителей пластической деформации во внешнем поле (см. [189] — [196]). Однако с ростом деформации их плотность оказывается настолько высокой, что предположение об автономном поведении отдельных дефектов становится неприемлимым [197] — [201]. Эта глава посвящена исследованию коллективных эффектов, определяющих процесс развитой пластической деформации.

В разделе 3.1 излагается полевая теория сверхпластического состояния, возникающего при установлении когерентной связи между дефектами. Подраздел 3.1.1 основан на использовании понятия потенциального рельефа атомов, которое широко используется при микроскопическом описании диффузии и колебаний атомов в идеальной упругой среде. Мы обобщаем это понятие для описания вязкоупругой среды, где координатная зависимость потенциальной энергии атома становится неоднозначной и вместо одного появляется ансамбль потенциальных рельефов. Он представляется материальным полем, описывающим перестройку потенциального рельефа в результате когерентной связи между дефектами. Такой подход позволяет описать зону пластического сдвига типа полосы Людерса (подраздел 3.1.2). Поскольку при этом плотность дефектов настолько высока, что становится

определяющим их коллективное поведение, а не отличительные признаки, то процесс сверхпластичности представляется единым макроскопическим полем.

Указанные отличия дефектов проявляются, если рассмотреть переходной режим от их автономного поведения к когерентному. Такая ситуация исследуется в разделе 3.2, где рассмотрено формирование полосы пластического течения за счет автокаталитического размножения вакансий и дислокаций. В рамках феноменологического подхода (подраздел 3.2.1) записаны уравнения дислокационно—диффузионной кинетики, для определения коэффициентов которых используется модель расширяющейся дислокационной петли. На основе анализа фазового портрета в подразделе 3.2.2 сделано заключение, что при напряжениях, превосходящих критический предел, дислокационно—вакансионный ансамбль переходит в автокаталитический режим размножения, в результате которого устанавливается когерентная связь между дефектами. Эволюция такого ансамбля дефектов представлена в рамках синергетической схемы (подраздел 3.2.3), которая позволяет описать образование полосы локализованной деформации по аналогии с доменной неустойчивостью в полупроводниках.

Раздел 3.3 посвящен исследованию коллективных эффектов пластической деформации при структурных превращениях. На основе рентгеновского и электронно—микроскопического исследований холоднокатанных монокристаллов Ni показано (подраздел 3.3.1), что переориентировка решетки в процессе деформации реализуется посредством структурных перестроек, сводящихся к рассыпанию границ предшествующего типа структуры, частичной аннигиляции хаотизованных дислокаций и формированию границ новой структуры. Предложена модель периодических структурных превращений, основанная на системе нелинейных дифференциальных уравнений, определяющих совместную эволюцию плотностей распадающихся границ, хаотических дислокаций и границ возникающей структуры. Показано, что синергетическая схема позволяет единым образом описать структурно обусловленную пластическую деформацию и отжиг (подраздел 3.3.2).

Указанное выше циклическое поведение присуще системе дефектов, но не самому полю деформации. В отличие от этого в разделе 3.4 исследуется ситуация, когда волновой характер может проявлять непосредственно процесс пластической деформации. На основе результатов спекл—интерферометрического исследования поля смещений в плоских образцах кремнистого железа и малоуглеродистой стали, подверженных активному растяжению, установлено, что немонотонное течение пластической дефор-

мации представляет передемпфированный волновой процесс. Оценены характерные параметры пластического течения в заданном режиме. Для полостей пластической деформации и напряжений предложена система нелинейных уравнений, позволяющая представить такой режим в согласии с экспериментальными данными.

Раздел 3.5 посвящен исследованию иерархических дефектных структур, возникающих в процессе развитой пластической деформации. Сначала рассмотрена ситуация, отвечающая процессу ползучести твердого тела (подраздел 3.5.1). Эволюция системы дефектов представлена как немарковская цепь термофлуктуационных скачков по минимумам фрактального рельефа, отвечающего термодинамическому потенциалу дефектной кристаллической структуры. Установившаяся ползучесть связывается с атермическим преодолением барьеров. Выяснена природа критического замедления при логарифмической ползучести. Найдены возможные виды временной зависимости деформации. Построена диаграмма ползучести в осях напряжение—температура. В подразделе 3.5.2 проводится обобщение на произвольный режим деформирования. Исходя из картины потенциального рельефа многоуровневой системы, делается вывод о фрактальной природе иерархически соподчиненной дефектной структуры. Для ее описания вводится ультраметрическое пространство состояний, точки которого отвечают отдельным ансамблям дефектов, образующих неэргодическую систему. Структурная релаксация представлена как диффузия в ультраметрическом пространстве.

3.1 Полевая теория сверхпластичности

В реальных условиях пластичность твердых тел обусловлена, как правило, эволюцией ансамбля дефектов кристаллического строения — вакансий, междоузельных атомов, дислокаций, границ раздела, пор, включений и т. д. Однако при интенсивном внешнем воздействии плотность дефектов становится настолько высокой, что они ведут себя коллективным образом, и понимание их поведения может быть достигнуто на основе концепции перестраиваемого потенциального рельефа (подраздел 3.1.1). Подраздел 3.1.2 посвящен развитию полевой теории, которая позволяет описать стационарные пространственно—временные структуры, возникающие в вязкоупругой конденсированной среде. Возможность такого представления обеспечивается разделением полного потенциала упругопластического поля на материальную компоненту, связанную с распределением атомов, и калибровоч-

ную составляющую, представляющую упругое поле.

3.1.1 Концепция перестраиваемого потенциально-го рельефа

Проблема описания конденсированной среды, подверженной интенсивному внешнему воздействию, является одной из важнейших в современной физике. В последние годы в этом направлении были достигнуты значительные успехи (см. [11], [12], [54], [69], [70], [72] — [78], [82]). В частности, объяснены основные особенности микроскопической картины структурных фазовых превращений на атомном уровне (например, сегнетоэлектрические и мартенситные превращения, упорядочение и распад твердых растворов). Характерная особенность теории структурных превращений состоит в их разделении на два класса — переходы типа смещения и порядок—беспорядок. Такая классификация определяется координатной зависимостью потенциальной энергии атома $U(\mathbf{r})$: для переходов типа смещения реализуется одноямный потенциал (рис. 3.1a), а для переходов порядок—беспорядок — двухямный (рис. 3.1b). Соответственно в первом случае переход сводится к смещению минимума зависимости $U(\mathbf{r})$, а во втором атомы перераспределяются между минимумами, отвечающими различным координатам $\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2$.

Микроскопическое описание термодинамических превращений требует отдельного рассмотрения потенциальных рельефов, показанных на рис. 3.1 [69]. С другой стороны, особенности поведения сильнонеравновесных систем типа низкотемпературной теплоемкости металлических стекол [79], [80] могут быть поняты только при совместном использовании обоих типов указанных рельефов $U(\mathbf{r})$. Взаимное превращение одно— и двухямных потенциалов обеспечивается здесь возможностью появления атомных кластеров, обладающих малой жесткостью $c \equiv \frac{d^2U(\mathbf{r})}{d\mathbf{r}^2}|_{\mathbf{r}=\mathbf{R}}$ нерегулярной аморфной структуры. При этом незначительная часть $\sim 10^{-6}$ атомов, попавших в эти кластеры, приводит к аномальному поведению в низкотемпературной области. В качестве другого примера можно привести механизм Боргони в полупроводниках, где внешнее облучение приводит к изменению состояний атомов; это, в свою очередь, обуславливает существенную перестройку потенциального рельефа, проявляющуюся в аномальном ускорении диффузии [202]. Еще один пример такого рода представляет температурное изменение потенциала упругого взаимодействия между атомами твердого раствора [71].

Наряду с разделением переходов по типам смещения и порядок—

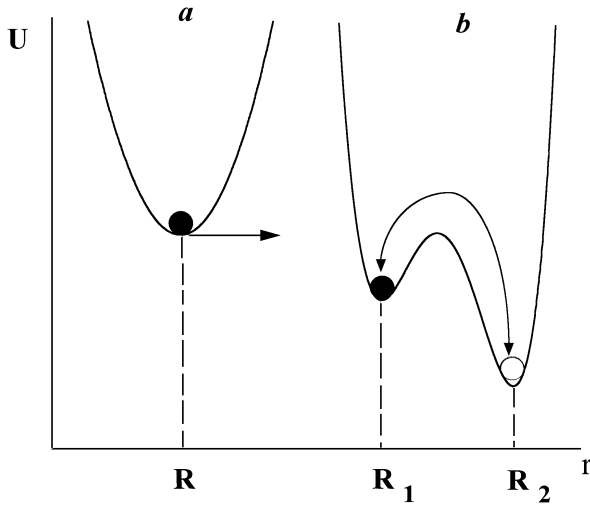


Рисунок 3.1 — Вид координатной зависимости потенциальной энергии атома при переходах типов смещения (а) и порядок—беспорядок (b)

беспорядок, приведенные примеры указывают на принципиальную важность учета формы потенциального рельефа $U(\mathbf{r})$ при микроскопическом рассмотрении. По нашему мнению, перестройка атомного потенциального рельефа в результате интенсивного внешнего воздействия представляет основную особенность поведения атомов конденсированной среды вдали от равновесия. Указанные выше модели [71], [79], [80], [202] используют только детали полной картины. Для ее выяснения рассмотрим основные элементарные акты движения атомов в заданном потенциальном рельефе $U(\mathbf{r})$ [203]. Как видно из рис. 2.1, возможны три типа такого движения: атом 1 совершает колебания вблизи положения равновесия, атом 3 выполняет диффузионный скачок в положение 2 (и, возможно, назад) над неизменным потенциальным барьером; и наконец, в результате флуктуационного "проседания" потенциального барьера атом 5 может переходить в положение 4 безактивационно. Очевидно, последний из указанных элементарных актов

обеспечивает процесс пластического течения.

Аналитическое исследование микроскопического поведения вязкоупругой среды, в которой реализуются все указанные типы движения атомов, достигается в рамках метода Цванцига—Мори (см. [76]) и приводит к закону дисперсии [203]:

$$\omega = -i/2\tau \pm ck\sqrt{1 - (2\lambda k)^{-2}}. \quad (3.1)$$

Здесь ω — частота; k — волновое число; $\tau = \eta/\mu$ — время релаксации вязкоупругой среды с динамической вязкостью η и модулем сдвига μ ; $c = \sqrt{\mu/\rho}$ — скорость звука; ρ — плотность среды; $\lambda = \nu/c$ — характерный масштаб среды, обладающей кинематической вязкостью $\nu = \eta/\rho$. В длинноволновой области $k \ll k_c$, фиксируемой граничным значением $k_c \equiv (2\lambda)^{-1}$, получаем обычный закон дисперсии $\omega = -i/\tau$ диссипативной среды со временем релаксации τ ; при $k > k_c$ частота (3.1) приобретает действительную составляющую, и при $k_c \ll k \ll a^{-1}$, где a — характерное расстояние между атомами, реализуются колебания с частотой ck и временем затухания 2τ . Это означает, что на малых расстояниях $r \ll \lambda$, где проявляются только колебания атомов, среда ведет себя упругим образом. На гораздо бóльших масштабах $r > \lambda$ начинает сказываться перестройка потенциального рельефа и среда проявляет вязкие свойства (рис. 3.2). Отметим, что масштаб λ играет роль параметра обрезания в известной формуле, определяющей энергию дислокации $E = (\mu a^2/4\pi) \ln(\lambda/a)$ [191]. Температурная зависимость сдвиговой вязкости $\eta = \nu\rho$ обеспечивает изменение величины $\lambda(T)$. Это может привести к вязкоупругому переходу неоднородной среды, характеризуемой мезоскопическим масштабом $L \gg a$. Точка такого превращения фиксируется условием $\lambda(T) = L$.

Переходя к определению потенциального рельефа, введем плотность распределения

$$n(\mathbf{r}, t) = \sum_a \Omega_a \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_a(t)), \quad (3.2)$$

где суммирование проводится по всем атомам a , находящимся в точках $\mathbf{r}_a(t)$ в момент времени t ; Ω_a — объем атома a . Распределение $n(\mathbf{r}, t)$ определяет энергию атомной системы, которая по аналогии с теорией функционала электронной плотности [85] может быть представлена рядом

$$E = E_0 + \int V_1(\mathbf{r})n(\mathbf{r})d^3\mathbf{r} + \frac{1}{2} \int V_2(\mathbf{r}, \mathbf{r}')n(\mathbf{r})n(\mathbf{r}')d^3\mathbf{r}d^3\mathbf{r}' + \dots \quad (3.3)$$

Здесь опущена временная зависимость величин, интегрирование проводится по полному объему системы, ядра V_i , $i = 1, 2, \dots$ представляют потен-

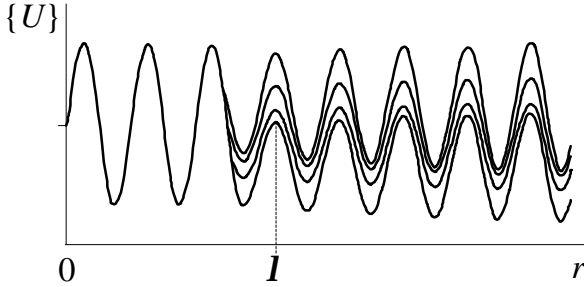


Рисунок 3.2 — Ансамбль потенциальных рельефов, реализуемый за макроскопическое время (λ — граница зоны пластического течения)

циалы i —частичного взаимодействия. В каждый момент времени t потенциальный атомный рельеф определяется равенством

$$\mathcal{U}(\mathbf{r}, t) = \frac{\delta E(t)}{\delta n(\mathbf{r}, t)}. \quad (3.4)$$

Подставляя сюда ряд (3.3), получаем выражение

$$\mathcal{U}(\mathbf{r}, t) = V_1(\mathbf{r}, t) + \int V_2(\mathbf{r}, \mathbf{r}') n(\mathbf{r}', t) d^3 \mathbf{r}' + \dots, \quad (3.5)$$

в котором наличие аргумента t в одночастичном потенциале V_1 обусловлено возможностью изменения внешнего поля. Суммируя бесконечный ряд (3.5) с заданными потенциалами V_i , находим форму рельефа $\mathcal{U}(\mathbf{r}, t)$, задающего распределение $n(\mathbf{r}, t)$. С другой стороны, согласно (3.5) зависимость $\mathcal{U}(\mathbf{r}, t)$ определяется самим распределением $n(\mathbf{r}, t)$, так что рассмотрение следует проводить самосогласованным образом. Решение этой проблемы может быть достигнуто либо использованием теории псевдопотенциала [204], либо методом молекулярной динамики [205]. Оставляя в стороне указанные численные методы, обратимся к определению (3.4).

Как известно, макроскопическое описание подразумевает усреднение по времени t , отвечающему микроскопическим флуктуациям в распределении атомов $n(\mathbf{r}, t)$. Согласно эргодической гипотезе для выполнения этого усреднения следует ввести эффективный ансамбль потенциальных рельефов $\{U(\mathbf{r})\}$, представляющий флуктуирующий рельеф $U(\mathbf{r}, t)$. Каждый из потенциалов, реализующих этот ансамбль, играет роль самосогласованного поля, действующего на пробный атом. Неравновесный характер системы обуславливает медленное изменение усредненных распределений $\langle U(\mathbf{r}) \rangle$, $\langle n(\mathbf{r}) \rangle$ (в металлических стеклах это изменение проявляется как структурная релаксация).

Рассмотрим вид распределения $P\{U(\mathbf{r})\}$ потенциальных рельефов по ансамблю эффективных потенциалов $\{U(\mathbf{r})\}$. Простейшим случаем такого ансамбля является гауссовское распределение

$$P\{U(\mathbf{r})\} \propto \exp\left(-W^{-2} \int [\delta U(\mathbf{r})]^2 d^3r\right), \quad (3.6)$$

где W представляет ширину разброса вблизи среднего рельефа

$$\langle U(\mathbf{r}) \rangle = \int U(\mathbf{r}) P\{U(\mathbf{r})\} DU(\mathbf{r}), \quad (3.7)$$

$\delta U(\mathbf{r}) = U(\mathbf{r}) - \langle U(\mathbf{r}) \rangle$ — соответствующая вариация. Легко видеть, что гауссовский ансамбль реализуется в отсутствие корреляции в стохастическом изменении рельефа. Действительно, используя равенство (3.6), для коррелятора

$$S(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \langle \delta U(\mathbf{r}) \delta U(\mathbf{r}') \rangle \quad (3.8)$$

получаем δ -образное распределение $S(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \propto \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$, отвечающее белому шуму.

Нас интересует, однако, противоположная ситуация, когда вариация потенциального рельефа изменяется когерентным образом. Наиболее популярным примером такого рода является мартенситное превращение, при котором когерентное смещение минимумов потенциала передается самосогласованным образом по объему упругого домена (см. раздел 2.2). В этом случае вариация потенциального рельефа $\delta U(\mathbf{r})$ приобретает дальнедействующий характер, характеризуемый параметром порядка

$$|\Psi(\mathbf{r})|^2 = \lim_{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}| \rightarrow \infty} \frac{S(\mathbf{r}', \mathbf{r})}{S(\mathbf{r}, \mathbf{r})}. \quad (3.9)$$

Будучи комплексным, этот параметр отличен от нуля только при когерентной перестройке потенциального рельефа, в противном случае $\Psi = 0$.

Для определения функционала распределения рельефов $P\{U(\mathbf{r})\}$ будем исходить из предположения, что перестройка потенциального рельефа осуществляется согласно уравнению Ланжевена

$$\dot{\delta U}(\mathbf{r}, t) = \mathcal{F}(\delta U(\mathbf{r}, t)) + \mathcal{R}(\mathbf{r}, t), \quad (3.10)$$

где точка означает дифференцирование по времени t , $\mathcal{F}(\delta U(\mathbf{r}, t))$ представляет регулярную составляющую внешнего воздействия. В линейном приближении она имеет вид

$$\mathcal{F}(\delta U(\mathbf{r}, t)) = \gamma \delta U(\mathbf{r}, t), \quad (3.11)$$

где γ — кинетический коэффициент. Слагаемое $\mathcal{R}(\mathbf{r}, t)$ описывает флуктуационный вклад, задаваемый коррелятором

$$\langle \mathcal{R}(\mathbf{r}, t) \mathcal{R}(\mathbf{r}, t') \rangle = \Theta(\mathbf{r}) \delta(t - t'), \quad (3.12)$$

который характеризуется интенсивностью $\Theta(\mathbf{r})$. В результате плотность распределения $P\{U(\mathbf{r})\}$ описывается уравнением Фоккера—Планка

$$\dot{P}\{U(\mathbf{r})\} + \int \frac{\delta J\{U(\mathbf{r})\}}{\delta U(\mathbf{r})} d\mathbf{r} = 0; \quad (3.13)$$

$$J\{U(\mathbf{r})\} \equiv \mathcal{F}\{U(\mathbf{r})\}P\{U(\mathbf{r})\} - \int \Theta(\mathbf{r}) \frac{\delta P\{U(\mathbf{r})\}}{\delta U(\mathbf{r})} d\mathbf{r}, \quad (3.14)$$

где равенство (3.13) представляет уравнение непрерывности в пространстве потенциалов $\{U(\mathbf{r})\}$, $J\{U(\mathbf{r})\}$ — соответствующий поток, первая компонента которого описывает дрейф, вторая — диффузию. В стационарном состоянии имеем $\dot{P} = 0$, откуда для замкнутой стохастической системы следует условие $J = 0$, приводящее к распределению

$$P\{U(\mathbf{r})\} \propto \exp\left(-\frac{V\{U(\mathbf{r})\}}{\Theta}\right); \quad (3.15)$$

$$\frac{V\{U\}}{\Theta} \equiv - \int \left(\frac{\mathcal{F}\{U(\mathbf{r})\}}{\Theta(\mathbf{r})}\right) DU(\mathbf{r}). \quad (3.16)$$

В линейном приближении (3.11) приходим к зависящему от времени гауссовскому распределению

$$P_t\{U(\mathbf{r})\} = N(\pi W_t)^{-1/2} \exp\left\{-\int \left[\frac{\delta U(\mathbf{r}) - U_t}{W_t}\right]^2 d\mathbf{r}\right\},$$

$$W_t^2 \equiv \frac{\Theta}{\gamma} (1 - e^{-2\gamma t}) + w e^{-2\gamma t}, \quad U_t \equiv u e^{-2\gamma t}, \quad (3.17)$$

где N — полное число атомов; u, w — произвольные константы. Такой случай реализуется при слабом воздействии на атомную систему, когда характерная вариация рельефа достаточно мала ($\delta U \ll \langle U \rangle$). Согласно (3.17) при временах релаксации $t \gg \gamma^{-1}$ распределение рельефов определяется флуктуацией $\delta U = \sqrt{\Theta/\gamma}$ вблизи среднего потенциала $\langle U(\mathbf{r}, t) \rangle$. В общем случае вариация $\delta U(\mathbf{r})$ задается функцией распределения (3.15), вид которой определяется синергетическим потенциалом (3.16). Соответствующие зависимости представлены на рис. 3.3, из которого видно, что минимумы синергетического потенциала V_e (кривая 1) задают максимумы вероятности P_e на кривой 2.

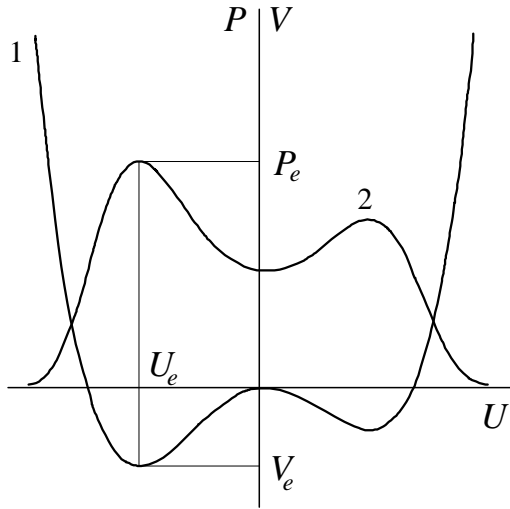


Рисунок 3.3 — Вид синергетического потенциала (кривая 1) и соответствующего распределения атомов (кривая 2) в зависимости от потенциальной энергии атома

В условиях когерентной перестройки рельефа из полного стохастического ансамбля следует выделить подансамбль, который отвечает самоогласованному распределению атомов, определенному параметром (3.9). Проводя выкладки, подобные изложенным, легко видеть, что когерентное распределение задается тем же равенством (3.15), где, однако, синергетический потенциал сводится не к интегралу (3.16), а к некоторой функ-

ции параметра порядка. В простейшем случае эта функция представляется разложением Ландау, используемым в теории фазовых переходов. Макроскопическая неоднородность может быть учтена добавлением градиентного слагаемого, введенного Гинзбургом—Ландау. В результате синергетический потенциал принимает вид

$$V\{\Psi(\mathbf{r})\} = \int \left[\left(\frac{A}{2} |\Psi(\mathbf{r})|^2 + \frac{B}{4} |\Psi(\mathbf{r})|^4 \right) + \frac{\beta}{2} |\nabla \Psi(\mathbf{r})|^2 \right] d\mathbf{r}, \quad (3.18)$$

где $A, B, \beta = \text{const}$ и синергетическая схема сводится к стандартному формализму фазовых переходов [12].

3.1.2 Полевая теория вязкоупругого поведения конденсированной среды

В общем случае материальное поле (3.9) представляется комплексной функцией

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \sigma(\mathbf{r}, t) \exp \{i\phi(\mathbf{r}, t)\}. \quad (3.19)$$

Пространственно—временная зависимость модуля σ и фазы ϕ приводит к появлению нетривиального 4—потенциала материального поля $A_m^\mu = (\varphi_m, \mathbf{a}_m)$, $\mu = 0, 1, 2, 3$, имеющего компоненты

$$\varphi_m = i\Psi^* (\partial/c\partial t) \Psi, \quad \mathbf{a}_m = -i\Psi^* \nabla \Psi, \quad (3.20)$$

где c — характерная скорость звука. Соответствующие напряженности представляются равенствами

$$\chi_m = -\partial \mathbf{a}_m / c\partial t - \text{grad } \varphi_m, \quad \omega_m = \text{rot } \mathbf{a}_m. \quad (3.21)$$

При этом выполняются условия

$$\text{rot } \chi_m + \partial \omega_m / c\partial t = 0, \quad \text{div } \omega_m = 0. \quad (3.22)$$

При замене компонент 4—потенциала

$$\varphi_m \rightarrow \varphi_m - |\Psi|^2 (\partial\phi/c\partial t), \quad \mathbf{a}_m \rightarrow \mathbf{a}_m + |\Psi|^2 \nabla \phi, \quad (3.23)$$

не изменяющей напряженностей (3.21), калибровочная инвариантность обеспечивается, если фаза получает некоторое приращение $d\phi$. Записывая

$$d\phi \equiv e d\alpha, \quad d\alpha \equiv \frac{2\pi}{\Omega} \mathbf{a}_m d\mathbf{r}, \quad (3.24)$$

где введены постоянные e, Ω , после использования теоремы Стокса для потока $\Phi_m^\omega = \int \omega_m d\mathbf{s}$, где \mathbf{s} — площадь, пересекаемая вектором ω_m , из условия цикличности фазы ϕ получаем правило квантования

$$\Phi_m^\omega = n \Phi_1^\omega, \quad \Phi_1^\omega \equiv \frac{\Omega}{e}, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (3.25)$$

Подобным образом, полагая

$$d\phi = e d\alpha, \quad d\alpha = \frac{2\pi}{b} \operatorname{div} \mathbf{a}_m d^3\mathbf{r}, \quad (3.26)$$

для потока $\Phi_m^a = \int \mathbf{a}_m d\mathbf{s}$ с использованием теоремы Гаусса имеем

$$\Phi_m^a = n \Phi_1^a, \quad \Phi_1^a \equiv \frac{b}{e}, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (3.27)$$

Физически условия (3.25), (3.27) означают, что полный поток Φ_m векторов ω_m, \mathbf{a}_m кратен элементарному потоку Φ_1 , отвечающему сингулярности распределения параметра порядка.¹⁾ Исследование условий (3.25), (3.27) показывает, что константы e, Ω, b представляют упругий заряд и элементарные значения поворота и сдвига соответственно [54]. Физически элементарный поток Φ_1 отвечает единичному дефекту, который определяет интенсивность минимального акта пластической деформации.

Представленная схема описывает материальное поле $\Psi(\mathbf{r}, t)$ по аналогии с электродинамикой [35], [206] — [208]. Очевидно, подобным образом можно представить и упругую составляющую. В рамках такого представления 4-потенциал упругого поля $A_e^\mu = (\varphi_e, \mathbf{a}_e)$ определяется компонентами бозе-конденсата фононов

$$A_e^\mu(\mathbf{r}, t) = \sum_{\sigma=1}^3 A_e^{\mu(\sigma)}(\mathbf{r}, t), \quad A_e^{\mu(\sigma)}(\mathbf{r}, t) \propto \operatorname{Re} \left[\eta^\sigma(\mathbf{r}, t) e^{\mu(\sigma)} \right]. \quad (3.28)$$

Здесь индекс σ отвечает одной из трех возможных поляризаций упругого поля, компоненты комплексных векторов $e^{\mu(\sigma)}$ удовлетворяют условию нормировки $e^{\mu(\sigma)*} e^{\mu(\sigma)} = -1$ (благодаря независимости поляризаций далее

¹⁾Условие (3.25) верно только в отсутствие сдвиговой компоненты χ_m . Придавая равенству (3.24) ковариантную форму $d\alpha = -(2\pi/\Omega) A_m^\mu d\chi_\mu$, легко заметить, что в (3.25) поток Φ_m^χ вектора сдвига должен быть вычтен из потока Φ_m^ω вектора поворота.

индекс σ можно не писать). Компоненты упругого поля φ_e, \mathbf{a}_e подчиняются условию калибровки

$$\partial\varphi_e/c\partial t + \operatorname{div} \mathbf{a}_e = 0. \quad (3.29)$$

Напряженность упругого поля задается векторами упругого сдвига χ_e и поворота ω_e , которые выражаются через соответствующие компоненты потенциала φ_e, \mathbf{a}_e равенствами типа (3.21). Сумма упругой и материальной составляющих дает полные векторы сдвига и поворота:

$$\chi = \chi_e + \chi_m, \quad \omega = \omega_e + \omega_m. \quad (3.30)$$

Здесь напряженности χ, ω выражаются через компоненты полного 4–потенциала $A^\mu = (\varphi, \mathbf{a})$ равенствами

$$\chi = -\partial\mathbf{a}/c\partial t - \operatorname{grad} \varphi, \quad \omega = \operatorname{rot} \mathbf{a}, \quad (3.31)$$

которые автоматически подчиняются условию калибровки типа (3.29). Если имеются свободные дефекты кристалла, обладающие плотностью ρ и потоком \mathbf{j} , то они характеризуются 4–током

$$j^\mu = (c\rho, \mathbf{j}); \quad \partial_\mu j^\mu = 0, \quad \partial_\mu = (\partial/c\partial t, \nabla). \quad (3.32)$$

При этом поведение упругого поля определяется уравнениями эластодинамики [11]:

$$\begin{aligned} \operatorname{div} \chi_e &= \rho, & \operatorname{rot} \omega_e &= \partial\chi_e/c\partial t + \mathbf{j}/c, \\ \operatorname{rot} \chi &= -\partial\omega/c\partial t, & \operatorname{div} \omega &= 0. \end{aligned} \quad (3.33)$$

Согласно определениям (3.21), (3.31) полный потенциал может быть представлен в виде

$$\varphi = \varphi_e + \varphi_m, \quad \mathbf{a} = \mathbf{a}_e + \mathbf{a}_m, \quad (3.34)$$

подобном (3.30). Однако, если напряженности поля определены однозначно, изменения (3.23) материальных компонент поля φ_m, \mathbf{a}_m с вариацией фазы $d\phi$ должны приводить к изменению полного 4–потенциала $A^\mu = (\varphi, \mathbf{a})$. Будучи основой теории калибровочных полей [35], [206] — [208], это обстоятельство означает, что одновременная замена материального поля Ψ , 4–потенциала калибровочного поля A^μ и 4–производной $\partial_\mu = (\partial/c\partial t, \nabla)$

$$\Psi \rightarrow \Psi e^{ie\alpha}, \quad A^\mu \rightarrow A^\mu + \partial^\mu \alpha, \quad \partial_\mu \rightarrow D_\mu \equiv \partial_\mu - ieA_\mu \quad (3.35)$$

не меняет физической ситуации. Указанный тип калибровочной инвариантности, определяемый преобразованиями группы $U(1)$, наблюдается в сверхпроводимости, где эффективный заряд e связан с элементарным электрическим зарядом e_1 равенством $e = 2e_1/\hbar c$, \hbar — постоянна Планка—Дирака; c — скорость света. Подобная ситуация наблюдается в сверхтекучем гелии, где заряд $e = m/\hbar$ (m — масса атома He^4) определяет поле сверхтекучей компоненты скорости [209]. В случае вязкоупругой среды пространственная компонента 4—потенциала калибровочного поля представляет либо вектор смещения, либо скорость пластического течения; заряд e характеризует взаимодействие упругого поля с сингулярностью материального поля $\Psi(\mathbf{r})$, представляющей дефект регулярного распределения атомов (см. ниже). Характерно, что для всех упомянутых случаев заряд e обратно пропорционален элементарному потоку Φ_1 (см. равенства (3.25), (3.27)), который характеризует сингулярность в распределении поля $\Psi(\mathbf{r})$.

В ковариантном представлении компоненты χ_e, ω_e образуют асимметричный 4—тензор напряженности упругого поля $F_e^{\mu\nu} = (\chi_e, \omega_e)$. Соответственно для материальных компонент имеем 4—тензор упругой поляризации среды $F_m^{\mu\nu} = (\chi_m, \omega_m)$. Полный тензор

$$F^{\mu\nu} \equiv F_e^{\mu\nu} + F_m^{\mu\nu} = (\chi, \omega) \quad (3.36)$$

выражается через 4—потенциал $A^\mu = (\varphi, \mathbf{a})$ обычным образом [206]:

$$F^{\mu\nu} = \partial^\mu A^\nu - \partial^\nu A^\mu. \quad (3.37)$$

Тогда уравнения (3.33) принимают ковариантный вид

$$\partial_\mu F_e^{\nu\mu} = -j^\nu/c, \quad \partial^\lambda F_e^{\mu\nu} + \partial^\nu F_e^{\lambda\mu} + \partial^\mu F_e^{\nu\lambda} = 0. \quad (3.38)$$

Если последнее из выражений (3.38) представляет тождество, то первое вытекает из лагранжиана [11]:

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_f &= \mathcal{L}_0 + \mathcal{L}_1, \\ \mathcal{L}_0 &= \frac{1}{4} F_{\mu\nu}^{(e)} F_e^{\mu\nu} - \frac{1}{2} F_{\mu\nu}^{(e)} (\partial^\mu A^\nu - \partial^\nu A^\mu), \\ \mathcal{L}_1 &= \frac{1}{2} F_{\mu\nu}^{(e)} F_m^{\mu\nu} - \frac{1}{c} A^\mu j_\mu. \end{aligned} \quad (3.39)$$

Здесь и далее величины \mathcal{L} измерены в единицах ρc^2 , а вариации полей A^μ , $F_e^{\mu\nu}$ рассмотрены как независимые. При заданных внешних полях $\chi_e^{\text{ext}}, \omega_e^{\text{ext}}$

величина $F_e^{\mu\nu} = (\chi_e, \omega_e)$ фиксирована, и перед выполнением вариационной процедуры следует провести преобразование Лежандра, дающее сопряженный лагранжиан $\tilde{\mathcal{L}}_f = \mathcal{L}_f + (1/2)F^{\mu\nu}F_{\mu\nu}^{(e)}$, где поле $F_{\mu\nu}^{(e)} = F_{\mu\nu}^{\text{ext}}$ задается внешними условиями. Из получающегося выражения

$$\tilde{\mathcal{L}}_f = \frac{1}{4}(\partial^\mu A^\nu - \partial^\nu A^\mu)^2 - \frac{1}{c}A^\mu j_\mu, \quad (3.40)$$

в котором опущены несущественные слагаемые, видно, что варьирование должно проводиться только по распределению потенциала $A^\mu(\mathbf{r}, t)$.

Кроме полевого вклада (3.40), полный лагранжиан

$$\mathcal{L} = \mathcal{L}_f + \mathcal{L}_g - V \quad (3.41)$$

содержит градиентное слагаемое

$$\mathcal{L}_g = \frac{\beta}{2}|D_\mu\Psi|^2, \quad D_\mu \equiv \partial_\mu - ieA_\mu, \quad \beta > 0 \quad (3.42)$$

и синергетический потенциал, измеренный в единицах ρc^2 (ср. с (3.18)),

$$V = \frac{a}{2}|\Psi|^2 + \frac{b}{4}|\Psi|^4, \quad a \equiv \frac{A}{\rho c^2}, \quad b \equiv \frac{B}{\rho c^2}, \quad (3.43)$$

где A, B — параметры разложения Ландау. Кроме того, для учета релаксационного характера эволюции системы следует ввести диссипативную функцию [12]:

$$\mathcal{R} = \frac{1}{2\gamma}|\dot{\Psi}|^2, \quad \gamma > 0, \quad (3.44)$$

где γ — кинетический коэффициент. Тогда использование равенств (3.41) — (3.44) в общей записи уравнений Эйлера [12]:

$$\partial_\mu \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_{a,\mu}} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_a} = -\frac{\partial \mathcal{R}}{\partial \dot{q}_a}, \quad (3.45)$$

где $q_a \equiv (A_\mu, \Psi)$; $q_{a,\mu} \equiv \partial_\mu q_a$, приводит к выражениям

$$-\gamma^{-1}\dot{\Psi} + \beta\Box\Psi = (a - \beta e^2 A_\mu A^\mu)\Psi + b|\Psi|^2\Psi; \quad (3.46)$$

$$\Box A^\mu = -c^{-1}j_{\text{tot}}^\mu, \quad (3.47)$$

где $\Box \equiv -\partial_\mu \partial^\mu = \nabla^2 - \partial^2/c^2 \partial_t^2$. Полный поток

$$j_{\text{tot}}^\mu \equiv j^\mu + j_m^\mu + j_f^\mu \quad (3.48)$$

состоит из трех составляющих: слагаемого j^μ , обусловленного внешним воздействием, материальной составляющей

$$j_m^\mu = \frac{i}{2} \beta e c (\Psi \partial^\mu \Psi^* - \Psi^* \partial^\mu \Psi), \quad (3.49)$$

полевого вклада

$$j_f^\mu = -\beta e^2 c |\Psi|^2 A^\mu. \quad (3.50)$$

В стационарных условиях, когда $\dot{\Psi} = 0$, $\square \Psi = 0$, $a < 0$, модуль параметра порядка принимает значение

$$\Psi_e = \left(1 - \frac{\beta e^2}{a} A_\mu A^\mu\right)^{1/2} \Psi_0, \quad \Psi_0^2 \equiv \frac{|a|}{b}. \quad (3.51)$$

При заданном распределении $\Psi(\mathbf{r}, t)$ в отсутствие внешних источников ($j^\mu = 0$) упругое поле описывается уравнением

$$\square A^\mu = \beta e^2 |\Psi|^2 A^\mu. \quad (3.52)$$

Отсюда видно, что в разупорядоченном состоянии $\Psi = 0$, отвечающем идеальной упругой среде, реализуется однородное распределение напряженности поля. В вязкоупругой среде имеем $\Psi \neq 0$ и упругое поле изменяется на характерной длине

$$\lambda \equiv \frac{1}{\beta^{1/2} e \Psi_0} = \frac{1}{e} \left(\frac{b}{|a|\beta} \right)^{1/2}. \quad (3.53)$$

Сравнивая это равенство с выражением $\lambda = \nu/c$, полученным в предыдущем подразделе при исследовании фононного спектра вязкоупругой среды, приходим к определению упругого заряда:

$$e \equiv \frac{c}{\nu \beta^{1/2} \Psi_0} = \frac{1}{\eta} \sqrt{\frac{\mu \rho b}{\beta |a|}}, \quad (3.54)$$

где $\nu \equiv \eta/\rho$ — кинематическая вязкость; $c \equiv \sqrt{\mu/\rho}$ — скорость звука. Корреляционная длина определяется равенством

$$\xi^2 = \frac{\beta}{|a|}, \quad (3.55)$$

и для отношения характерных масштабов получаем

$$\kappa \equiv \frac{\lambda}{\xi} = \left(\frac{b}{e\beta} \right)^{1/2} = \sqrt{\eta} \left(\frac{|a|b}{\beta\mu\rho} \right)^{1/4}. \quad (3.56)$$

При анализе уравнений (3.46), (3.52) удобно использовать безразмерные переменные, относя координату \mathbf{r} к масштабу λ , время t к λ/c , величину Ψ к Ψ_0 , потенциал A^μ к масштабу $(e\xi)^{-1}$. В результате получаем систему

$$-\theta^{-1}\dot{\psi} + \kappa^{-2}\square\psi = -(1 + A_\mu A^\mu)\psi + |\psi|^2\psi; \quad (3.57)$$

$$\square A^\mu = |\psi|^2 A^\mu, \quad (3.58)$$

где обозначено $\psi \equiv \Psi/\Psi_0$ и введено отношение характерных времен $\tau \equiv \eta/\mu$, $T \equiv (\gamma|a|)^{-1}$:

$$\theta \equiv \frac{\lambda\gamma|a|}{c} = \frac{\gamma}{ec} \left(\frac{|a|b}{\beta} \right)^{1/2} = \frac{\gamma\eta|a|}{\mu} \equiv \frac{\tau}{T}. \quad (3.59)$$

Согласно условию калибровки $\partial_\mu A^\mu = 0$ в статическом случае, когда отсутствует временная зависимость, пространственная компонента 4-потенциала A^μ отвечает чисто поперечному вектору \mathbf{a} ($\operatorname{div} \mathbf{a} = 0$), и для временной компоненты можно положить $\varphi = 0$. Такая ситуация реализуется, когда внешнее поле представляет чистый поворот ω_{ext} . В этом случае при $\kappa > 2^{-1/2}$ распределение поля сводится к двумерному солитону Гросса–Питаевского [210]. Он характеризуется наличием провала параметра порядка $\Psi(\mathbf{r})$ в области $r \sim \xi$ и локализацией калибровочного поля A^μ на гораздо больших масштабах $r \sim \lambda$.

Согласно определению (3.31) в случае чисто сдвиговой нагрузки χ_{ext} возможны следующие ситуации:

- временная зависимость 4-потенциала A^μ отсутствует, а пространственные компоненты, сводящиеся к поперечному вектору \mathbf{a} , могут быть положены равными нулю (по аналогии с электродинамикой здесь описание дается пространственной зависимостью $\varphi(\mathbf{r})$ скалярного потенциала);
- векторный потенциал \mathbf{a} изменяется со временем, а скалярный $\varphi = 0$.

Исследуем сначала случай эластостатики $\mathbf{a} = 0$, $\varphi = \varphi(\mathbf{r})$, когда в уравнениях (3.57), (3.58) имеем $\square = \nabla^2$, $A_\mu = (\varphi, \mathbf{0})$, $A^\mu A_\mu = \varphi^2$. Полученная система в корне отличается от соответствующих уравнений Гинзбурга–Ландау [209] обратным знаком перед полевым вкладом $A^\mu A_\mu = \varphi^2$, стоящим перед Ψ . При линеаризации равенства (3.57) получаем выражение типа уравнения Шредингера с параболическим потенциалом. Если парабола

вогнута, то при условии $\kappa \geq 2^{-1/2}$, отвечающем появлению первого энергетического уровня, возникает осцилляционное решение [209]. Однако в нашем случае парабола выпукла и при больших "энергиях" κ , когда влиянием потенциального барьера можно пренебречь, решение системы (3.57), (3.58) имеет практически однородный характер. Очевидно, такая ситуация реализуется в хрупких материалах. В вязкоупругой среде "энергия" κ настолько мала, что наличие барьера становится существенным и стационарное решение принимает форму темного солитона [210]: вдали от начала координат потенциал $\varphi(\mathbf{r})$ и параметр порядка $\Psi(\mathbf{r})$ практически постоянны, а с приближением к нему потенциал $\varphi(\mathbf{r})$ испытывает провал на расстояниях порядка глубины проникновения λ , а параметр порядка $\Psi(\mathbf{r})$ изменяется на гораздо больших длинах $\xi = \lambda/\kappa \gg \lambda$. Поскольку одномерное распределение такого типа имеет наименьшую энергию [210], можно заключить, что полученное солитоноподобное распределение отвечает границе зерна (блока), упругая энергия которых задается полем $\varphi(\mathbf{r})$ и локализована в малой области размером λ ; параметр кристаллического порядка $\Psi(\mathbf{r})$ достигает максимума на гораздо больших длинах ξ . Используя аргументацию типа изложенной в §46 книги [73], можно показать, что эффективная поверхностная энергия такой границы всегда положительна. В сравнении со случаем $\kappa > 2^{-1/2}$, где рождение солитона Гросса—Питаевского обусловлено отрицательной энергией, приводящей к устойчивой периодической структуре (смешанному состоянию) [209], проведенный анализ показывает, что границы зерен и блоков являются неустойчивыми и не могут образовывать равновесную пространственную структуру типа смешанного состояния.

Переходя к анализу второго из указанных случаев, когда $\varphi=0$, $\mathbf{a}=\mathbf{a}(\mathbf{r}, t)$, отметим, что здесь векторный потенциал \mathbf{a} является чисто поперечным ($\text{div } \mathbf{a} = \partial\varphi/c\partial t = 0$), а сдвиговая напряженность $\chi = -\partial\mathbf{a}/c\partial t$ обусловлена временной зависимостью векторного потенциала. При этом знак перед слагаемым $A^\mu A_\mu = -\mathbf{a}^2$ совпадает с наблюдающимся в случае сверхпроводника, помещенного в магнитное поле. В результате анализ вязкоупругого поведения конденсированной среды сводится к стандартному исследованию схемы Гинзбурга—Ландау [209]. Так оказывается, что устойчивое смешанное состояние может быть реализовано только в хрупких материалах, где выполняется условие $\kappa \geq 2^{-1/2}$. Поскольку вектор сдвига χ является полярным, а не аксиальным, то в отличие от структуры, появляющейся в поле поворота ω_{ext} , это состояние имеет планарную симметрию. Образующаяся в результате ламинарная структура представляет чередование неупорядоченных областей размером $x \sim \xi$ и упорядоченных протяженностью $x \geq \lambda$; в окрестности неупорядоченных областей $x \sim \lambda$ вели-

чина смещения имеет намного большее значение, чем на периферии (в центре упорядоченной фазы). Легко видеть, что такая структура представляет области экструзии и интрузии, возникающие под действием скальвающих полей.

Исследование полной картины показывает [54], что в рамках калибровочной теории, отвечающей группе $U(1)$, представляются возможными два типа цилиндрических солитонов. Первый из них является носителем сдвиговой компоненты поля, а упругие напряжения изменяются как r^{-1} ; естественно положить, что такое решение отвечает краевой дислокации. Солитон второго типа служит носителем компоненты поворота, где упругое поле изменяется как $\ln r$, очевидно, он представляет дисклинацию. В этой связи интересно отметить, что точечный дефект, кажущийся на первый взгляд наиболее простым, требует использования нетривиального аппарата, отвечающего неабелевой группе $SU(2)$. Благодаря некоммутативности преобразований этой группы материальное поле приобретает две компоненты, а в определении напряженности упругого поля (3.37) появляются слагаемые, нелинейные по потенциалу A_μ . В результате точечный дефект представляется автолокализованным образованием, так называемым ежом Полякова, стабилизация которого имеет существенно нелинейную природу.

Из всего набора возможных стационарных решений полевых уравнений (3.57), (3.58) мы ограничились исследованием равновесных структур, возникающих в упруговязкой среде. Как известно, кроме них, стационарными являются также решения, отвечающие постоянным скоростям пластического течения, при котором атомы безактивационно дрейфуют во внешнем поле сдвига—кручения. При этом 4—потенциал A^μ играет роль упругой составляющей скорости смещений среды, а напряженности χ_e, ω_e сводятся к упругим компонентам скорости сдвига—кручения. Тогда уравнение (3.58) означает, что перестройка атомной системы, характеризуемая конечным значением параметра порядка ψ , приводит к локализации течения среды, помещенной во внешнее поле сдвига—кручения, вне области размером $\lambda \propto \nu$, фиксируемым кинематической вязкостью $\nu \equiv \eta/\rho$. В идеальной упругой среде, где $\eta = \infty$, имеем $\lambda = \infty$, и поле пластического течения полностью выталкивается из образца. С уменьшением сдвиговой вязкости $\eta < \infty$ глубина проникновения этого поля спадает и любая неоднородность атомной структуры размывается пластическим течением среды. С физической точки зрения такая ситуация подобна эффекту Мейснера в сверхпроводниках, где сверхпроводящий ток экранирует магнитное поле [209].

Характер распределения материального поля $\psi(r, t)$ и скорости течения $A^\mu(r, t)$ определяются отношением масштабов (3.56), которое прини-

мает вид

$$\kappa = \frac{\nu}{c\xi}. \quad (3.60)$$

В условиях сверхпластичного течения интенсивность внешнего воздействия обеспечивает столь малые значения сдвиговой вязкости ν , что реализуется условие $\kappa \ll 1$ и устойчивы только однородные структуры. В неоднородных условиях параметр ψ изменяется на расстояниях ξ , намного превышающих масштаб λ изменения скорости течения A^μ . При этом сверхпластичность среды обеспечивает быстрое изменение скорости в соответствии с плавной перестройкой атомной подсистемы. Такая ситуация реализуется, очевидно, в поле ударной волны [211]. Другим примером является полоса Людерса [200], представляющая зарождение и рост сверхпластичной фазы по механизму превращения первого рода.

3.2 Коллективное поведение дислокационно–вакансионного ансамбля в локализованной зоне пластической деформации

Как указывалось выше, возможны два режима поведения ансамбля дефектов в процессе пластической деформации. При слабом внешнем воздействии, когда плотность дефектов невелика, они осуществляют процесс пластического течения автономно, перемещаясь под действием внешнего поля и сил взаимодействия между ними [65], [197]. В интенсивных полях плотность дефектов может приобретать настолько большие значения, что следует говорить не об их ансамбле, а о гидродинамической моде, представляющей самосогласованное поведение когерентно связанных дефектов. Настоящий раздел посвящен исследованию перехода из одного режима в другой. Для наглядности мы рассматриваем деформацию высокопрочного сплава, обладающего малыми выделениями неметаллической фазы, под действием интенсивного поля внешних напряжений [212]. Будет показано, что при наличии двух типов дефектов (дислокаций и вакансий) рост внешних напряжений приводит к их автокаталитическому размножению с последующим переходом в когерентный режим.

Экспериментальное исследование таких систем обнаруживает следующие особенности процесса пластического течения [213] — [217]:

- Формируются субструктуры с высокой кривизной кристаллической решетки, обусловленной значительной зарядовой плотностью дислокаций и свидетельствующей о наличии больших внутренних напряжений и их градиентов [214, 215].
- При повышенных температурах наблюдается интенсивная локализация пластического течения на начальной стадии деформации [213], [215] — [217].
- Активно развиваются ротационные моды деформации и формируются новые субструктурные образования: высоко- и малоугловые границы деформационного происхождения с изменяющимися векторами разориентировок [214]; границы деформационного происхождения, образуемые путем вакансионного массопереноса в полях высоких неоднородных напряжений [217]; полосы микросброса с углами переориентации от десятков минут до десятков градусов и специфической внутренней микроструктурой (аномально высокой кривизной кристаллической решетки [213, 215] и ультрадисперсной разориентированной структурой с размерами фрагментов от нанометров до долей микрона [216, 217]).

Указанные особенности связаны с влиянием неравновесных вакансий, генерируемых при деформации: с одной стороны, они существенно облегчают скольжение дислокаций, а с другой — сами дают вклад в пластическую деформацию и определяют микромеханизмы переориентации кристаллической решетки [217]. Принципиально важным является самосогласованный характер поведения ансамбля движущихся дислокаций и вакансий — обусловленное вакансиями облегчение процесса локального переползания дислокаций приводит к усилению их генерации движущимися дислокациями. Автокаталитический характер такого процесса может привести к развитию ротационно—сдвиговой неустойчивости пластического течения (например, при образовании полос микросброса [215] — [217]).

При теоретическом исследовании указанных особенностей представляются возможными два подхода. Первый основывается на рассмотрении микромеханизмов дислокационно—вакансионного взаимодействия, включающих процессы генерации и размножения вакансий и дислокаций, их аннигиляции и поглощения стоками, которые определяются особенностями микроструктуры сплавов, условиями деформации и т. д. Несмотря на наглядность и предсказательность такого подхода, он основывается на конкретных механизмах, а это может привести к недооценке наиболее существенных из них и излишней детализации несущественных. В результа-

те усложняется математическая схема и могут возникнуть непреодолимые формальные трудности. В рамках второго подхода, имеющего феноменологический характер, используется определенный алгоритм, позволяющий найти структуру уравнений движения для основных величин, характеризующих поведение системы. Очевидные недостатки такого подхода вытекают из недооценки микромеханизмов явления и заключаются в трудности отбора физических параметров, влияющих на поведение системы (параметров микроструктуры материала, условий деформации и т. д.).

Наиболее привлекательным представляется комплексный метод, когда основные уравнения выводятся феноменологически, а затем каждое их составляемое представляется в рамках микроскопических представлений. В результате коэффициенты феноменологических уравнений выражаются через параметры структуры и условия пластической деформации. Такой подход использован в подразделе 3.2.1 для вывода уравнений дислокационно-диффузионной кинетики на начальной стадии развития зоны локализации деформации в дисперсно-упрочненном сплаве. При необходимости можно провести обобщение развитой картины на случай взаимодействия дислокаций с другими типами точечных дефектов (междоузельных атомов, бивакансий и т. д.).

Анализ полученных уравнений выполнен в подразделе 3.2.2. На его основе найдены условия бифуркации, отвечающей качественному изменению поведения дислокационно-вакансионного ансамбля. Эти условия определяют критические значения параметров структуры и условия пластической деформации, обеспечивающие изменение режима поведения дефектов. На основе экспериментальных данных [215, 217] проведен качественный анализ поведения дислокационно-вакансионного ансамбля в высокопрочном ниобиевом сплаве с малыми частицами второй фазы. Показана определяющая роль сдвиговых напряжений в потере структурной устойчивости системы, проведены оценки критических плотностей дефектов в момент потери устойчивости.

По мере развития зоны локализованной деформации может реализоваться режим, в котором необходимо учитывать процессы релаксации напряжений, требующие рассмотрения не только кинетики эволюции ансамбля дефектов, но и связанной с ней динамической задачи. Такой режим наступает при больших плотностях дефектов, когда установление когерентной связи между ними приводит к коллективным эффектам, не позволяющим рассматривать дислокации и вакансии обычным образом. Для адекватного описания этой стадии следует использовать синергетический подход, определяющий временные зависимости плотности когерентно связан-

ных носителей деформации, напряжения и деформации. Такой подход развит в подразделе 3.2.3, где найдены феноменологические уравнения динамики с учетом временной и пространственной зависимостей (последняя позволяет оценить ширину полосы локализованной деформации).

3.2.1 Вывод уравнений дислокационно–диффузионной кинетики

Согласно механизму потери устойчивости, предложенному в [217], пластическая деформация среды ε в зонах локализованной деформации обеспечивается взаимно связанной эволюцией ансамбля подвижных дислокаций плотностью ρ и неравновесных вакансий концентрацией n . Для определения временных зависимостей $\rho(t)$, $n(t)$ запишем уравнения движения $\dot{\rho} = f(\rho, n)$, $\dot{n} = g(n, \rho)$, связывающие скорости $\dot{\rho}(t) = d\rho/dt$, $\dot{n}(t) = dn/dt$ изменения величин ρ , n с их значениями посредством функций $f(\rho, n)$, $g(n, \rho)$, подлежащих определению. Представим эти функции первыми членами рядов по величинам ρ и n с положительными коэффициентами:

$$\dot{\rho} = f(\rho, n) \simeq \mathcal{A}_0 + \mathcal{A}\rho + \mathcal{A}_1n - \mathcal{B}\rho^2 + \mathcal{B}_1n^2 + \mathcal{C}\rho n; \quad (3.61)$$

$$\dot{n} = g(n, \rho) \simeq \mathcal{D}_0 - \mathcal{D}n + \mathcal{E}\rho + \mathcal{F}_1n^2 + \mathcal{F}_2\rho^2 + \mathcal{F}n\rho. \quad (3.62)$$

Здесь мы ограничились квадратичными членами, которые простейшим образом учитывают взаимное влияние дислокаций и вакансий. Слагаемое \mathcal{A}_0 характеризует интенсивность источников дислокаций типа источников Франка–Рида, уступов на границах зерен и т. д. [189]. Источники дислокационного типа описываются слагаемым $\mathcal{A}\rho$, где выбор коэффициента $\mathcal{A} > 0$ отражает факт роста плотности дислокаций в процессе деформации. Квадратичное слагаемое $-\mathcal{B}\rho^2$ учитывает процессы аннигиляции дислокаций. Положительный член $\mathcal{C}\rho n$ описывает размножение дислокаций за счет их взаимодействия с вакансиями. Слагаемые \mathcal{A}_1n , \mathcal{B}_1n^2 можно опустить ввиду пренебрежимости процессов превращения одиночных вакансий и их комплексов в подвижные дислокации. Константа \mathcal{D}_0 характеризует интенсивность недислокационных источников вакансий. Уменьшение плотности вакансий в результате их поглощения стоками постоянной мощности определяет выбор знака перед вторым слагаемым в (3.62). Слагаемое $\mathcal{E}\rho$ учитывает рождение вакансий подвижными дислокациями. Вклад \mathcal{F}_1n^2 , отражающий размножение вакансий при их столкновениях, должен быть опущен как нереальный. На начальных стадиях деформации ($\varepsilon \leq 0.5$) может быть

опущено и слагаемое $\mathcal{F}_2\rho^2$, описывающее образование вакансий при аннигиляции краевых дислокаций противоположного знака при их скольжении по соседним плоскостям [189].

Принципиальное значение имеет знак перед последним слагаемым в (3.62). Автокаталитический режим размножения подвижных дислокаций и вакансий требует, чтобы перекрестные слагаемые $\mathcal{C}\rho n$, $\mathcal{F}\rho n$ имели положительные знаки, означающие положительную обратную связь между дефектами. При различных знаках перекрестных членов режим автокаталитического роста сменяется выходом на насыщение, и решения уравнений (3.61), (3.62) представляются фокусом в фазовой плоскости $\rho - n$ (см. раздел 3.3). Знак слагаемого $\mathcal{F}\rho n$ в (3.62) определяется конкуренцией поглощения вакансий краевыми дислокациями, с одной стороны, и генерации вакансий, обусловленной взаимодействием дефектов, — с другой. Экспериментальные условия образования полос локализованной деформации [215] — [217] таковы, что преобладает второй механизм и обратная связь является положительной.

Для выражения коэффициентов в уравнениях (3.61), (3.62) через напряжения, температуру и параметры структуры представим процесс пластического течения в зоне локализации дисперсно-упрочненного сплава в рамках модели расширяющейся дислокационной петли, преодолевающей барьер в виде частицы второй фазы (см. рис. 3.4).

Пренебрегая размножением дислокаций на источниках Франка—Рида [195] и на границах зерен, слагаемое \mathcal{A}_0 в (3.61) можно опустить, тем более, что оно не меняет вид решения. Тогда увеличение плотности дислокаций пропорционально плотностям потоков краевых $j_e = \rho_e v_e$ и винтовых $j_s = \rho_s v_s$ дислокаций, дающим вклад в суммарный поток $j = j_e + j_s$ [218]:

$$\dot{\rho} = \delta_e \rho_e v_e + \delta_s \rho_s v_s. \quad (3.63)$$

Коэффициенты δ_e^{-1} , δ_s^{-1} имеют смысл расстояний, проходимых соответствующими дислокациями между актами их размножения [195]. В сплаве с дисперсными недеформируемыми частицами эти расстояния имеют порядок межчастичных: $\delta_e^{-1} \sim \delta_s^{-1} \sim \lambda$.

Для винтовых дислокаций, преодолевающих частицы по механизму Орована или поперечным скольжением, предполагаем, что при постоянном напряжении их средняя скорость также постоянна: $v_s \simeq \text{const}$. Краевые дислокации могут преодолевать дисперсные частицы путем локального климба [219], обусловленного уменьшением химического потенциала вакансий за счет локализации напряжений вблизи частиц. Возникающий в результате дрейф вакансий к дислокационному участку, прижатому к части-

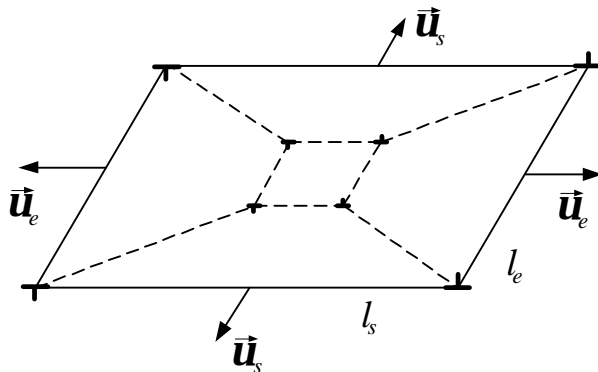


Рисунок 3.4 — Схема расширяющейся дислокационной петли, состоящей из краевых l_e и винтовых l_s сегментов,двигающихся со скоростями \vec{v}_e и \vec{v}_s

це, растворяет экстраплоскость дислокации, позволяя ей преодолеть барьер без колец Орована (рис. 3.5а). При этом скорость краевых дислокаций будет зависеть не только от напряжений и температуры, но и от плотности вакансий. Вывод соответствующей зависимости (3.80) приводит к задаче, решение которой удобно отложить на конец этого подраздела.

Считая, что на начальных этапах концентрация вакансий n намного ниже критического значения n_c , воспользуемся линейной аппроксимацией указанной зависимости (3.80):

$$v_e = (\lambda/t_c)n, \quad t_c \equiv (hb/D_v) \exp(-\sigma b^3/T), \quad (3.64)$$

где D_v — коэффициент диффузии вакансий; σ — напряжение сжатия, действующее на дислокацию около частицы; b — величина вектора Бюргерса; T — температура в энергетических единицах; h — высота препятствия, имеющая порядок размера частицы. Тогда зависимость (3.63) можно пере-

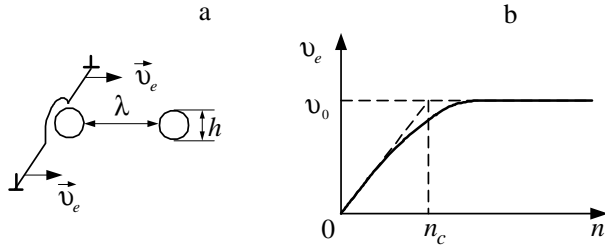


Рисунок 3.5: а — схема преодоления дисперсной частицы краевой дислокацией при локальном климбе; б — зависимость скорости скольжения краевых дислокаций от концентрации вакансий при постоянных напряжениях

писать в виде

$$\dot{\rho} = \frac{\omega_s v_s}{\lambda} \rho + \frac{\omega_e}{t_c} \rho n, \quad (3.65)$$

где ω_s, ω_e — доли винтовых и краевых дислокаций, которые можно считать постоянными ($\omega_s + \omega_e = 1$). Поскольку в ОЦК металлах подвижность винтовых дислокаций существенно ниже, чем краевых, то $\omega_s \gg \omega_e$ [220]. Тогда сравнение (3.65) с (3.61) дает коэффициенты

$$\mathcal{A} = \omega_s (v_s / \lambda); \quad (3.66)$$

$$\mathcal{C} = \omega_e / t_c = (\omega_e D_v / hb) \exp(\sigma b^3 / T). \quad (3.67)$$

Интенсивность аннигиляции дислокаций определяется вкладами процессов сближения дислокаций противоположного знака, в результате которых дипольные конфигурации образуются путем поперечного скольжения (в случае винтовой компоненты) или переползания (для краевой). Скорость $\dot{\rho}$ первого процесса оценивается как $2v_s l_a \omega_s^2 \rho^2$, где $l_a = \mu b / 2\pi\tau_0$ [218], τ_0 — предел текучести; μ — модуль сдвига. Для второго она составляет $\sim 10^{-2} \omega_e^2 (\mu / \tau_f) D_v \rho^2 n$ [221], где $\tau_f \simeq \tau_0$ — характерное напряжение трения кристаллической решетки. Сопоставление показывает, что при $n \ll 10^{-4}$

первая скорость существенно превосходит вторую и, следовательно,

$$\mathcal{B} \simeq (\omega_s^2/\pi)(\mu/\tau_0)bv_s. \quad (3.68)$$

Параметр \mathcal{D} задает интенсивность ухода неравновесных вакансий из полосы локализованной деформации в объем зерна, где плотность вакансий близка к равновесной. Для его определения воспользуемся уравнением Дебая

$$\dot{n} = -\mathcal{K}n, \quad (3.69)$$

где для неравновесных вакансий кинетический коэффициент равен $\mathcal{K} = \pi^2 D_v/H^2$; H — ширина полосы локализованной деформации. Таким образом,

$$\mathcal{D} = \pi^2 D_v/H^2. \quad (3.70)$$

Основным механизмом генерации неравновесных вакансий при пластической деформации является движение винтовых дислокаций с порогами, разделенными расстоянием l . Тогда расширение дислокационной петли до заданных значений l_s, l_e в момент времени t (рис. 3.4) дает число вакансий $N_v(t) = l_s(t)l_e(t)/bl$. Увеличение их концентрации в единицу времени составляет $\dot{n} = N_v m b^3$, где m — плотность дислокационных петель. Учитывая, что $l_e m = \omega_e \rho$, $l_s m = \omega_s \rho$, $\dot{l}_s \simeq 2v_e$, $\dot{l}_e \simeq 2v_s$ (ср. индексы в двух последних равенствах), получаем

$$\dot{n} \simeq \frac{2b^2}{l}(\omega_e \rho v_e + \omega_s \rho v_s) = \frac{2\omega_e b^2 \lambda}{l t_c} \rho n + \frac{2\omega_s v_s b^2}{l} \rho. \quad (3.71)$$

В результате параметр \mathcal{E} и обусловленный расширением петли вклад \mathcal{F}' в параметр \mathcal{F} составляют

$$\mathcal{E} = \frac{2\omega_s v_s b^2}{l}, \quad \mathcal{F}' = \frac{2\omega_e b^2 \lambda}{l t_c} = \frac{2\omega_e b \lambda D_v}{l h} \exp\left(\frac{\sigma b^3}{T}\right). \quad (3.72)$$

Кроме расширения петли, в величину \mathcal{F} дает вклад поглощение вакансий дислокациями с краевой компонентой. Скорость такого поглощения задается скоростью v_e , плотностью $\rho_e \equiv \omega_e \rho$ и количеством вакансий $\sim (h/2b)^2$, поглощаемых дислокацией при переползании одной частицы:

$$\dot{n} = -\omega_e (h/4\lambda) D_v \exp(\sigma b^3/T) \rho n. \quad (3.73)$$

Интенсивность поглощения вакансий остальными участками краевых дислокаций, доля которых равна $\sim (1 - h/\lambda)$, составляет [221]:

$$\dot{n} = -(1 - h/\lambda) \omega_e N_d D_v \rho n, \quad (3.74)$$

где $N_d \sim 10$ — число мест, которые может занять вакансия на дислокации. В результате получаем

$$\mathcal{F} = \omega_e D_v \left[\frac{2b\lambda}{lh} \exp\left(\frac{\sigma b^3}{T}\right) - \frac{h}{4\lambda} \exp\left(\frac{\sigma b^3}{T}\right) - \left(1 - \frac{h}{\lambda}\right) N_d \right]. \quad (3.75)$$

Соотношение слагаемых в квадратных скобках определяет знак перед последним членом в (3.62) и, следовательно, характер пластической деформации. Режим автокаталитического размножения дефектов ($\mathcal{F} > 0$) обеспечивается при выполнении условий

$$8b\lambda^2 > lh^2, \quad \exp\left(\frac{\sigma b^3}{T}\right) > \frac{4N_d lh(\lambda - h)}{8b\lambda^2 - lh^2}. \quad (3.76)$$

Эти условия требуют, во-первых, достаточно высокой плотности порогов на винтовых дислокациях, расстояние между которыми не должно превышать значения $8(\lambda/h)^2 b$. Кроме того, необходимы достаточно большие локальные напряжения сжатия σ , действующие на дислокации вблизи частиц. Связывая σ с внешними сдвиговыми напряжениями τ через коэффициент концентрации напряжений λ/h , из (3.76) находим оценку критического напряжения τ_{cr} , выше которого выполняется условие $\mathcal{F} > 0$, обеспечивающее переход в автокаталитический режим:

$$\tau_{cr} = \frac{h T}{\lambda b^3} \ln \frac{4N_d lh(\lambda - h)}{8b\lambda^2 - lh^2}. \quad (3.77)$$

При экспериментальных значениях параметров $h \sim 2 \cdot 10^{-7}$ см, $\lambda \sim 2 \cdot 10^{-6}$ см, $T \sim 0.1$ эВ ~ 1000 К, $b = 2.86 \cdot 10^{-8}$ см, $l \sim 10^{-5}$ см, $N_d \sim 10$ [217], получаем $\tau_{cr} \sim 10^9$ дин/см² или в масштабе модуля сдвига $\tau_{cr} \sim (150^{-1} - 120^{-1})\mu$. Именно такие значения отвечают экспериментальным условиям образования полос локализованной деформации.

Отметим наконец, что слагаемое \mathcal{D}_0 в (3.62) описывает генерацию вакансий с постоянной скоростью. Оно характерно для процессов облучения и в рассматриваемых условиях несущественно.

Возвратимся к задаче о движении краевой дислокации в матрице с выделениями фазы. С этой целью рассмотрим локальный климб, обеспечиваемый притоком избыточных вакансий к участку экстроплоскости, прижатому к выделению. Как видно из рис. 3.5а, скорость краевой дислокации на участке длиной x , содержащем x/λ частиц, определяется суммарным временем $(x/\lambda)t_1$, где t_1 — время преодоления одной частицы, и временем t_0 ,

за которое дислокация преодолела бы расстояние x при том же напряжении в отсутствие частиц:

$$v_e = \frac{x}{t_0 + (x/\lambda)t_1} = \frac{v_0\lambda}{\lambda + v_0t_1}, \quad v_0 \equiv \frac{x}{t_0}. \quad (3.78)$$

Благодаря высокой концентрации неравновесных вакансий, в зоне сдвига время переползания t_1 может быть оценено выражением

$$t_1 = t_c/n, \quad t_c \equiv (hb/D_v) \exp(-\sigma b^3/T). \quad (3.79)$$

Здесь h — высота препятствия, имеющая порядок размера частицы; $D_v \simeq b^2 \omega_D \exp(-H_v/T)$ — коэффициент диффузии вакансий; b — величина вектора Бюргерса; $\omega_D \sim 10^{-13} \text{ с}^{-1}$ — частота Дебая; σ — напряжение сжатия, действующее на дислокацию вблизи частицы; T — температура в энергетических единицах; H_v — энтальпия миграции вакансий. Подставляя (3.79) в (3.78), получаем искомую зависимость скорости краевой компоненты от концентрации вакансий:

$$v_e = v_0 \left(1 + \frac{n_c}{n}\right)^{-1}, \quad n_c \equiv \frac{v_0 t_c}{\lambda}. \quad (3.80)$$

При $n \ll n_c$ зависимость $v_e(n)$ переходит в использованное выше линейное соотношение (3.64), а с ростом содержания вакансий до предельных значений $n \gg n_c$ выходит на постоянную величину v_0 , означающую, что краевые дислокации скользят, практически не тормозясь на частицах (рис. 3.5b).

Покажем в заключение, что в рассмотренных условиях можно пренебречь влиянием осмотического давления неравновесных вакансий на процесс переползания. Действительно, соответствующее время t_{osm} равно [194]:

$$t_{osm} = \frac{hb/D_v}{n \ln(n/n_0)}, \quad (3.81)$$

где n_0 — равновесная концентрация. Поскольку в области локализации деформации выполняется условие $\sigma \geq T/b^3$, то из (3.79) следует, что всегда $t_{osm} \gg t_1$. Однако осмотическое давление играет существенную роль в освобождении частиц от дислокационных петель, образующихся при огибании частиц винтовыми дислокациями. Это позволяет пренебречь эффектом упрочнения от дислокационных петель и считать расстояние λ не зависящим от деформации.

3.2.2 Анализ уравнений дислокационно-диффузионной кинетики

Проведенное рассмотрение показывает, что в уравнениях (3.61), (3.62) представляются значимыми слагаемые, имеющие коэффициенты \mathcal{A} , \mathcal{B} , \mathcal{C} , \mathcal{D} , \mathcal{E} , \mathcal{F} , определенные равенствами (3.66) — (3.68), (3.70), (3.72), (3.75). С физической точки зрения удобно представить указанные уравнения в виде

$$\frac{d\rho}{dt} = \frac{\rho}{t_d} \left(1 + \frac{n}{n_0} - \frac{\rho}{\rho_a} \right), \quad (3.82)$$

$$\frac{dn}{dt} = \frac{1}{t_v} \left[\frac{\rho}{\rho_0} - n \left(1 - \frac{\rho}{\rho_v} \right) \right]. \quad (3.83)$$

Здесь $t_d \equiv 1/\mathcal{A}$, $t_v \equiv 1/\mathcal{D}$ — характерные времена автономного изменения плотностей дефектов; масштабы $\rho_a \equiv \mathcal{A}/\mathcal{B}$, $\rho_0 \equiv \mathcal{D}/\mathcal{E}$ определяют плотности дислокаций без учета вакансий, а характерные плотности $n_0 \equiv \mathcal{A}/\mathcal{C}$, $\rho_v \equiv \mathcal{D}/\mathcal{F}$ задают интенсивность взаимного влияния дефектов.

Исследуем характер решений системы (3.82), (3.83) при различных соотношениях параметров. С этой целью введем безразмерные плотности дефектов $y \equiv \rho/\rho_v$, $x \equiv n/n_0$ и время $z \equiv t/t_v$, а также параметры $\alpha \equiv t_v/t_d$, $\beta \equiv \rho_v/\rho_a$ и $\gamma \equiv \rho_v/\rho_0 n_0$. Первый определяет соотношение характерных времен, второй — отношение интенсивностей процессов размножения и аннигиляции дефектов, третий — соотношение интенсивностей взаимного влияния дислокаций и вакансий. В безразмерных величинах система (3.82), (3.83) принимает вид

$$\frac{dy}{dz} = \alpha y(1 + x - \beta y), \quad (3.84)$$

$$\frac{dx}{dz} = -x(1 - y) + \gamma y. \quad (3.85)$$

В общем случае нелинейные уравнения (3.84), (3.85) поддаются только качественному анализу, позволяющему выяснить особенности зависимости $y(x)$ при различных значениях параметров α , β , γ [10]. Оказывается, что величина первого из указанных параметров не существенна. В области

$$\beta > 1, \quad \gamma < (\sqrt{\beta} - 1)^2 \quad (3.86)$$

фазовый портрет имеет вид, показанный на рис. 3.6а; при обратных условиях получаем рис. 3.6б. Первый портрет характеризуется наличием двух

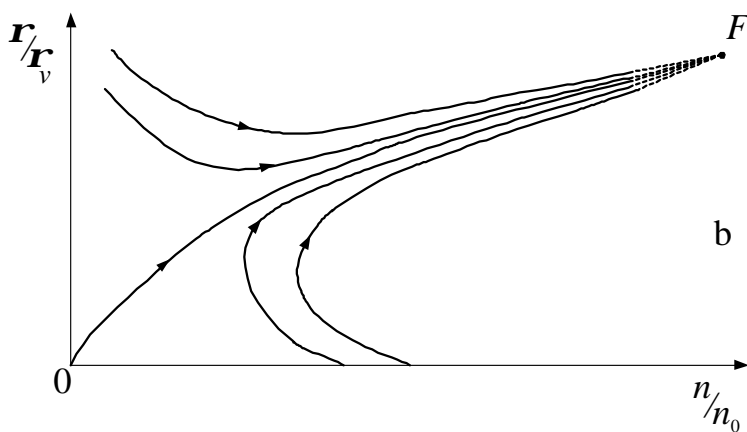
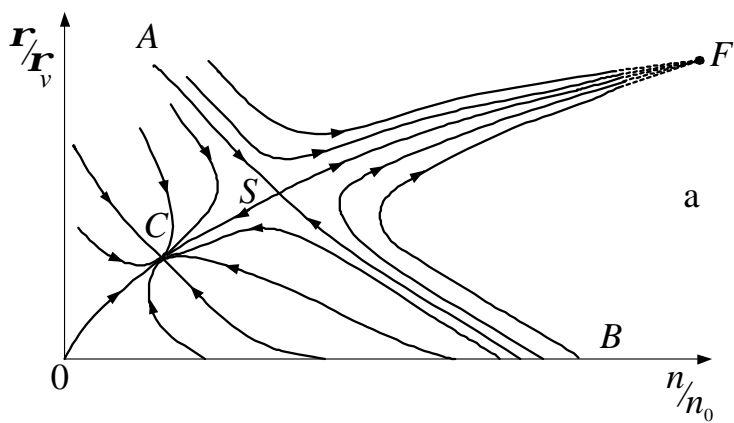


Рисунок 3.6 — Фазовые портреты для плотностей дислокаций ρ и вакансий n при различных значениях параметров β и γ

особых точек — устойчивого узла C и седла S с координатами

$$n_{c,s} = \frac{\beta - \gamma - 1}{2} \left[1 \mp \sqrt{1 - \frac{4\gamma}{(\beta - \gamma - 1)^2}} \right] n_0, \quad (3.87)$$

$$\rho_{c,s} = \left[\frac{\beta - \gamma + 1}{2\beta} \mp \frac{\beta - \gamma - 1}{2\beta} \sqrt{1 - \frac{4\gamma}{(\beta - \gamma - 1)^2}} \right] \rho_v, \quad (3.88)$$

где верхний знак отвечает узлу, нижний — седлу. При выполнении условий (3.86) плоскость физических значений ρ , n оказывается разбитой на четыре области, отвечающие различному характеру поведения системы. Область, ограниченная осью абсцисс и линией $OCSB$, отвечает диффузионному механизму деформации, поскольку здесь плотность дислокаций не превышает значения $y_s \rho_v \geq (\rho_v + \rho_a)/2$, а зависимость $\rho(n)$ характеризуется асимптотикой $\rho \sim \exp[(-t_v/t_d)(n/n_0)]$. В области, ограниченной осью ординат и линией $OCSA$, превалирует дислокационный механизм, поскольку концентрация вакансий не превышает значения $x_s n_0 \geq [(\rho_v/\rho_a) - 1]n_0$. Связь между ρ и n характеризуется здесь асимптотикой $\rho \sim [(\rho_v/\rho_a) + n]^{-(t_v/t_d)(\rho_v/\rho_a)}$. Характерно, что в обеих этих областях система в ходе своей эволюции достигает узла C с конечными значениями плотностей дефектов ρ_c , n_c (разумеется, предельное значение n_c не может быть меньше равновесной концентрации вакансий).

Совершенно отличное поведение наблюдается при попадании в области BSF и ASF — здесь в ходе деформации наблюдается автокаталитическое нарастание плотностей дефектов по траекториям, сходящимся к сепаратрисе SF , которая имеет асимптотику $\rho = (\rho_v/n_0)[(t_d/t_v) + (\rho_v/\rho_a)]^{-1}n$. Различие областей BSF и ASF состоит в том, что в первой выход на автокаталитический режим осуществляется за счет большой концентрации вакансий, а во второй — за счет дислокаций. Соответственно система характеризуется неустойчивостью $d\rho/dn = \infty$ в области BSF и $d\rho/dn = 0$ в ASF .

Таковыми же особенностями характеризуется фазовый портрет, изображенный на рис. 3.6b, который реализуется при нарушении любого из неравенств (3.86). Отличие от портрета на рис. 3.6a состоит в том, что выход на автокаталитический режим осуществляется независимо от начальных значений плотностей дефектов ρ , n (при выполнении условий (3.86) они должны быть такими, чтобы изначально попасть в области BSF , ASF).

Используя микроскопические выражения (3.66) — (3.68), (3.70), (3.72), (3.75) и принимая предел текучести равным напряжению Орована $\tau_0 \approx \mu b/\lambda$

[219], находим оценки

$$\gamma \simeq 1, \quad \beta \approx \frac{\pi \omega_s}{2 \omega_e} \frac{lh\lambda}{bH^2} \exp\left(-\frac{\tau b^3 \lambda}{Th}\right), \quad (3.89)$$

где учтена концентрация напряжений на частицах $\sigma \approx (\lambda/h)\tau$. В результате условие выхода на автокаталитический режим (рис. 3.6b) представляется неравенством $\tau > \tau_c$, где критическое напряжение равно

$$\tau_c = \frac{hT}{\lambda b^3} \ln\left(\frac{\pi \omega_s}{8 \omega_e} \frac{lh\lambda}{bH^2}\right). \quad (3.90)$$

Сравнение выражений (3.77), (3.90) показывает, что при выполнении условия

$$\frac{\pi \omega_s \lambda}{8 \omega_e b} < \frac{4N_d(\lambda - h)H^2}{8b\lambda^2 - lh^2}, \quad (3.91)$$

реализующегося в эксперименте [217], имеем $\tau_c < \tau_{cr}$. Таким образом, в дисперсно-упрочненных ниобиевых сплавах необходимое условие выхода на автокаталитический режим $\rho_v \equiv \mathcal{D}/\mathcal{F} > 0$ является достаточным и обеспечивает фазовый портрет, показанный рис. 3.6b.

Согласно изложенному выход на автокаталитический режим, отвечающий рис. 3.6a, требует плотности дефектов, превышающей некоторое критическое значение ρ_{cr} . Последнее должно быть ограничено величиной $\sim 10^{10} - 10^{11} \text{ см}^{-2}$, которая позволяет пренебречь коллективными эффектами и рассматривать дислокации автономно. Оценка ρ_{cr} следует из условия $d\rho/dn = \infty$ и уравнения (3.83) при $\dot{n} = 0$, $\gamma \equiv \rho_v/\rho_0 n_0 = 1$:

$$\rho_{cr} = \left(1 + \frac{n_0}{n}\right)^{-1} \rho_v < \rho_v, \quad \rho_v \sim \frac{lh}{\omega_e b \lambda H^2} \exp\left(-\frac{\lambda \tau b^3}{hT}\right). \quad (3.92)$$

При $\tau \sim 10^{-2} \mu$ отсюда находим плотность дислокаций $\rho_{cr} \leq 10^9 \text{ см}^{-2}$, величина которой легко достигается в экспериментальных условиях.

При $\rho > \rho_{cr}$ имеем $\rho_v/\rho_a \ll t_d/t_v$ и уравнение сепаратрисы $n = (n_0/\rho_v)[(t_d/t_v) + (\rho_v/\rho_a)]^{-1} \rho$ дает связь концентраций дефектов в полосе локализованной деформации:

$$n \sim (b^2 \lambda / l) \rho. \quad (3.93)$$

В экспериментальных условиях [217] $n \sim 10^{-16} \text{ см}^2 \cdot \rho$ и при $\rho \sim 10^{10} - 10^{11} \text{ см}^{-2}$ получаем значения $n \sim 10^{-6} - 10^{-5}$, характерные для диффузионных механизмов деформации в процессе переориентации.

Проведенный анализ показывает, что при напряжениях $\tau > \tau_{cr}$ дислокации и вакансии неограниченно размножаются в полосе локализованной деформации независимо от исходного содержания дефектов. В результате пластическое течение проявляет структурную неустойчивость, имеющую, как видно из дальнейшего, токовый характер. При наличии изгибающих моментов интенсивный процесс диффузии приводит к развитию ротационной моды. В ниобиевых сплавах указанная неустойчивость проявляется уже на начальных стадиях деформации вне зависимости от исходной плотности дефектов [215, 217].

Автокаталитический характер размножения дефектов различного рода обусловлен положительной обратной связью между скоростями изменения их плотностей в зоне сдвига. Механизм этой связи определяется характером взаимодействия дислокационной петли с недеформируемыми препятствиями — вакансии увеличивают скорость переползания краевых компонент этой петли и плотность винтовых, что, в свою очередь, приводит к росту их концентрации за счет генерации дислокационными порогами движущихся винтовых компонент. Характер поведения ансамбля дефектов определяется уровнем напряжений в зоне сдвига. При значениях $\tau \ll \tau_{cr}$ отрицательная обратная связь препятствует выходу системы на автокаталитический режим. В области $\tau > \tau_{cr}$ система теряет устойчивость только в том случае, если начальные плотности подвижных дефектов превышают критические значения (см. рис. 3.6а). И наконец, при напряжениях $\tau > \tau_c$ вид фазового портрета на рис. 3.6b показывает, что структурная неустойчивость развивается независимо от исходной плотности дефектов.

Изложенная картина не ограничивается высокопрочными сплавами, обладающими специфической микроструктурой (малыми частицами фазы). Найденные закономерности пластического течения, сводящиеся к потере устойчивости системы, локализации деформации, развитию ротационной пластичности и т. п., должны проявляться также во всех материалах, где скорость сдвиговой деформации существенно зависит от концентрации точечных дефектов и обеспечивается высокий уровень напряжений. Такие условия могут достигаться, в частности, на стадии развитой пластической деформации независимо от исходной микроструктуры и механических свойств материала. При этом деформационное упрочнение приводит материал в состояние, обладающее значительными величинами неоднородных полей напряжений и деформационными дефектами типа дислокационных клубков. Подобная ситуация проявляется при интенсивном облучении, имплантации, насыщении металлов атомами малого размера (например, водородоживании) и т. д. По-нашему мнению, развитая картина может объ-

яснить известный экспериментальный факт, согласно которому на стадии развитой пластической деформации образуются преимущественно высокоугловые границы наклонного типа [200]. Действительно, именно такие границы формируются путем диффузионного массопереноса и инициируемого вакансиями переползания краевых компонент дислокаций.

Укажем в заключение, что проведенное рассмотрение носит существенно кинематический характер, поскольку все динамические характеристики типа напряжений, действующих на дислокации, принимались постоянными. Такое приближение отвечает экспериментальной ситуации, наблюдаемой в высокопрочных материалах, где благодаря деформационному упрочнению напряжение испытывает незначительные изменения относительно высокого значения исходной величины τ . Этому способствуют также низкие значения коэффициента упрочнения, присущие высокопрочным материалам.

3.2.3 Синергетика образования локализованной полосы пластического течения

Изложенная выше кинематическая картина основывается на предположении о неизменном характере внутренних напряжений τ и пренебрежении временной зависимостью деформации ε . Настоящий раздел посвящен исследованию стадии развитой пластической деформации, когда коллективные эффекты нарушают указанные условия [200]. При нарастании плотности дислокаций до величин $\rho \gg \rho_{cr}$, определенных равенством (3.92), устанавливается когерентная связь, которая приводит к выделению из ансамбля дислокаций, ведущих себя автономным образом, коллективной составляющей плотностью $\rho_{col} \leq \rho$. При этом поля взаимодействия дислокаций становятся соизмеримыми с внешними напряжениями [200], и возникает долгоживущая гидродинамическая мода со временем релаксации $t_d \gg \omega_D^{-1}$ и амплитудой $d \sim b\sqrt{\rho_{col}}$. В автономном режиме релаксация этой моды протекает по дебаевскому закону $\dot{d} = -d/t_d$. Однако когерентная связь между дефектами приводит к релаксации сдвиговых напряжений τ , а уравнение для d дополняется положительным вкладом $\tau\epsilon$ пластической деформации ϵ , обусловленной коллективными эффектами. Соответственно к дебаевскому уравнению $\dot{\tau} = (\tau_e - \tau)/t_\tau$ для напряжений, релаксация которых происходит не к нулевому значению τ , а к стационарному $\tau_e(\hat{\sigma}_{ext})$, добавляется отрицательный вклад ϵd моды дефектов в поле деформации. Полная система уравнений, определяющих временное поведение величин τ , d , ϵ , замыкается

уравнением Максвелла для вязкоупругой среды:

$$\dot{\tau} = (\tau_e - \tau)/t_\tau - g_\tau \epsilon d; \quad (3.94)$$

$$\dot{d} = -d/t_d + g_d \tau \epsilon; \quad (3.95)$$

$$\dot{\epsilon} = -\epsilon/t_\epsilon + g_\epsilon d. \quad (3.96)$$

Здесь t_τ, t_d, t_ϵ — времена релаксации величин τ, d, ϵ ; $g_\tau, g_d, g_\epsilon > 0$ — соответствующие константы связи. Характерное время релаксации напряжений t_τ задается дебаевским масштабом: $t_\tau \sim \omega_D^{-1} \sim 10^{-13}$ с; время релаксации моды дефектов t_d определяется термоактивируемыми процессами их миграции: $t_d \sim \omega_D^{-1} \exp(Q/T)$, где энергия Q имеет порядок электронвольта; и наконец, время релаксации деформации равно $t_\epsilon = \eta/\mu$, где η — сдвиговая вязкость; μ — соответствующий модуль упругости.

Приведенные оценки показывают, что наибольшим значением обладает время релаксации деформации, величина которой ϵ определяет значения τ, d в уравнениях (3.94) — (3.96). В синергетике принято обозначать переменную ϵ как параметр порядка, величину d как поле, сопряженное этому параметру, а напряжения τ , уровень которых фиксируется внешним значением $\tau_e(\hat{\sigma}_{ext})$, как управляющий параметр (см. раздел 1.1). Указанная иерархия времен релаксации позволяет применить принцип подчинения эволюции управляющего параметра $\tau(t)$ и сопряженного поля $d(t)$ параметру порядка $\epsilon(t)$. Математически это выражается в пренебрежении скоростями $\dot{\tau}, \dot{d}$ в уравнениях (3.94), (3.95), после чего величины τ, d выражаются через ϵ равенствами:

$$\tau = \frac{\tau_e}{1 + (\epsilon/\epsilon_m)^2}, \quad \epsilon_m^{-2} \equiv A_d A_\tau; \quad A_i = t_i g_i, \quad i = \tau, d, \epsilon; \quad (3.97)$$

$$d = A_d \tau_e \frac{\epsilon}{1 + (\epsilon/\epsilon_m)^2}, \quad \tau_e = \tau_e(\hat{\sigma}_{ext}). \quad (3.98)$$

Зависимость $\epsilon(t)$ задается уравнением регрессии Ландау–Халатникова (1.7) с синергетическим потенциалом (1.8) (см. рис.1.1а), где следует заменить $\eta, \tau_\eta, S_e, S_c, \eta_m$ на $\epsilon, t_\epsilon, \tau_e, \tau_c \equiv (A_\epsilon A_d)^{-1}, \epsilon_m$. Разложение по параметру ϵ/ϵ_m приводит к ряду Ландау (3.18), где $A \equiv 1 - \tau_e/\tau_c, B \equiv \tau_e/\tau_c$. Вид зависимости $V(\epsilon)$ задается тензором внешних напряжений $\hat{\sigma}_{ext}$, определяющих стационарное значение $\tau_e(\hat{\sigma}_{ext})$ сдвиговой компоненты внутренних напряжений. Оставляя в стороне определение зависимости $\tau_e(\hat{\sigma}_{ext})$, приводящее к отдельной задаче, укажем, что при нагрузке $\hat{\sigma}_{ext}$, не обеспечивающей условие $\tau_e > \tau_c$, зависимость (1.8) имеет монотонно возрастающий

характер (кривая 1 на рис. 1.1а). Это означает релаксацию в стационарное состояние $\epsilon_0 = 0$, в котором коллективное поведение дислокационно-вакансионного ансамбля не сказывается на величине пластической деформации. С физической точки зрения малость напряжений $\tau_\epsilon(\hat{\sigma}_{ext})$, связанных с внешним воздействием, обусловлена процессами релаксации и упрочнения. При выполнении обратного условия $\tau_\epsilon > \tau_c$ синергетический потенциал приобретает минимум в точке ϵ_0 , определяющей добавку (1.10) к деформации ϵ , обусловленной автономным поведением дефектов. Согласно соотношениям (3.97), (3.98) при этом коллективная составляющая напряжений сводится к критическому значению τ_c , а выражение для деформационной моды отличается от ϵ_0 множителем $A_d\tau_c$. На фазовой плоскости $\rho - n$ указанному стационарному состоянию отвечает узел F на рис. 3.6. Согласно (1.11) эффективное время перехода в когерентное состояние t_{ef} монотонно спадает с ростом разности между напряжением τ_ϵ и критическим значением τ_c .

Основной результат проведенного анализа состоит в том, что при автотокаталитическом размножении дефектов в поле напряжений $\tau_\epsilon(\hat{\sigma}_{ext}) > \tau_c$ за время $t \sim t_{ef}$ устанавливается когерентная связь и дефекты ведут себя коллективным образом. При этом деформация ϵ , обусловленная автономными дефектами, получает вклад (1.12), нарастающий с течением времени $t \gg t_{ef}$ до стационарного значения (1.10).

Для оценки основных параметров задачи учтем, что максимальная деформация $\epsilon_m \sim 1$, а из (3.96) для безразмерного параметра $A_\epsilon = t_\epsilon g_\epsilon$ следует $A_\epsilon \sim 1$. Тогда $A_d = (A_\epsilon \tau_c)^{-1} \sim \tau_c^{-1} \sim (10^1 - 10^2) \mu^{-1}$, $A_\tau = (\epsilon_m^2 A_d)^{-1} \sim A_d^{-1} \sim \tau_c \sim (10^{-2} - 10^{-1}) \mu$. С учетом оценок времен t_i , приведенных после уравнений (3.94) — (3.96), окончательно находим $g_\epsilon = A_\epsilon / t_\epsilon \sim t_\epsilon^{-1} \sim \mu / \eta$, $g_d = A_d / t_d \sim (\omega_D / \tau_c) \exp(-Q/T)$, $g_\tau = A_\tau / t_\tau \sim \tau_c \omega_D$.

Мы использовали простейшую модель, позволяющую представить самоорганизацию дефектов в полосе пластической деформации по механизму непрерывного кинетического превращения. При этом зависимость $V(\epsilon)$ синергетического потенциала от параметра порядка отвечает кривой 4 на рис. 1.7а. В реальных условиях зарождение полосы может протекать по механизму фазового перехода первого рода, отвечающему зависимости $V(\epsilon)$ типа кривой 3 на рис. 1.7а. Для описания такого перехода требуется учесть зависимость времени релаксации t_ϵ от деформации (см. раздел 1.1). При этом картина превращения не претерпевает существенных изменений, и мы оставляем в стороне соответствующее рассмотрение.

Другое ограничение состоит в том, что рассматривалась только временная зависимость $\epsilon(t)$ пластической деформации, тогда как реальное си-

нергетическое состояние отвечает полосе локализованной деформации, и требуется учесть пространственное распределение $\epsilon(\mathbf{r})$, образующееся при $t \gg t_{ef}$. Как видно из подраздела 3.1.2, теоретико-полевая схема, реализующая такое описание в рамках приближения Гинзбурга—Ландау, позволяет найти стационарные распределения $\epsilon_0(\mathbf{r})$, $d_0(\mathbf{r})$ полей деформации и моды дефектов, первое из которых играет роль материального поля, а второе является калибровочным. Характер решения уравнений Гинзбурга—Ландау определяется отношением λ/H размера λ области повышенного содержания дефектов к ширине полосы деформации H . Автолокализованное решение отвечает условию $\lambda/H \geq 1$, где $\lambda \sim \eta/\rho c$, ρ — плотность среды; η — сдвиговая вязкость; c — скорость звука. С учетом сопоставимости диффузионного и дислокационного механизмов пластической деформации сдвиговую вязкость можно оценить из соотношения Стокса—Эйнштейна $\eta \sim T/D_s L$, где $D_s = D_v n$ — коэффициент самодиффузии при плотности вакансий n , близкой к предельной; L — характерный размер концентратора напряжений. В результате условие образования полосы сдвига принимает вид

$$LH < \frac{T}{c\rho D_s}. \quad (3.99)$$

При характерных значениях $T \sim 10^{-13}$ эрг, $c \sim 10^5$ см/с, $\rho \sim 10$ г/см³, $D_s = D_v n \sim 10^{-11} - 10^{-9}$ см²/с находим $LH < 10^{-10} - 10^{-8}$ см². Поскольку полоса деформации реализуется в области концентратора напряжений $L \geq H$, согласно экспериментальным данным [215, 217], тогда имеем $H \leq 10^{-5} \div 10^{-4}$ см.

Проведенный анализ позволяет выделить следующие режимы пластической деформации:

- При малых напряжениях или значительном их снижении за счет деформационного упрочнения пластическая деформация развивается в режиме, близком к ползучести (кривая 1 на рис.3.7). При этом потери устойчивости не происходит.
- С ростом плотности дислокаций до значений, при которых их взаимодействие становится сравнимым с напряжением τ_e , созданным внешним полем, поведение ансамбля дефектов становится коллективным и принципиальную роль приобретают процессы релаксации напряжений. На качественном уровне они представляются в рамках реологической схемы вязкоупругого течения среды, развитой в подразделе

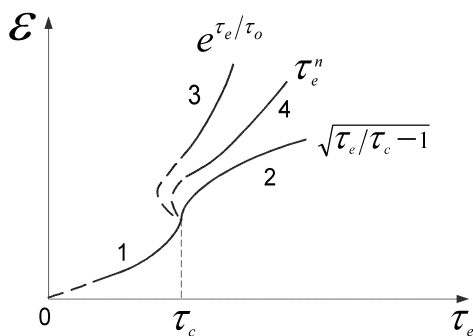


Рисунок 3.7 — Возможные виды зависимости пластической деформации от напряжения

3.2.3. При этом зависимость $\epsilon(\tau_e)$ имеет корневой вид (1.10) (кривая 2). В общем случае реализуется немонотонное поведение, которое в электронных системах [222] отвечает токовой неустойчивости S -типа (кривая 3), представляющей катастрофу типа сборки [223].

- При напряжениях τ_e , намного превышающих поля взаимодействия дислокаций, коллективные эффекты подавляются внешним воздействием и ансамбль дефектов эволюционирует до предельных плотностей дефектов n_F, ρ_F . Зависимость $\epsilon(\tau_e)$ приобретает при этом экспоненциальный вид типа кривой 3 на рис. 3.7 (см. [188]). В действительности, однако, кривая $\epsilon(\tau_e)$ имеет степенной характер, являющийся промежуточным между предельными зависимостями типов 2, 3 (кривая 4).

3.3 Синергетика структурных превращений при деформации и отжиге ГЦК монокристаллов

3.3.1 Деформация

Отличительной чертой пластической деформации монокристаллов является то, что здесь носители пластичности сводятся к простейшим дефектам типа вакансий, дислокаций и их комплексов [194]. При значительных степенях деформации могут включаться двойниковый и ротационный механизмы [200], однако наиболее интенсивные из них присущи лишь поликристаллическим и пористым материалам [198]. В исследуемой области температур, составляющих десятки доли точки плавления, роль вакансий становится пренебрежимой и при умеренной деформации пластичность обеспечивается скольжением дислокаций в поле напряжений. Такая ситуация характерна для материалов с высокими значениями поверхностной энергии: так, в никеле, где энергия двойниковых границ составляет $\gamma \approx 200$ эрг/см² [193], при деформациях $\varepsilon_{ext} < 80\%$ двойникование не наблюдалось. Это связано с высоким значением $\sim 10^{10}$ дин/см² двойникового напряжения $\sigma_c \sim \gamma/a$, a — межатомное расстояние. При малых значениях γ величина σ_c настолько мала, что практически во всем интервале деформации прокатки реализуется двойниковый механизм деформации. Такая ситуация наблюдается в латуни, где $\gamma \sim 10$ эрг/см² [193], $\sigma_c \sim 10^8 - 10^9$ дин/см², и двойникование происходит уже при $\varepsilon_{ext} < 30\%$ [200].

Кроме скольжения дислокаций и двойникового, деформация приводит к ротационным процессам переориентировки одних областей монокристалла относительно других. Экспериментальное исследование показывает [193, 198], что процесс переориентировки носит черты фазового превращения первого рода — протекают зарождение и рост областей измененной ориентировки, которые проявляют себя как участки новой фазы, обладающие сложной дефектной структурой. В данном подразделе будет показано, что по мере деформирования кристалла протекает цепь переориентировок такого рода. Она состоит в циклическом повторении процессов возрастания плотности хаотических дислокаций, их выстраивания в границы разориентировки и рассыпания этих границ в ансамбль хаотических дислокаций. Таким образом, в отличие от предыдущего раздела, где взаимодействие вакансий и дислокаций приводило к автокаталитическому нарастанию их плотностей и последующему зарождению коллективной моды, здесь

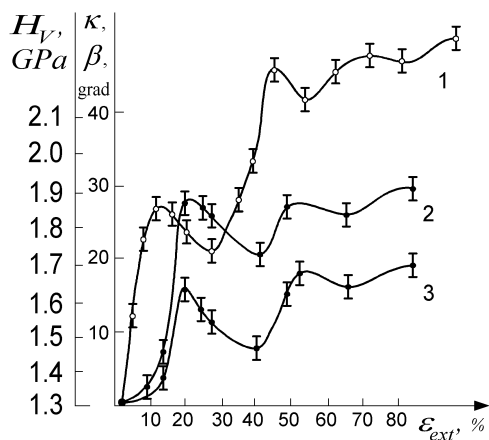


Рисунок 3.8 — Зависимость микротвердости H_V (1), общего интервала дифракции κ (2) и интегральной полуширины β (3) кривых ω -сканирования от степени внешней деформации ϵ_{ext}

синергетическое поведение системы *дислокация + граница* проявляется как автоколебательный режим, присущий экологической системе *хищник – жертва*.

Измерение микротвердости H_V монокристаллов Ni при различных степенях внешней деформации ϵ_{ext} показало, что на обычную монотонно возрастающую зависимость $H_V(\epsilon_{ext})$ накладывается ряд провалов (см. рис. 3.8) [224]. Каждый из них отвечает переходу одной ориентировки в другую: так, при $\epsilon_{ext} > 15\%$ исходная ориентировка $\{111\} \langle 101 \rangle$ переходит в $\{551\} \langle 105 \rangle$, затем при $\epsilon_{ext} > 48\%$ последняя трансформируется в ориентировку $\{110\} \langle 112 \rangle$. При этом момент зарождения новой ориентировки, фиксируемый по полюсным фигурам, совпадает с появлением областей измененной ориентировки. Увеличение деформации в области провала приводит к росту областей новой ориентировки, пока они не захватят весь объем. В результате величина H_V снова достигает своего максимального значения.

Поскольку значение H_V задается плотностью ρ неподвижных дислокаций, то можно полагать, что наличие провалов на зависимости $H_V(\epsilon_{ext})$ означает такое же поведение величины $\rho(\epsilon_{ext})$. Это предположение подтверждается изменением профиля кривых ω -сканирования, показанным на

рис. 3.9 [224]. Видно, что по мере нарастания деформации периодически появляется и исчезает хорошо выраженное плато. Согласно [225] это свидетельствует о соответствующем изменении плотности хаотически распределенных дислокаций. Электронно—микроскопические исследования [224] показывают, что при этом происходит изменение типа структуры, например, в ячеистой образуется полосовая [200].

Таким образом, исследование монокристаллов Ni показывает, что немонотонное изменение структуры в процессе деформации ГЦК монокристаллов обусловлено эволюцией хаотических дислокаций и границ ориентационных фаз. При этом границы новой фазы играют роль стоков дислокаций, поглощающих их в ходе переориентировки, а старые границы, рассыпаясь под действием напряжений в хаотическую компоненту, представляют их источники. В результате эволюция структуры в процессе переориентировки деформированного монокристалла может быть представлена [226] экологической системой *хищник — жертва* [227], которая в нашем случае принимает вид [228]

$$\frac{\partial \rho}{\partial \varepsilon} = \frac{\rho}{\varepsilon_0} \left(1 - \frac{\rho}{\rho_0} - \frac{n}{n_0} \right), \quad (3.100)$$

$$\frac{\partial n}{\partial \varepsilon} = -\frac{n}{\varepsilon^0} \left(1 - \frac{\rho}{\rho^0} \right). \quad (3.101)$$

Здесь ρ — плотность дислокаций, представляющих жертву; n — разность плотностей стоков и источников дислокаций, отвечающая популяции хищника; $\varepsilon_0, \varepsilon^0, \rho_0, \rho^0, n_0$ — положительные постоянные. Первое слагаемое в правой части уравнения (3.100) описывает размножение дислокаций в поле деформации, второе — их аннигиляцию, третье — поглощение стоками. В уравнении (3.101) первое слагаемое отвечает процессу регрессии плотности источников и стоков дислокаций, второе описывает обратный процесс за счет взаимодействия с дислокациями.

Качественный анализ нелинейных уравнений (3.100), (3.101) показывает, что фазовая плоскость $n - \rho$ содержит три особые точки (рис. 3.10): фокус F с координатами $n_F = (1 - \rho^0/\rho_0)n_0$, $\rho_F = \rho^0$ и седла $O(0, 0)$, $S(0, \rho_0)$. В физической области $n, \rho > 0$ состояние системы при любых начальных значениях плотностей дислокаций и границ характеризуется фазовой траекторией, стремящейся к фокусу F . Такое поведение отвечает колебательному выходу на режим $n = n_F, \rho = \rho_F$ со скоростью, определяемой интенсивностью процессов аннигиляции дислокаций [228]. При полном ее отсутствии ($\rho_0 = \infty$) верхнее седло $S(0, \rho_0)$ смещается на бесконечность, фокус F перерождается в центр, а витки спирали — в замкнутые

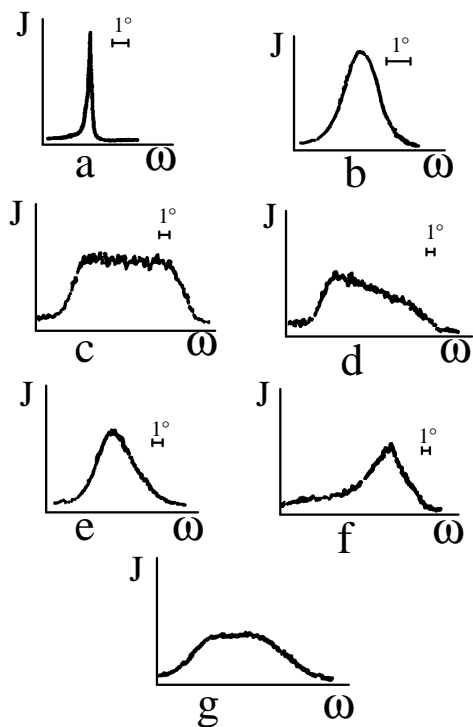


Рисунок 3.9 — Изменение профиля кривых ω -сканирования при прокатке монокристаллов Ni {111} (кривые a, b, c, d, e, f, g отвечают степеням деформации $\varepsilon_{ext} = 0; 0.162; 0.26; 0.28; 0.3; 0.536; 0.6$)

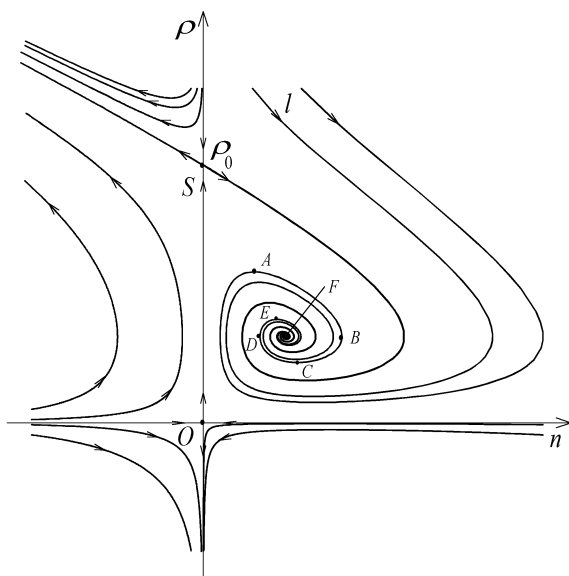


Рисунок 3.10 — Модель эволюции хаотических дислокаций (ρ) и границ (n) при деформации

кривые, охватывающие его. Именно такой случай $\rho_0 = \infty$ отвечает классической постановке задачи *хищник — жертва* [227]. При этом эволюция системы протекает по одной из замкнутых кривых, охватывающих центр. Включение процессов аннигиляции дислокаций, отражающееся спаданием параметра $\rho_0 < \infty$, приводит к трансформации замкнутых интегральных кривых в витки спирали, число которых уменьшается с усилением аннигиляции. Поскольку каждый из витков отвечает провалу на зависимости $H_V(\varepsilon_{ext})$, то из рис. 3.10 следует, что в действительности спираль должна содержать небольшое число таких витков. С ростом деформации ε_{ext} система эволюционирует по одному из них, например, витку $ABCDE$ на рис. 3.10. При этом плотность дислокаций сначала уменьшается от ρ_A до ρ_C (на кривой зависимости $H_V(\varepsilon_{ext})$ это отвечает спадающей ветви провала микротвердости), а затем происходит обратный рост ρ по траектории CDE (соответственно попадаем на восходящий участок зависимости $H_V(\varepsilon_{ext})$). В ходе такой эволюции плотность стоков n растет на участке AB , отвечающем увеличению плотности границ за счет зарождения и роста областей ориентационных фаз; последующее уменьшение плотности дислокаций и объединение этих областей приводит к спаданию величины n на участке BCD ; окончательное увеличение плотности стоков n на участке DE связано с возрастанием плотности дислокаций ρ . Сужение спирали с приближением к точке F приводит к уменьшению амплитуды колебаний плотности дислокаций ρ и, как следствие, к спаданию глубины провалов микротвердости $H_V(\varepsilon_{ext})$.

Представленная картина, основанная на уравнениях (3.100), (3.101) с фазовым портретом на рис. 3.10, является неполной, поскольку в процессе переориентировки участвуют как рассыпающиеся границы—источники, так и вновь образующиеся границы—стоки. Сама же система (3.100), (3.101) содержит плотности источников и стоков g, r в виде разности $n = r - g$, а не по отдельности. От данного ограничения можно избавиться, если в (3.100) подставить разность $n = r - g$ (при этом вместо параметра n_0 следует ввести характерные плотности r_0, g_0), а для каждой из величин r, g записать уравнение типа (3.101), где масштаб деформации ε^0 определяется значениями $\varepsilon_r, \varepsilon_g$ соответственно. Тогда эволюция системы *рассыпающиеся границы + вновь образующиеся границы + хаотические дислокации* представляется трехмерным фазовым портретом с осями g, r, ρ (рис. 3.11). В отличие от двумерного портрета на рис. 3.10 здесь фокус F превращается в фокальную прямую FF' , лежащую на пересечении горизонтальной плоскости $\rho = \text{const} \equiv \rho^0$ и вертикальной $g = g_0(\rho^0/\rho_0 - 1) + (g_0/r_0)r$. Соответственно линия сепаратрисы переходит в поверхность S , навивающуюся

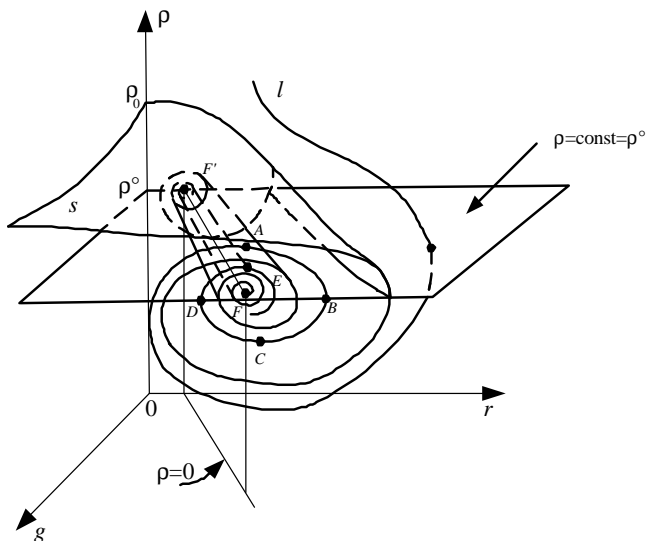


Рисунок 3.11 — Обобщенная модель совместной эволюции хаотических дислокаций (ρ), рассыпающихся (g) и вновь образующихся (r) границ

на фокальную прямую FF' . Эволюция системы со временем представляется фазовой траекторией l , которая плавно приближается к фокальной прямой, навиваясь на нее между витками поверхности S . Переход от двумерной картины к трехмерной позволяет учесть не только разность $n = r - g$ между плотностями старых и новых границ, но и изменение их соотношения. Благодаря этому можно обеспечить условия, когда с течением времени зависимость $g(r)$ будет вести себя немонотонным образом (см. рис. 3.11).

Существенное ограничение развитой картины состоит в том, что она учитывает поведение дефектов, оставляя в стороне временной аспект развития пластической деформации. Полное описание системы достигается с использованием синергетического подхода, типа изложенного в подразделе 3.2.3. В рамках такого подхода роль параметра порядка играет коллективная составляющая деформации ϵ , сопряженное поле сводится к разности плотностей границ n , а управляющий параметр — к плотности неподвиж-

ных дислокаций ρ . Тогда самосогласованное изменение величин $\epsilon(t)$, $n(t)$, $\rho(t)$ представляется системой Лоренца (3.94) — (3.96), где интенсивность дефектной моды d заменяется плотностью границ n , а сдвиговое напряжение τ — плотностью дислокаций ρ .

В результате синергетическая картина эволюции дефектной структуры в процессе деформации представляется следующим образом. При малых нагрузках процесс переориентировки не происходит и равновесие в дислокационном ансамбле поддерживается за счет аннигиляции, характеризуемой плотностью ρ_0 в уравнении (3.100). Начиная с критического значения ρ_c , плотность $\rho_e(\epsilon_{ext})$, задаваемая внешними условиями, приводит к спонтанной деформации ϵ_0 , играющей роль параметра порядка. Ее стационарное значение соответствует минимуму синергетического потенциала и с ростом плотности дислокаций $\rho_e(\epsilon_{ext})$ возрастает согласно корневому закону $\epsilon_0 = \epsilon_g \sqrt{\rho_e/\rho_c - 1}$. При этом в физической области значений $0 \leq \epsilon_0 \leq \epsilon_m$ стационарная плотность границ также возрастает корневым образом, а плотность дислокаций сводится к критическому значению ρ_c .

Представленная синергетическая картина не позволяет понять немонотонный характер изменения плотности дислокаций с ростом внешней деформации ϵ_{ext} . Это связано с использованием адиабатического приближения, в рамках которого иерархия времен релаксации $\tau_\rho, \tau_n \ll \tau_\epsilon$ приводит к тому, что в своей эволюции плотности дислокаций и границ следуют за изменением деформации. В действительности, однако, малая подвижность дислокаций может привести к выполнению обратных условий $\tau_n \ll \tau_\epsilon \ll \tau_\rho$ или $\tau_\epsilon \ll \tau_n \ll \tau_\rho$. При этом диссипативное поведение сменяется колебательным режимом типа показанного на рис. 1.3с, 1.5с [7]. Последний сводится к фазовому портрету на рис. 3.10, описывающему провалы микротвердости $H_V(\epsilon_{ext})$.

3.3.2 Отжиг

Традиционно деформация и отжиг рассматриваются независимым образом [229]. Однако, учитывая, что первый процесс обусловлен внешними напряжениями, а второй связан с релаксацией внутренних, естественно предположить, что эти явления имеют единую природу. Покажем, что использование синергетических представлений позволяет построить полную картину деформации—отжига [226].

Следуя экспериментальной ситуации [224], рассмотрим монокристалл Ni, изначально подверженный деформации 80%, которая является настолько сильной, что включается двойниковый механизм. Тогда с течением

отжига при 350°C сначала образуются единичные двойники на границах областей измененной ориентировки, где наиболее велики напряжения. Затем, вместе с ростом этих двойников, на границах и в областях переориентировки образуются новые двойники, пока не произойдет их срастание, приводящее к изменению исходной ориентировки на двойниковую. Этот процесс носит характерные черты фазового превращения, описание которого достигается в рамках синергетической схемы.

Как и при деформации, роль параметра порядка играет спонтанная деформация ϵ ; сопряженное поле представляется компонентой σ тензора напряжений, обусловленных структурными несовершенствами; управляющий параметр сводится к плотности двойников ν . Тогда эволюция дефектной структуры в процессе отжига описывается системой дифференциальных уравнений (3.94) — (3.96), где интенсивность моды дефектов d заменяется напряжениями σ , а сдвиговое напряжение τ плотностью двойников ν (в общем случае под этой величиной следует понимать суммарную плотность N носителей пластической деформации — вакансий, дислокаций, двойников и т. д.).

Существенное различие между деформацией и отжигом состоит в том, что в первом случае зависимость $V(\epsilon)$ синергетического потенциала от параметра порядка не меняется при заданной внешней деформации ϵ_{ext} , а во втором ее минимум смещается влево—вверх (см. рис. 1.1а). Действительно, вид зависимости $V(\epsilon)$ определяется равенством (1.8), где под S_e следует понимать эффективную плотность носителей деформации N_e , определяемую внешними условиями. В ходе отжига термофлуктуационные процессы приводят к спаданию величины $N_e(t)$ и зависимость $V(\epsilon)$ изменяется указанным образом. В соответствии с этим поведение системы, задаваемое временной зависимостью $\epsilon_0(t)$ стационарного значения деформации $\epsilon_0(t) = \epsilon_g \sqrt{N_e(t)/N_c - 1}$, определяется законом отжига $N_0(t)$ эффективной плотности носителей деформации. Такое поведение напоминает структурную релаксацию металлических стекол [79], [80].

Проведенное рассмотрение указывает на иерархическую структуру картины отжига деформированных монокристаллов. Действительно, следует различать, по крайней мере, четыре типа процессов, отвечающих различным масштабам времени: микроскопические процессы, характеризуемые дебаевским временем; термофлуктуационные перескоки атомов, определяемые аррениусовским временем; переход в стационарное синергетическое состояние в течение эффективного времени релаксации (1.11); указанное выше изменение параметров синергетической модели типа $N_e(t)$. Процессы, протекающие при деформации, ограничиваются третьим из указан-

ных масштабов, тогда как отжиг связан с последним. Происходящее при этом спадание плотности дефектов $N_e(t)$ приводит к уменьшению стационарного значения деформации $\epsilon_0(t)$ и релаксации напряжений $\sigma_0(t)$.

3.4 Волны пластической деформации

Выше мы показали, что под действием интенсивной нагрузки ансамбль дефектов может испытывать автокаталитическое размножение с образованием гидродинамической моды пластического течения (раздел 3.2) или циклическое изменение плотности дефектов (раздел 3.3). В обоих случаях величина деформации монотонно возрастает с течением времени или остается постоянной. Это связано с тем, что в процессе самоорганизации поле деформации играет роль медленно меняющегося параметра порядка. В настоящем разделе будет рассмотрен более сложный случай, когда колебательный характер эволюции системы может проявляться при изменении самого поля пластической деформации.

Экспериментальное исследование такой ситуации проводилось на плоских образцах крупнозернистого сплава Fe – 3%Si (размер зерна $d \approx 10$ мм) и малоуглеродистой стали 10Г2Ф ($d \approx 80$ мкм) с размерами рабочей части $50 \times 10 \times 0.3$ мм³ и $50 \times 10 \times 1$ мм³ соответственно [230]. Использовался режим активного растяжения с постоянной скоростью $\dot{\epsilon}_{ext} = 3 \cdot 10^{-5}$ с⁻¹ на жесткой испытательной машине Instron–1185. Вид кривых деформации представлен на рис. 3.12. На указанных участках диаграмм производилась регистрация 5 – 8 спеклограмм, которые регистрировались в условиях пластического течения таким образом, что прирост деформации для каждой спеклограммы составлял 0.2%. Расшифровка спеклограмм дает распределение вектора смещений точек рабочей поверхности образца с шагом 1 мм. Картина этого распределения позволяет стандартным образом [93] определить компоненты сдвиговой деформации ϵ_{xy} и поворота ω_z (ось x направлена вдоль оси растяжения, а y лежит в его плоскости). По несколькими последовательно снятым спеклограммам строились пространственно–временные зависимости $\epsilon_{xy}(x, t)$ и $\omega_z(x, t)$ (рис. 3.13 – 3.15).

Для образца Fe – 3%Si они носят волновой характер с синфазным изменением сдвигов и поворотов. Период T , длина волны λ и скорость $v = \lambda/T$ имеют значения $3 \cdot 10^2$ с, 5 ± 2 мм и 10^{-3} см/с соответственно. Скорость v не зависит от размеров образца и зерна, однако растет по мере увеличения скорости нагружения $\dot{\epsilon}$, оставаясь на порядок выше скорости $1.6 \cdot 10^{-4}$ см/с движения захвата машины. Длина волны λ не зависит от скорости нагру-

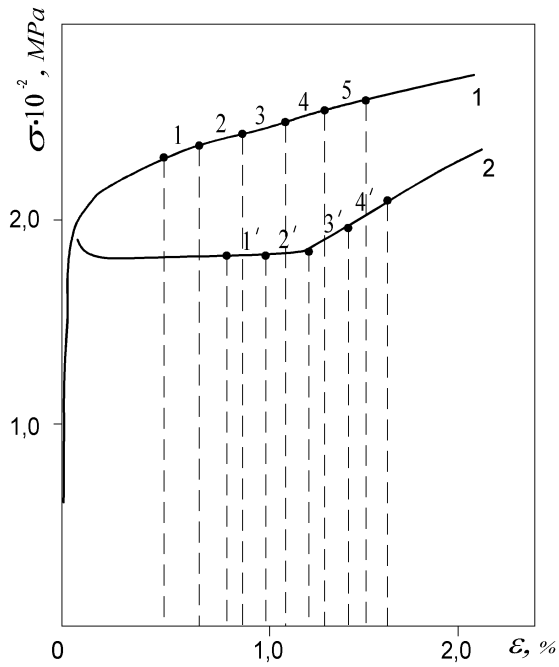


Рисунок 3.12 — Диаграммы нагружения образцов Fe + 3%Si (кривая 1) и стали 10Г2Ф (кривая 2). Цифрами отмечены участки, где регистрировались спеклограммы

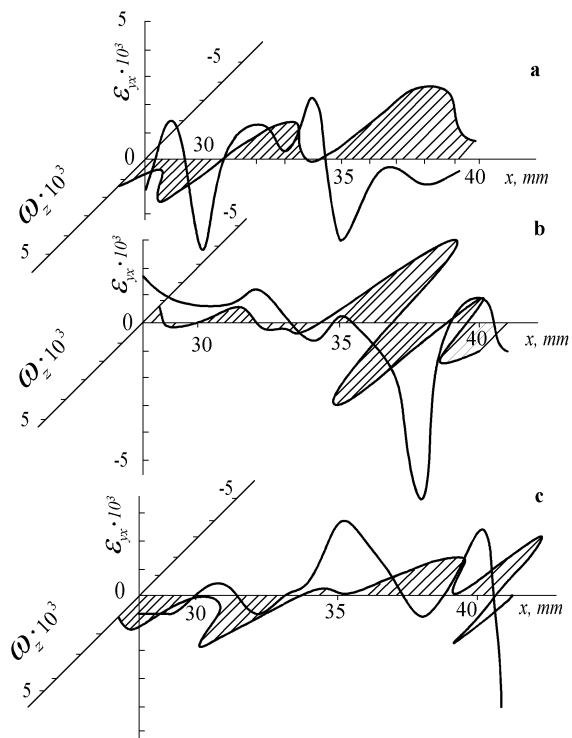


Рисунок 3.13 — Изменение пространственного распределения сдвиговой и поворотной компонент пластической деформации в Fe+3%Si. Прирост общей деформации: а — от 0.88 до 1.08%; б — от 1.08 до 1.28%; в — от 1.28 до 1.48%

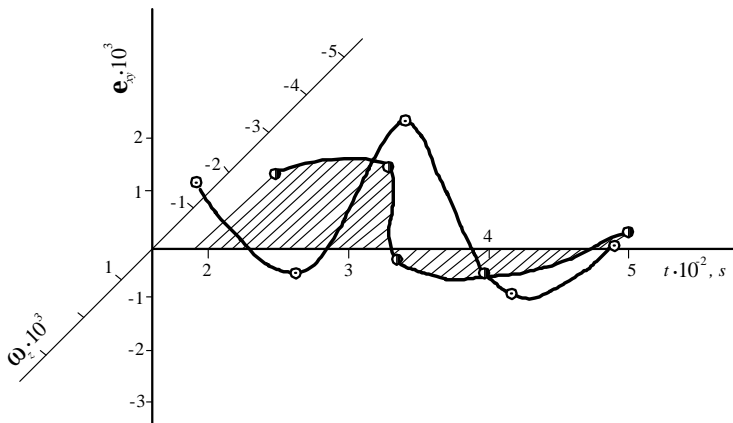


Рисунок 3.14 — Временная развертка компонент пластической деформации в Fe+3%Si

жения, но геометрические и структурные параметры образца изменяют ее. Так, при активном растяжении Al и аморфного сплава $\text{Fe}_{40}\text{Ni}_{40}\text{B}_{20}$ найдены линейная зависимость λ от поперечника образца и логарифмическая от размера зерна [231].

Существенно отличное поведение поля дисторсий наблюдается при деформировании малоуглеродистой стали. Известно, что на площадке текучести (рис. 3.12, кривая 2) в этом материале деформация развивается путем перемещения одной или нескольких полос Людерса [232]. Принято считать, что основная деформация локализована за фронтом полосы, а перед ним сдвиги отсутствуют, и материал практически не деформирован. Однако вид поля деформации, отвечающего площадке текучести, показывает (рис. 3.15а) наличие значительных сдвигов как за фронтом полосы Людерса, так и перед ним. При этом ярко выраженная цикличность сдвигов, типа наблюдающейся при деформировании образцов Fe – 3%Si, отсутствует. На зависимости $\omega_z(x)$ имеется резкий максимум, совпадающий с положением фронта полосы Людерса, а в случае двух встречных полос проявляются два экстремума $\omega_z(x)$ противоположного знака. После прохождения полосы по всему образцу происходит переход от площадки текучести к стадии упроч-

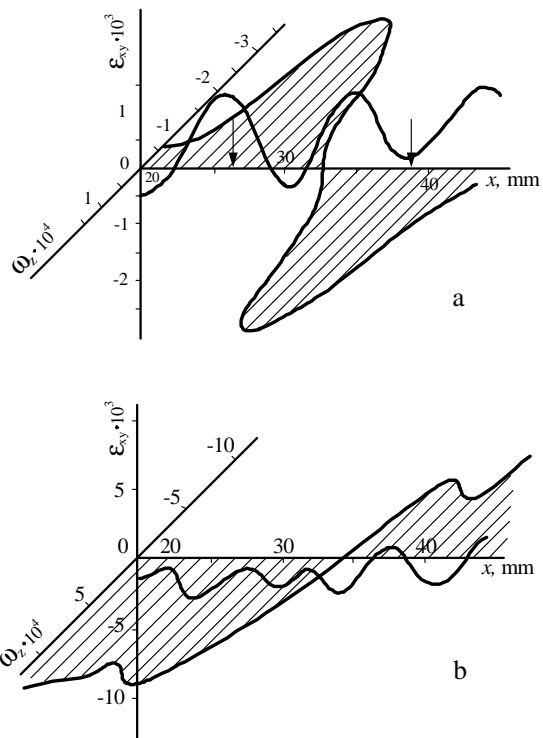


Рисунок 3.15 — Распределения сдвигов и поворотов в стали 10Г2Ф: а — на площадке текучести (полная деформация 1.0%); б — на участке упрочнения (полная деформация 1.6%). Стрелками указано положение фронтов полосы Людерса

нения (см. кривую 2 на рис. 3.12), экстремумы поворотов уничтожаются и распределения $\varepsilon_{xy}(x)$, $\omega_z(x)$ приобретают вид, подобный системе Fe–3%Si (рис. 3.15b). На этой стадии деформирования длина волны и скорость составляют $\lambda = 6 \pm 1$ мм, $v = 2.3 \cdot 10^{-3}$ см/с. Как и ранее, величина v на порядок превышает скорость движения захвата. Киносъемка процесса деформирования в скользящем пучке света показывает соизмеримость величины v со скоростью распространения фронта полосы Людерса.

Таким образом, можно заключить, что квазистатическая деформация сталей также проявляет черты волнового поведения, которое никоим образом не может быть сведено к упругим волнам, обладающим намного бóльшей скоростью $c \sim 10^5$ см/с. Этот процесс нельзя отождествлять также и с волнами пластичности Кольского [233], возникающими при ударном нагружении и имеющими скорость $\sqrt{\theta/\rho} \sim 10^4$ см/с, где $\theta = \partial\sigma/\partial\varepsilon$ — коэффициент упрочнения; ρ — плотность среды.

Для интерпретации полученных данных рассмотрим эволюцию одно-родной системы, параметризуемой деформацией ε и напряжением σ . В рамках феноменологического подхода, типа использованного в разделе 3.2.1, запишем уравнения движения в виде [234]:

$$\dot{\varepsilon} = -\frac{\varepsilon}{\tau} + \frac{\sigma}{\eta}; \quad (3.102)$$

$$\dot{\sigma} = \frac{\sigma_e - \sigma}{\tau_\sigma} - g \sigma \varepsilon. \quad (3.103)$$

Первое представляет уравнение Максвелла для вязкоупругой среды со временем релаксации $\tau = \eta/\mu$, задаваемым сдвиговой вязкостью η и модулем сдвига μ [235]. В правой части уравнения (3.103) первое слагаемое описывает релаксацию напряжений со временем τ_σ к уровню σ_e , фиксируемому внешней нагрузкой. Второй член учитывает нелинейные эффекты отрицательной обратной связи, обуславливающей уменьшение напряжений σ за счет концентрации энергии пластической деформации $\sigma\varepsilon$ (g — положительная константа этой связи). Характер эволюции системы задается тремя масштабами: временем пластического течения $\tau \geq 10^2$ с, временем $\tau_\sigma \sim \omega_D^{-1} \exp(Q/T)$ релаксации концентраторов напряжений за счет перераспределения дефектов (при дебаевской частоте $\omega_D \sim 10^{13}$ с⁻¹ и высоте барьера $Q \leq 1$ эВ значение $\tau_\sigma < 10^2$ с) и характерным временем g^{-1} нелинейной связи, величина которого значительно превосходит другие масштабы ($g\tau_\sigma < g\tau \ll 1$).

Стационарное состояние, в котором $\dot{\varepsilon} = 0$, $\dot{\sigma} = 0$, определяется значе-

ниями

$$\varepsilon_0 = \frac{1}{2g\tau_\sigma} \left[\left(1 + 4g\tau_\sigma \frac{\sigma_e}{\mu} \right)^{1/2} - 1 \right] \simeq \frac{\sigma_e}{\mu}, \quad \sigma_0 = \mu\varepsilon_0 \simeq \sigma_e, \quad (3.104)$$

где приближенные равенства записаны в предположении $g\tau_\sigma(\sigma_e/\mu) \ll 1$, которое обеспечивается как слабой обратной связью $g\tau_\sigma \ll 1$, так и малостью параметра внешнего воздействия $\sigma_e \ll \mu$. При малом отклонении от стационарного состояния (3.104) решение системы (3.102), (3.103) имеет вид

$$\varepsilon = \varepsilon_0(1 + ae^{\alpha t}), \quad \sigma = \sigma_0(1 + be^{\alpha t}), \quad (3.105)$$

где амплитуды $a, b \ll 1$. Подставляя (3.104), (3.105) в (3.102), (3.103), в линейном приближении по a, b получаем систему из двух однородных уравнений, условие разрешимости которой приводит к выражению для инкританта:

$$\alpha = -\gamma \pm \sqrt{\omega^2 - \beta^2}; \quad (3.106)$$

$$2\tau\gamma \equiv \left(\frac{\tau}{\tau_\sigma} + 1 \right) + (\beta\tau)^2; \quad (3.107)$$

$$2\tau\omega \equiv \left(\frac{\tau}{\tau_\sigma} - 1 \right) + (\beta\tau)^2; \quad (3.108)$$

$$\beta^2 \equiv g\varepsilon_0/\tau \simeq g\sigma_e/\eta. \quad (3.109)$$

Согласно (3.106) — (3.109) при значительном внешнем воздействии интенсивная обратная связь может обеспечить выполнение условия $\beta > \omega$, при котором возникает осциллирующее решение (3.105) с периодом

$$T \equiv \frac{2\pi}{\sqrt{\beta^2 - \omega^2}} \quad (3.110)$$

и временем затухания γ^{-1} . С изменением параметра β минимальное значение периода $2\pi\tau(2 - \tau/\tau_\sigma)^{-1/2}$ достигается в точке $(\beta\tau)^2 = 3 - \tau/\tau_\sigma$. Таким образом, пульсирующий режим однородного пластического течения требует настолько большого времени τ_σ релаксации концентраторов напряжений, чтобы по отношению ко времени пластической релаксации τ выполнялось условие

$$\tau_\sigma > \frac{\tau}{2}. \quad (3.111)$$

При этом внешнее воздействие должно обеспечивать напряжения $\sigma_e \simeq \mu \varepsilon_0$ в интервале, ограниченном значениями

$$\sigma_{\mp} = \frac{\mu}{g\tau} \left(1 \mp \sqrt{2 - \frac{\tau}{\tau_{\sigma}}} \right)^2. \quad (3.112)$$

Однако даже при оптимальном выборе величин отношение времени затухания к периоду не превышает значение

$$(\gamma T)^{-1} = \frac{1}{4\pi} \sqrt{2 - \frac{\tau}{\tau_{\sigma}}} \quad (3.113)$$

и колебания носят передемпфированный характер. Таким образом, условия возникновения однородного в пространстве и пульсирующего во времени пластического течения накладывают жесткие ограничения как на соотношение характерных времен релаксации, так и интенсивность внешнего воздействия.

Рассмотрим теперь волновой режим, в котором наличие пространственной неоднородности приводит к добавлению в правых частях (3.102), (3.103) слагаемых $\nu \nabla^2 \varepsilon$ и $D \nabla^2 \sigma$ соответственно, где $\nu = \eta/\rho$ — кинематическая вязкость; D — коэффициент диффузии дефектов. Добавляя в показатели экспонент (3.105), пространственное слагаемое $i\mathbf{k}\mathbf{r}$, характеризуемое волновым вектором \mathbf{k} , получаем инкремент типа (3.106), в котором с точностью до слагаемых порядка \mathbf{k}^2 пространственно-диспергирующие выражения (3.107), (3.108) принимают вид

$$\gamma_{\mathbf{k}} = \gamma + \frac{1}{2}(\nu + D)\mathbf{k}^2; \quad (3.114)$$

$$\omega_{\mathbf{k}} = \omega - \frac{1}{2}(\nu - D)\mathbf{k}^2. \quad (3.115)$$

Отсюда видно, что появление неоднородности приводит к уменьшению подкоренного выражения в инкременте (3.106), облегчая условия появления пульсирующего решения. Характерный масштаб L определяется соотношением

$$L^2 = - \frac{(\nu + D)\tau}{2} \pm \frac{\nu - D}{2} \frac{\omega\tau}{\sqrt{\omega^2 - \beta^2}}. \quad (3.116)$$

Таким образом, в условиях реализации пульсирующего режима ($\beta > \omega$) волна пластической деформации имеет характерную длину

$$\lambda = \sqrt{\frac{(\nu + D)\tau}{2}}, \quad (3.117)$$

не зависящую от внешнего воздействия, и затухает на расстояниях l , определенных равенством

$$l^2 = \frac{\nu - D}{2} \frac{\omega\tau}{\sqrt{\beta^2 - \omega^2}}. \quad (3.118)$$

Соответственно фазовая скорость $v \equiv \lambda\sqrt{\beta^2 - \omega^2}$ принимает нулевые значения на границах интервала (3.112). Максимальное значение

$$v_c = c\sqrt{\left(1 + \frac{D}{\nu}\right)\left(1 - \frac{\tau}{2\tau_\sigma}\right)}, \quad c^2 \equiv \frac{\mu}{\rho}, \quad (3.119)$$

которое намного меньше скорости звуковых волн c , достигается при критическом напряжении (ср. со (3.112))

$$\sigma_c = \frac{\mu}{g\tau} \left(3 - \frac{\tau}{\tau_\sigma}\right). \quad (3.120)$$

При этом масштаб затухания (3.118) принимает минимальное значение

$$l_c = \sqrt{\frac{(\nu - D)\tau}{2}} \left(2 - \frac{\tau}{\tau_\sigma}\right)^{-1/4}. \quad (3.121)$$

Укажем в заключение, что несмотря на параметризацию системы переменными деформация—напряжение, волновой процесс обеспечивается пространственно—временным распределением дефектов в силовом поле. Действительно, в условиях активного нагружения $\dot{\varepsilon}_{ext} = \text{const}$ первоначально концентраторы напряжений полностью стопорят перемещения дефектов, которые не могут обеспечить заданный уровень деформации. При этом наблюдается провал зависимости $\varepsilon(r, t)$. С течением времени поле $\sigma(r, t)$ локально возрастает до таких значений, что начинается движение дефектов, которое обеспечивает уровень деформации $\varepsilon(r, t)$, превышающий среднее значение — при этом наблюдается пик волнового процесса. Очевидно, такая картина может реализоваться лишь при соизмеримости времен τ , τ_σ и кинетических коэффициентов ν , D , величины которых характеризуют пластичность среды и вклад в нее движения дефектов. Превышение нижнего уровня напряжений σ_- (см. (3.112)) обеспечивает эффективное активирование концентраторов напряжений, однако при $\sigma > \sigma_+$ они не сказываются на движении дефектов. Разумеется, изложенную картину можно представить в переменных *деформация—плотность дефектов*. Переход к ним осуществляется по аналогии с синергетической схемой, изложенной в подразделе 3.3.1.

3.5 Возникновение иерархических дефектных структур в процессе развитой пластической деформации

Выше мы рассмотрели различные сценарии коллективного поведения дефектов в процессе пластической деформации. Их особенность состоит в том, что разные типы дефектов выступают равноправным образом. Действительно, в разделе 3.1 рассматривались настолько высокие плотности дефектов, что их поведение может быть представлено параметром перестройки конденсированной среды, характеризующим ее сверхпластичность. В разделе 3.2 рассматривался автокаталитический процесс, в котором дислокации и вакансии представлены равноправным образом. Однако уже в разделах 3.3, 3.4 подразумевалась иерархическая структура ансамбля дефектов. Так, для реализации картины, развитой в разделе 3.4, следует предположить, что имеются крупномасштабные дефекты высшего структурного уровня (клубки дислокаций, стыки границ зерен, выделения фазы и т. д.), которые играют роль концентраторов напряжений, стопорящих движение мобильных дефектов низшего уровня (дислокаций, вакансий и т. д.). Простота уравнений (3.102), (3.103) связана с пассивным поведением дефектов высшего уровня. В разделе 3.3 активными являются как дислокации, представляющие дефекты нижнего уровня, так и границы разориентировок, относящиеся к верхнему.

Простота указанных случаев обусловлена малым числом структурных уровней, не превышающим двух. Этот раздел посвящен исследованию противоположного случая, когда число уровней бесконечно велико. Сначала в подразделе 3.5.1 подробно исследуется ситуация, возникающая при ползучести твердого тела, а затем (подраздел 3.5.2) производится обобщение на произвольный режим пластической деформации [136].

3.5.1 Фрактальная кинетика ползучести твердого тела

Если напряжение σ , приложенное к твердому телу, превосходит критическое значение $\sigma_c \geq 10^{-5}\mu$, задаваемое модулем сдвига μ , то наблюдается необратимая ползучесть, которая выражается в плавном нарастании пластической деформации ε при постоянном напряжении $\sigma > \sigma_c$ и неполной релаксации величины $\varepsilon(t)$ к начальному значению $\varepsilon(0) = 0$ при снятии нагрузки [192]. В зависимости от температуры различают неустановившуюся

и установившуюся ползучести, характеризуемые соответственно чрезвычайно медленным (приблизительно логарифмическим) и линейным нарастаниями деформации со временем. Первый тип ползучести проявляется при температурах T , составляющих менее половины значения T_m температуры плавления, и характеризуется спаданием до нуля скорости деформации $\dot{\varepsilon} \equiv d\varepsilon/dt$ в течение времени постоянного нагружения. Второй наблюдается при температурах $T > T_c$, где $T_c \geq 0.5T_m$, и характеризуется выходом скорости $\dot{\varepsilon}$ при $t \rightarrow \infty$ на конечное значение $K(\sigma) \neq 0$. Вдали от точки плавления зависимость величины K от приложенного напряжения σ выражается степенным соотношением $K \propto \sigma^n$, $3 \leq n \leq 4.5$ при величинах σ намного ниже теоретической прочности $\sigma_{max} \sim 10^{-1}\mu$ и экспоненциальной зависимостью $K \sim \exp(C\sigma/T)$, $C = \text{const}$ при $\sigma \leq \sigma_{max}$. С переходом в область $T \leq T_m$ и при малых нагрузках $\sigma \leq \sigma_c$ наблюдается диффузионная ползучесть, характеризуемая линейной зависимостью $K(\sigma)$.

В настоящее время получили удовлетворительное объяснение те стороны описанной картины, которые могут быть сведены к простым моделям [192]. Наиболее ярко это проявляется вблизи температуры плавления, где диффузионная ползучесть лимитируется движением самого простого типа дефектов — вакансий, в соответствии с чем зависимости $\varepsilon = Kt$, $K \propto \sigma$ имеют наиболее простой вид. При понижении температуры включаются дислокационные механизмы и картина усложняется: так, если ансамбль дислокаций эволюционирует независимо от вакансий, как это имеет место в сплавах, то имеем $\varepsilon \approx Kt$, $K \propto \sigma^n$, $n \approx 3$; с включением связи между дислокациями и вакансиями (в чистых металлах) показатель n возрастает до значений $n \approx 5$ [192]. Дальнейшее включение носителей пластической деформации (дисклинаций, границ раздела и т. д.) при понижении температуры и росте напряжений приводит к нарастанию вклада $\varepsilon = At^\alpha$, $\alpha < 1$ неустановившейся ползучести. В определенном интервале температур и напряжений указанная степенная ползучесть сосуществует с логарифмической $\varepsilon = B \ln(1 + \nu t)$, $\nu = \text{const} > 0$. С дальнейшим понижением температуры и ростом напряжений установившаяся и неустановившаяся степенная ползучести пропадают и остается одна логарифмическая [192]. Таким образом, дополнительное включение механизмов, обеспечиваемых разнообразными носителями пластической деформации, приводит к ее замедлению. Если при установившейся ползучести задействованы только два типа носителей (вакансии и дислокации), то неустановившаяся стадия формируется вкладом весьма большого числа механизмов. По этой причине до последнего времени отсутствовала последовательная теория неустановившейся ползучести.

Вместе с тем развитие теории спиновых стекол привело к подходу [83], позволяющему охватить полный набор термоактивационных механизмов в рамках единой теоретической схемы. Приложению этого метода к теории неустановившейся ползучести посвящен этот раздел [136].

При нулевых значениях температуры и напряжений термодинамический потенциал имеет в конфигурационном пространстве состояний монотонно возрастающий вид с минимумом, отвечающим идеальной кристаллической структуре. Наложение нагрузки приводит к появлению минимумов, отвечающих дефектам кристаллического строения: первый появляется при минимальном значении $\sigma_c^{(1)}$, следующий при $\sigma_c^{(2)} > \sigma_c^{(1)}$ и т. д. (см. рис. 3.16).
Поэ

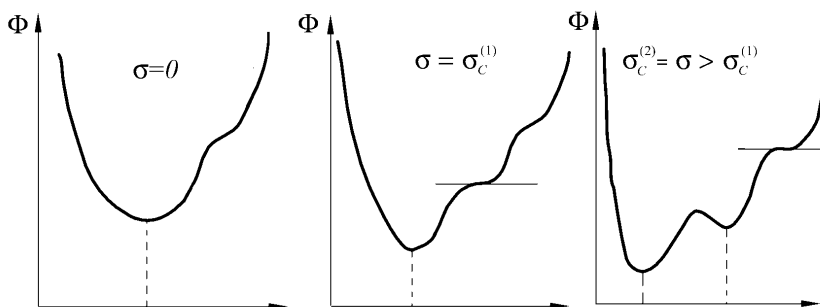


Рисунок 3.16 — Изменение вида термодинамического потенциала в конфигурационном пространстве состояний при увеличении нагрузки σ ($T = 0$)

тических значений $\sigma_c^{(n)}$, $n = 1, 2, \dots$, а с другой — к флуктуационной концентрации напряжений до значений $\sigma > \sigma_c^{(n)}$, обеспечивающих образование метастабильных дефектов. Таким образом, если после докритических напряжений $\sigma < \sigma_c$, $\sigma_c \equiv \sigma_c^{(1)}$ провести разгрузку, то система не будет устойчивой ни в одном из состояний, и релаксация напряжений протекает

по дебаевскому закону $\sigma(t) \propto \exp(-t/\tau_0)$, где τ_0 — микроскопическое время релаксации. Такая ситуация характеризует обратимую ползучесть [192].

С ростом напряжений $\sigma > \sigma_c$ сначала возникают изолированные дефекты типа вакансий и междоузельных атомов, которые при $\sigma \gg \sigma_c$ объединяются в кластеры и формируют более сложные образования. При этом характерно иерархическое поведение дефектов: так, точечные распределяются в соответствии с поведением линейных и поверхностных, линейные могут формировать границы раздела и т. д. На форме термодинамического потенциала это отражается в наличии минимумов и барьеров различного порядка (см. рис. 3.17). Например, дислокационным образованиям отве-

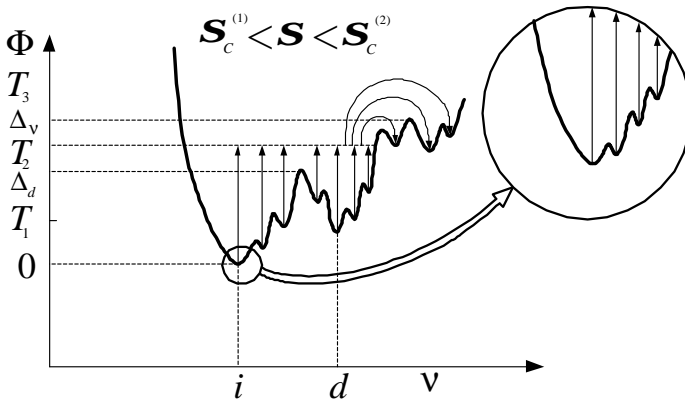


Рисунок 3.17 — Вид термодинамического потенциала в конфигурационном пространстве состояний твердого тела с дефектами при нагрузке $\sigma_c^{(1)} < \sigma < \sigma_c^{(2)}$

чает минимум d , отделенный от исходного i барьером высоты Δ_d . Однако на его грубую структуру накладывается более тонкая система минимумов, каждый из которых связан, например, с характером распределения примесей в облаках Котрелла. В свою очередь, каждый из этих минимумов может

иметь еще более тонкую структуру (см. рис. 2.8), связанную с электронными состояниями точечных дефектов.

В приведенной последовательности мы проследили иерархическую связь *сверху–вниз* — от дислокаций к точечным дефектам и их электронным состояниям. Разумеется, иерархия обнаруживается и в обратном направлении: дислокации объединяются в малоугловые границы, те формируют блочную структуру зерна, зерна определяют поведение всего образца. В настоящее время о каждой из ступеней иерархической лестницы принято говорить как о структурном уровне деформации и разрушения твердого тела [201]. При этом принято считать, что каждое конкретное явление обусловлено процессами, происходящими на определенном структурном уровне: диффузионная ползучесть связана с вакансиями, низкотемпературная установившаяся ползучесть — с дислокациями и т. д. [218]. Такой подход, однако, не объясняет явлений типа неустановившейся ползучести, в которых задействованы несколько структурных уровней, соподчиненных друг другу. Их следует рассматривать не по отдельности, а во взаимной связи — как ступени иерархической лестницы (см. раздел 2.3). Основным аргумент в пользу такой связи состоит в том, что на каждом из структурных уровней поведение системы определяется дефектами, которые когерентно объединяются в кластеры, формирующие поведение следующего уровня.

Изложенная картина означает, что термодинамический потенциал обладает фрактальным рельефом в конфигурационном пространстве деформированного твердого тела. Строго говоря, такое предположение является гипотезой, основанной на совпадении следующих из нее результатов с экспериментальными данными. Следуя теории спиновых стекол [81], можно показать правомерность этой гипотезы в приближении среднего поля. Действительно, с учетом пространственной неоднородности в распределении $\mathbf{j}_i \equiv \mathbf{j}(\mathbf{r}_i)$ потоков N дефектов по координатам \mathbf{r}_i , $i = 1, 2, \dots, N$ и условия неразрывности $\sum_i \mathbf{j}_i = \text{const}$ кинетическая энергия представляется в виде

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2} \sum_{ij} \hat{m}_{ij}^{-1} \mathbf{j}_i \mathbf{j}_j - \mathbf{v} \sum_i \mathbf{j}_i, \quad (3.122)$$

где \hat{m}_{ji} — тензор эффективной массы; \mathbf{v} — множитель Лагранжа. Обычно в пренебрежении корреляцией движения дефектов принимается $\hat{m}_{ji}^{-1} = 0$ при $i \neq j$, $\hat{m}_{ii}^{-1} = \text{const} \equiv \hat{m}^{-1}$. Следуя теории среднего поля [236], мы, напротив, будем считать параметр $\hat{m}_{ij}^{-1} \neq 0$ одинаковым для всех узлов $i \neq j$. Более того, он принимается случайной величиной, разбросанной вблизи среднего значения $(N\hat{m}_0)^{-1}$ с дисперсией $(\sqrt{N}\hat{\mu})^{-1}$. Тогда стандартная за-

мена $\mathbf{j}_i \mathbf{j}_j$ на $\mathbf{j}_i \mathbf{j}_j$, где \mathbf{j} — среднее значение потока (см. ниже), приводит кинетическую энергию (3.122) к виду, характерному для модели Шеррингтона—Киркпатрика [236], где роль изинговских спинов играют проекции потоков $j_i \equiv \mathbf{n} \mathbf{j}_i$ вдоль направления течения \mathbf{n} , обменный интеграл равен свертке $-\mathbf{n} \hat{m}_{ij}^{-1} \mathbf{n}$, поле представляется величиной $\mathbf{v} \mathbf{n} - \mathbf{n} \hat{m}^{-1} \mathbf{j}$, где $\hat{m}^{-1} \equiv \hat{m}_{ii}^{-1}$ — регулярное одноузельное значение. Подобно [237] отсюда можно получить вывод о флуктуационной неустойчивости хаотически движущихся дефектов в области температур $T < T_c$. С другой стороны, оказывается, что появляется бесконечное множество решений [238], а энтропия становится отрицательной [236]. Это обусловлено переходом системы дефектов в неэргодическое состояние [82], в котором фазовое пространство потоков Γ разбивается на перекрывающиеся подпространства Γ^α различных структурных уровней. Соответственно термодинамическое усреднение должно выполняться в два этапа — сначала по области Γ^α , а затем, с весовыми функциями $p_\alpha \leq 1$, $\sum_\alpha p_\alpha = 1$ — по их ансамблю ($\langle j \rangle = \sum_\alpha p_\alpha \langle j \rangle_\alpha$). Перекрывание областей Γ^α и степень иерархической соподчиненности дефектов характеризуются параметрами Паризи [81]:

$$q_{\alpha\beta} = \frac{1}{N} \sum_i \langle j_i \rangle_\alpha \langle j_i \rangle_\beta, \quad P(q) = \sum_{\alpha,\beta} \overline{p_\alpha p_\beta \delta(q - q_{\alpha\beta})}. \quad (3.123)$$

Здесь угловые скобки означают усреднение по подансамблю Γ^α , отмеченному соответствующим индексом, черта — по структурному параметру $\hat{\mu}$ в гауссовом распределении тензора обратной массы. Функция распределения $P(q)$, первый момент которой дает пространственный фурье—образ при волновом векторе $\mathbf{k} = 0$ для структурного фактора

$$S(\mathbf{r}, t) \equiv \overline{\langle j(\mathbf{r}, t) j(0, 0) \rangle} = \sum_{\alpha,\beta} p_\alpha p_\beta S_{\alpha\beta}(\mathbf{r}, t),$$

$$S_{\alpha\beta}(\mathbf{r}, t) \equiv \overline{\langle j(\mathbf{r}, t) \rangle_\alpha \langle j(0, 0) \rangle_\beta}, \quad (3.124)$$

характеризует бинарное распределение перекрытий областей Γ^α . Исследование трехточечного распределения $P(q_1, q_2, q_3)$ показывает [83], что всегда выполняется условие ультраметричности $q_1 = q_2 \leq q_3$. Оно выражает иерархическую природу кластеризации дефектов: если выбрать две области $\Gamma^\alpha, \Gamma^\beta$ с перекрытием $q_{\alpha\beta}$ не менее граничного значения q , то условие ультраметричности означает, что любая третья область Γ^γ будет перекрываться с предыдущими не меньше, чем они между собой — образуется кластер с уровнем перекрытия q .

В рамках принятой картины эволюция дефектов, определяющая процесс ползучести, представляется следующим образом. При нагрузке в области неэргодичности $T < T_c(\sigma)$ за микроскопическое время τ_0 устанавливается термодинамическое равновесие в каждой из подсистем дефектов, отвечающих областям Γ^α . Затем происходит перекрытие этих областей, отвечающее движению в ультраметрическом пространстве структурных уровней. Геометрическим образом такого пространства является дерево Кейли, приведенное на рис. 2.8b. Здесь структурные уровни изображаются горизонтальными линиями, узлы дерева отвечают дефектам данного типа, связь между ними указывают ветви дерева. Рис. 2.8 показывает соответствие между иерархическим деревом и фрактальной зависимостью термодинамического потенциала в конфигурационном пространстве состояний. Впервые концепция ультраметрического пространства и соответствующая ей фрактальная термодинамика использовались для описания критически замедленной эволюции спиновых стекол, обладающих однородным ультраметрическим пространством [81]. В отличие от них дефекты кристаллического строения представляют, как будет видно далее, сильно неоднородную иерархическую систему.

Для проведения дальнейшего анализа удобно перейти к континуальному представлению ультраметрического пространства, переписывая коррелятор (3.124) в виде интеграла по расстоянию $u \equiv u_{\alpha\beta}$ в ультраметрическом пространстве:

$$S(t) = \int_0^\infty p(u) S_u(t) du, \quad S_u(t) \equiv \sum_\beta p_\beta S_{\alpha\beta}(\mathbf{r}, t). \quad (3.125)$$

Здесь мы отвлекаемся от пространственной неоднородности в распределении дефектов, $p(u)$ — плотность вероятности находиться точке α на расстоянии u от β . Согласно определению [83] расстояние u между двумя точками ультраметрического пространства, отвечающими заданным комплексам дефектов, определяется числом шагов к вершине дерева Кейли до тех пор, пока не сойдутся ветви, ведущие от этих точек (рис. 2.8b). Физически это означает иерархическое объединение системы дефектов.

Подобно тому как поток j разбивается на дрейфовую и диффузионную составляющие, полный коррелятор (3.125) состоит из атермической \bar{S} и термофлуктуационной $\tilde{S}(t)$ компонент. Первая связана с атермическим возбуждением состояний, отвечающих минимумам термодинамического потенциала $\Phi(u)$, которые лежат ниже данного значения температуры T . Вторая компонента обусловлена термофлуктуационным преодолением барьеров термодинамического потенциала, высота которых больше T

(см. рис. 3.17). Соответственно удельный коррелятор $S_u(t)$ сводится к постоянной $\mathcal{S}(u)$ в первом случае и к дебаевскому закону во втором:

$$S_u(t) = \begin{cases} \mathcal{S}(u) & \text{при } u < u(T), \\ \tilde{\mathcal{S}}(u) \exp[-t/\tau(u)] & \text{при } u > u(T). \end{cases} \quad (3.126)$$

Здесь граничное расстояние $u(T)$ задается условием $T = \Phi(u)$, время термомфлуктуации $\tau(u)$ имеет аррениусовский вид

$$\tau(u) = \tau_0 \exp \left\{ \frac{1}{T} \int_{u(T)}^{\infty} d\Phi(u) \right\}, \quad (3.127)$$

где τ_0 — микроскопический масштаб. В результате получаем

$$S(t) = \bar{S} + \tilde{S}(t); \quad \bar{S} \equiv \int_0^{u(T)} p(u) \mathcal{S}(u) du, \quad (3.128)$$

$$\tilde{S}(t) \equiv \int_{u(T)}^{\infty} p(u) \tilde{\mathcal{S}}(u) \exp \left\{ -\frac{t}{\tau} \left[\frac{1}{T} \int_{u(T)}^{\infty} d\Phi(u) \right]^{-1} \right\} du. \quad (3.129)$$

В иерархически однородных системах, типа спиновых стекол, атермическая компонента \bar{S} имеет тривиальный смысл, и ее обычно опускают [239].

Ранее мы видели, что в рассматриваемом случае некоторые дефекты (дислокации, вакансии и др.) могут давать независимый вклад в ползучесть. На зависимости термодинамического потенциала от конфигурационной координаты (рис. 3.17) это выражается в наличии минимумов, отделенных от исходного состояния i барьерами большой высоты Δ_m , $m = 1, 2, \dots$. Соответственно ультраметрическое пространство изображается неоднородным деревом Кейли, имеющим нулевую ветвимость на расстояниях $u < u_m$, задаваемых условием $\Phi(u) = \Delta_m$. Это означает, что в распределение $p(u)$ системы по ультраметрическому пространству следует ввести набор δ -образных особенностей:

$$p(u) = p_0(u) + \sum_m p_m \delta(u - u_m), \quad (3.130)$$

где $p_0(u)$ — плавная функция, отвечающая однородному распределению. При заданной температуре T в атермическом режиме проявляются только

те особенности, которые удовлетворяют условию $\Delta_m < T$, и соответствующая компонента коррелятора принимает вид

$$\bar{S} = S_0 + \sum_m S_m; \quad S_0 \equiv \int_0^{u(T)} p_0(u) \mathcal{S}(u) du, \quad S_m \equiv p_m \mathcal{S}(u_m), \quad (3.131)$$

где суммирование проводится при условии $\Delta_m < T$, отвечающем неравенству $u_m < u(T)$. Монотонно изменяющуюся составляющую S_0 удобно переписать как

$$S_0 = S_0^{(0)} + \sum_m S_0^{(m)}, \quad S_0^{(m)} \equiv \int_{\Delta_m}^{\Delta_{m+1}} p_0(u) \mathcal{S}(u) du. \quad (3.132)$$

Нулевое слагаемое $S_0^{(0)}$, отвечающее исходному минимуму i термодинамического потенциала, для коррелятора потоков сводится к нулю по определению, остальные члены $S_0^{(m)}$ перенормируют величины S_m . Принимая эту перенормировку проведенной, слагаемое S_0 в (3.131) можно опустить. В результате коррелятор принимает окончательный вид

$$S(t) = \sum_m S_m + \tilde{S}(t), \quad (3.133)$$

где постоянные атермические слагаемые S_m определяются последней формулой (3.131), а переменная составляющая $\tilde{S}(t)$ — выражением (3.129).

Характерная особенность атермических слагаемых S_m состоит в том, что с ростом температуры они постепенно включаются в сумму (3.133): так, при $T < \Delta_1$ все члены $S_m = 0$, в интервале $\Delta_1 < T < \Delta_2$ имеем одно ненулевое слагаемое S_1 , в общем случае $\Delta_m < T < \Delta_{m+1}$ отличны от нуля слагаемые от S_1 до S_m . Указанная выше перенормировка членов S_m добавками $S_0^{(m)}$ обуславливает их зависимость от параметров состояния T , σ . Поскольку с ростом температуры и уменьшением напряжений зависимость термодинамического потенциала от конфигурационной координаты сглаживается (см. рис. 3.16, 2.8b), то распределение $p_0(u)$ сужается и слагаемые $S_0^{(m)}$ возрастают. Таким образом, можно заключить, что слагаемые S_m возрастают с увеличением температуры и уменьшением напряжений.

Переходя к анализу временной зависимости $\tilde{S}(t)$, отметим, что согласно (3.129) она определяется формой функции распределения $P(u) = p(u) \tilde{S}(u)$,

с одной стороны, и скоростью $\Phi'(u) = d\Phi(u)/du$ нарастания термодинамического потенциала в ультраметрическом пространстве — с другой. Определение этих зависимостей приводит к отдельной задаче, решение которой изложено в разделе 2.3. Поскольку при интерпретации экспериментальных данных нас интересует асимптотическое поведение коррелятора $\tilde{S}(t)$ при $t \rightarrow \infty$, то можно воспользоваться мажорантами зависимостей $P(u)$, $\Phi'(u)$. Так, для первой принимаем (2.57), где медленно спадающая степенная зависимость $p_s(u) \Rightarrow P_s(u)$ характеризует сильную иерархическую связь, а экспоненциальная зависимость $p_w(u) \Rightarrow P_w(u)$ отвечает слабо иерархическим системам.

В рамках феноменологического подхода форма фрактального рельефа аппроксимируется зависимостями

$$\Phi'_p(u) = Qau^{a-1}, \quad \Phi'_e(u) = (Q/u_0)e^{u/u_0}, \quad (3.134)$$

выбор которых ограничен условием нарастания функции $\Phi(u)$ (здесь Q , a , u_0 — положительные постоянные). Переходя от скорости $\Phi'(u)$ к самой зависимости $\Phi(u)$, следует выделить случай $a = 0$. В результате получаем возможные виды фрактального рельефа (2.56). Подставляя зависимости (2.56), (2.57) в исходное выражение (3.129), с помощью метода перевала находим асимптотики $\tilde{S}(t)$ при $t \rightarrow \infty$.

Как видно из таблицы 2.1, в сильно иерархических системах критическое замедление пластического течения (переход от экспоненциального режима к степенному) реализуется уже при бесконечно медленном (логарифмическом при $a = 0$) нарастании высоты фрактального рельефа $\Phi(u) \propto u^a$. В слабо иерархических системах это происходит только при нарастании более быстром, чем линейное ($a > 1$). Отсюда следует, что в первом случае роль масштабного фактора играет величина u_0 , а во втором — показатель a , ограниченный значением $a_{min} = 1$. В подкритическом режиме ($u_0 \rightarrow \infty$, $a < 0$) замедление сказывается только в начальный период $t \ll \tau_{max}$, а при $t > \tau_{max}$ имеем $\tilde{S}(t) \sim \exp(-t/\tau_{max})$ [106].

Приступая к интерпретации полученных данных, будем исходить из того факта, что временная зависимость $\dot{\varepsilon}(t)$ скорости деформации определяется условной вероятностью иметь поток $j(t)$ в момент t , если при $t = 0$ он составлял $j(0)$. Иными словами, мы полагаем, что скорость ползучести $\dot{\varepsilon}(t)$ сводится к коррелятору $S(t)$, определенному равенством (3.124). Согласно [192] величина этой скорости представляется суммой

$$\dot{\varepsilon}(t) = K + \delta\dot{\varepsilon}(t), \quad (3.135)$$

постоянное слагаемое K которой характеризует установившуюся ползучесть, а спадающий вклад $\delta\dot{\epsilon}(t)$ — неустановившуюся. Сравнивая определение (3.135) с нашим основным результатом (3.133), для скорости установившейся ползучести находим

$$K = \sum_m K_m, \quad K_m = S_m \theta(T - \Delta_m), \quad (3.136)$$

где величина $S_m = S_m(T, \sigma)$ монотонно возрастает с температурой и напряжениями (см. гл. IV в [192]); $\Delta_m = \Delta_m(\sigma)$ — спадающая зависимость высоты барьера от напряжений; $\theta(x) = 0$ при $x < 0$ и $\theta(x) = 1$ при $x > 0$. Неустановившаяся ползучесть $\delta\dot{\epsilon}(t)$ асимптотически представляется зависимостями $\tilde{S}(t)$, приведенными в таблице 2.1.

Развитая картина позволяет представить различные режимы ползучести диаграммой, показанной на рис. 3.18. Установившаяся ползучесть, отвечающая атермическому преодолению барьеров Δ_m , реализуется при высоких температурах ($T > \Delta_1$). Поскольку на опыте [192] с ростом температуры первым проявляется дислокационный механизм установившейся ползучести, а затем (вблизи плавления) вакансионный, то можно заключить, что $\Delta_d < \Delta_v$ (см. рис. 3.17). Вместе с тем в установившуюся ползучесть должны давать вклад и другие механизмы — зернограничный, движение зерен как целого и т. д. При наложении высоких напряжений в первую очередь включаются наиболее эффективные механизмы ползучести: сначала изменяются макроскопические объемы, затем перестраиваются конгломераты зерен, их границы, скопления дисклинаций и дислокаций, точечные дефекты. В рамках нашей схемы это означает, что с ростом температуры в указанной последовательности преодолеваются барьеры Δ_m — наиболее низким обладают макрообъемы, затем конгломераты зерен, отдельные зерна и т. д. Соответственно при смещении вниз от ствола дерева Кейли (рис. 2.8b) сначала отделяются ветви макрообъемов, затем — ветви конгломератов зерен, отдельных зерен и т. д. То, что в экспериментах [192] проявились только два из указанных механизмов, указывает на интенсивность их вкладов S_m в установившуюся ползучесть — движение макрообъемов сказывается меньше, чем для конгломератов зерен; соответственно для последних вклад S_m меньше, чем для отдельных зерен и т. д. Иными словами, в иерархии механизмов установившейся ползучести наблюдается следующее соответствие: чем больше величина Δ_m в ряду возможных барьеров, тем меньше соответствующий вклад S_m в скорость ползучести (сложные носители пластической деформации требуют преодоления малых барьеров Δ_m , но обладают невысокими подвижностями S_m). Такое поведение под-

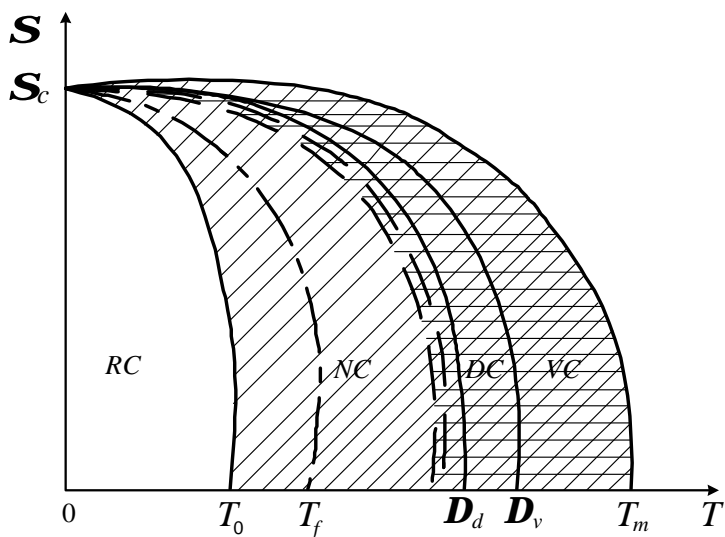


Рисунок 3.18 — Диаграмма ползучести в осях *напряжения–температура*.

Сплошными линиями разделены области RC, NC, DC, VC, отвечающие обратимой, необратимой, дислокационной и вакансионной ползучестям. Наклонной штриховкой отмечена область неустановившейся ползучести, горизонтальной — установившейся

тверждается оценкой величин S_m : так, для дислокаций в поле собственных точечных дефектов (вакансий) имеем $S_1 \propto \sigma^{4.5}$ при замене вакансий атомами примеси $S_2 \propto \sigma^3$, в случае чисто вакансионного механизма $S_3 \propto \sigma$ [192]. Поскольку указанные соотношения представляют первые члены ряда по малой величине σ/μ , то можно заключить, что при данном значении σ имеем $S_1 < S_2 < S_3$.

Для неустановившейся ползучести из таблицы 2.1 зависимостей $\tilde{S}(t)$ видно, что отвечающая логарифмической ползучести асимптотика $\delta\dot{\epsilon}(t) \propto \tilde{S}(t) \sim t^{-1}$ может реализоваться только при логарифмически медленном нарастании высоты фрактального рельефа в сильно иерархических системах и при степенном — в слабо иерархических. По-видимому, реальная система дефектов является слабо иерархической: так, поведение зерна как целого обуславливается его границами, но практически не чувствительно к перераспределению дислокаций и точечных дефектов, действие которых опосредовано через границы [192]. Кроме того, легко убедиться, что экспоненциальному нарастанию $\Phi_e(u)$ высоты рельефа в ультраметрическом пространстве отвечает линейное увеличение термодинамического потенциала с ростом геометрического объема. Действительно, если удвоению размера кластера в реальном геометрическом пространстве отвечает один шаг по уровням в ультраметрическом, то числу u таких шагов — объем, пропорциональный $2^u = e^{u \ln 2}$. Таким образом, только в том случае, если носитель пластической деформации проявляет себя как термодинамическая фаза, ему можно сопоставить экспоненциальную зависимость $\Phi_e(u)$. Очевидно, такая ситуация реализуется, начиная с уровня зерен, а наблюдаемые на опыте [192] дислокационная и вакансионная ползучести характеризуются более слабой степенной зависимостью $\Phi_p(u)$. В результате для скорости неустановившейся ползучести получаем

$$\delta\dot{\epsilon}(t) = A \exp \left\{ - \left(\frac{Q}{T} \ln \frac{t}{\tau_0} \right)^{\frac{1}{a}} \right\}. \quad (3.137)$$

Здесь A — постоянная; характерная высота рельефа $Q \equiv \Delta_1$ монотонно спадает с ростом напряжений, а температурная зависимость показателя принимается в виде $a - 1 \propto T - T_0$. Ниже точки T_0 , где $a < 1$, зависимость (3.137) носит экспоненциальный характер; при $T = T_0$ она становится квазистепенной

$$\delta\dot{\epsilon}(t) = A \left(\frac{\tau_0}{t} \right)^{\frac{Q}{T}} \quad (3.138)$$

и сохраняет такой характер выше T_0 . Таким образом, температура T_0 играет роль точки, начиная с которой проявляется критическое замедление

процесса ползучести.

В результате получаем следующую картину неустановившейся ползучести. До температуры T_0 существенны те механизмы, которые дают экспоненциально быстрое спадание скорости $\delta\dot{\varepsilon}(t)$, и величина $T_0(\sigma)$ задает верхнюю границу области обратимой ползучести (см. рис. 3.18). Выше T_0 включаются механизмы деформации, характеризуемые нарастающей скоростью $\dot{\Phi}(u)$ изменения фрактального рельефа. Физически это означает вклад в процесс деформации таких комплексов дефектов, которые обуславливают более быстрое увеличение термодинамического потенциала, чем для независимых дефектов. В результате происходит критическое замедление процесса ползучести: непосредственно в точке $T = T_0$ имеем логарифмическое поведение $\varepsilon(t)$, а с ростом $T - T_0$ включаются еще более медленные механизмы. Такое замедление деформации воспринимается на опыте как полная остановка при температурах ниже точки замерзания T_f , даваемой соотношением (2.58). Однако действие указанных механизмов проявляется только до момента, ограниченного временем τ_{max} . При $t \gg \tau_{max}$ иерархическая связь нарушается и процесс ползучести опять убыстряется.

Представленная картина отвечает реализации одной иерархической ветви, для которой задействованы состояния исходного минимума термодинамического потенциала i (см. рис. 3.17). При температурах $T > \Delta_1$, кроме атермических процессов установившейся ползучести, становятся существенными термофлуктуационные процессы, связанные с возбуждением состояний дислокационных, вакансионных и других комплексов. Поскольку каждому из них отвечает своя иерархическая ветвь на дереве Кейли (см. рис. 2.8b), а следовательно, и свой закон спадания коррелятора $\tilde{S}(t)$, то с появлением установившейся ползучести изменяется также и характер неустановившейся — вместо одной зависимости $\tilde{S}(t)$ получаем суперпозицию слагаемых, отвечающих различным параметрам a . Именно такая ситуация наблюдается в эксперименте [192].

Отметим в заключение важное различие между системой дефектов кристаллического строения и спиновым стеклом, по аналогии с которым мы провели рассмотрение временной зависимости отклика на внешнее механическое воздействие. Это различие связано с тем, что в спиновом стекле роль мельчайших структурных единиц играют спины, полное число которых составляет $N_0 \sim 10^{23} \text{ см}^{-3}$, тогда как плотность дефектов $N \ll N_0$ намного меньше. Поскольку ползучесть связана с эволюцией дефектов, а не атомов, то ее особенности определяются поведением ансамбля дефектов. Однако их вклад в термодинамические характеристики в $N_0/N \gg 1$ раз меньше атомного и практически не обнаружим на фоне атомного. Фи-

зическая причина состоит в том, что термическое возбуждение воспринимается всей атомной системой, а механическое (точнее, его пластическая составляющая) — только дефектами.

3.5.2 Эволюция дефектной структуры в процессе пластической деформации

Обобщим картину образования иерархической дефектной структуры в процессе пластической деформации. Длительное время его течение связывалось с автономной эволюцией различного рода дефектов кристаллического строения, которые, взаимодействуя между собой и испытывая действие внешних полей, оставались самостоятельными структурными образованиями, обладающими присущими им свойствами (геометрической конфигурацией, распределением упругих полей и т. д.) [192, 194]. В рамках такой концепции пластическая деформация образца представлялась как результат эргодического поведения системы дефектов, траектории которых с течением времени заполняют все фазовое пространство. С другой стороны, предполагалось отсутствие иерархической соподчиненности в поведении дефектов под действием силовых полей и термостата. В такой постановке зависимость термодинамического потенциала от конфигурационных координат имеет вид регулярного распределения минимумов, наименьший из которых отвечает устойчивому состоянию, а остальные метастабильным. В результате эволюция системы представлялась как цепочка дебаевских процессов термофлуктуационного преодоления барьеров между минимумами термодинамического потенциала со временами релаксации, определяемыми аррениусовским соотношением.

Такая картина реализуется при малых степенях пластической деформации. В противоположном случае — а именно он, как правило, реализуется на практике — плотность дефектов достигает столь высоких значений, что проявляются коллективные эффекты в их поведении. Это означает установление когерентной связи в ансамбле дефектов типа той, что обуславливает фазовые и кинетические превращения. Однако если для последних характерно гомогенное распределение, то установление когерентной связи в ансамбле дефектов одного структурного уровня приводит к автолокализованному образованию, играющему роль структурного элемента на более высоком уровне. Так, кластеризация вакансий может приводить к образованию дислокационных петель [189, 194], скопление дислокаций — к появлению границ разориентировки и дисклинаций [200]. Данное отличие в коллективном поведении дефектов от обычной картины фазовых превраще-

ний обусловлено сильной неравновесностью ансамбля дефектов в процессе развитой пластической деформации, в связи с чем реализуется не термостатическое, а кинетическое превращение [92]. Автолокализованный характер продуктов этого превращения (супердефектов) является следствием потери эргодичности [82], которая приводит к иерархической соподчиненности, означающей, что супердефект образуется в результате когерентной связи дефектов, принадлежащих более низким структурным уровням. Поскольку на зависимости термодинамического потенциала от конфигурационных координат исходным дефектам отвечают более узкие минимумы, чем супердефектам, то иерархическая соподчиненность означает фрактальную структуру распределения термодинамического потенциала в конфигурационном пространстве [240].

Как показывают примеры спиновых стекол [81], мартенситных превращений [139], политипных структур [105] и ползучести кристаллов [136], фрактальный характер системы коренным образом изменяет ее термодинамические и кинетические свойства. Это обусловлено разбиением конфигурационного пространства на множество областей (долин или компонент [82]), каждой из которых отвечает свой статистический ансамбль. В результате определение средних производится в два этапа: сначала усреднением по чистому ансамблю данной долины, а затем — по ансамблю долин. Кинетическое поведение такой системы обусловлено слабым восстановлением эргодичности в процессе объединения долин в кластеры более крупных компонент. Этот процесс представляется движением по узлам иерархического дерева Кейли, которые отвечают долинам, к его стволу, причем роль времени играет величина пластической деформации ε (рис. 2.8b).

Если приведенное представление конфигурационного пространства дефектов посредством ультраметрической топологии является оригинальным, то внешняя сторона картины иерархического поведения дефектов в процессе развитой пластической деформации получила большое распространение [200, 201, 218]. Имея в виду ее важность, представим основные черты пластической деформации за счет взаимодействия дефектов, относящихся к различным структурным уровням. В отличие от аморфных систем их число сравнительно невелико: по характерному масштабу l_α принято выделять микроскопический уровень ($a \ll l_1 \ll d$, a — межатомное расстояние, d — размер однородно ориентированной области типа ячейки или фрагмента), мезоскопический ($d \ll l_2 \ll D$, D — размер слабо разориентированной области, например зерна) и макроскопический ($D \ll l_3 \leq L$, L — характерный размер образца).²⁾ На каждом из представленных уровней пластиче-

²⁾Иногда в рамках последнего структурного уровня выделяют скоррелирован-

ская деформация осуществляется путем однородного течения дефектов — точечных, дислокаций, дисклинаций, планарных и т. д. Микроскопический уровень отвечает однородному распределению точечных дефектов, дислокаций и дисклинаций, мезоскопический — распределению ячеек и фрагментов, макроскопический — неоднородно ориентированным зернам, текстурным компонентам и т. д. [200]. С ростом степени пластической деформации ε каждый последующий структурный уровень зарождается в недрах предыдущего, когда тот за счет повышения однородной плотности дефектов исчерпает ресурс своего эволюционного развития. Так, первые границы ячеек зарождаются, когда критического значения достигает плотность дислокаций; частичные дисклинации (границы фрагментов) возникают при уменьшении размеров до ~ 0.2 мкм слабо разориентированных ячеек; ножевые границы, оканчивающиеся дисклинацией, появляются с формированием развитой фрагментированной структуры с большими разориентировками. Обусловленный пластической деформацией рост характерного масштаба $l(\varepsilon)$ выше критического l_α приводит к неустойчивости однородного распределения дефектов на расстояниях $x > l_\alpha$ и автолокализованному образованию носителя пластической деформации на $(\alpha + 1)$ -м структурном уровне. Так, при $l(\varepsilon) > l_1$ пластическая неустойчивость приводит к образованию дислокаций, дисклинаций и их комплексов, при $l(\varepsilon) > l_2$ — полос сильных сдвигов—поворотов, при $l(\varepsilon) > l_3$ — макроскопических ротационно—сдвиговых полей [200]. Включение в процесс пластической деформации каждого последующего структурного уровня не носит эволюционный характер, поскольку оно обусловлено спонтанным появлением новых гидродинамических (трансляционных и ротационных) мод при $l(\varepsilon) = l_\alpha$. Разумеется, после зарождения структуры, отвечающей $(\alpha + 1)$ -му уровню, занимаемый ею объем будет плавно возрастать за счет уменьшения объемов структур, соответствующих уровням $1, 2, \dots, \alpha$ (здесь ситуация аналогична фазовому равновесию в термодинамике). Кроме того, с ростом ε функция распределения p_α может меняться таким образом, что будет существенна лишь узкая группа уровней (так, при хрупком разрушении определяющими являются уровни $\alpha = 1, 2$ [200]).

Несмотря на достигнутое понимание экспериментальной ситуации [200, 201, 218], построение полной картины пластической деформации сдерживалось тем, что до последнего времени не в полной мере осознавалась иерархическая природа дефектной структуры. Если положить, что каждо-

ные конгломераты зерен и т. д. [196, 201]. Различают также структурные уровни, связанные с распределением дефектов (так, в [200] нижний уровень определяется плотностью дислокаций).

му структурному уровню отвечает горизонтальная линия дерева Кейли (или соответствующий уровень разрешения минимумов термодинамического потенциала на рис. 2.8), то микроскопическая картина развитой пластической деформации может быть представлена в рамках фрактальной кинетики иерархизованных структур (см. подраздел 3.5.1). Следует, однако, иметь в виду одно важное обстоятельство. Подход, основанный на использовании континуального ультраметрического пространства, предполагает, что число уровней бесконечно велико, а характер связи между ними не существенен, и важна только структура дерева. В нашем случае число структурных уровней (отвечающих дислокациям, дисклинациям, зернам, их конгломератам, ..., образцу) заведомо невелико и принципиально важен характер их связи. Поэтому полное описание картины пластической деформации не может быть достигнуто в рамках аналитического подхода, изложенного в подразделе 3.5.1, и следует использовать численные методы, в рамках которых поле деформации на данном уровне определяется стандартным образом [241], а связь со следующим структурным уровнем задается через граничные условия.

Глава 4

Синергетика разрушения твёрдого тела

Как правило, важность физического явления в прикладной области является надёжной гарантией повышенного интереса исследователей, а следовательно, и убыстренного осознания природы этого явления. Что касается первого — интереса исследователей, то физика прочности не может пожаловаться на его отсутствие или хотя бы недостаточность: многочисленный материал по явлениям, так или иначе относящимся к разрушению твёрдого тела, отражен в тематических сборниках [242] и монографиях [218], [243] — [245]; проблемам прочности посвящены журналы, конференции, отдельные тематические выпуски... И тем не менее о сложившейся ситуации складывается впечатление, что уровень понимания физической природы явления отвечает стадии "разглядывания деревьев по отдельности, а не всего леса в целом".

Причина столь парадоксального сочетания повышенного внимания к проблеме прочности и достаточно скромного продвижения в осознании физической картины явления заключается в ее чрезвычайной сложности. Не говоря уже о номенклатурном проявлении этой сложности — интерпретация явления разрушения требует привлечения специалистов по физике, химии, механике, инженеров—конструкторов — в реальных условиях процесс разрушения проявляется весьма многоликим образом. Во многом это связано с многообразием элементарных актов разрушения, при интерпретации которых до последнего времени господствовали модельные представления, основанные на простых геометрических образах, предложенных Гриффитсом, Стро, Орованом и др. [242] — [245]. Сейчас, однако, становится ясным,

что физика разрушения нуждается в дальнейшем развитии основополагающих идей. Так, предприняты попытки использования нелинейных методов для развития концепции разорванных связей [246], разрабатываются модели элементарных носителей разрушения [247], на макроскопическом уровне описания внедряются методы теории подобия [248] и синергетический подход [249]. Развитие последних общезначимых концепций теории сильно-неравновесных [13, 88] и нелинейных [250, 251] явлений сделало возможным дальнейшее понимание природы разрушения.

Реализация такой возможности достигается на двух уровнях — микро- и макроскопическом. Во-первых, следует побеспокоиться о последовательном описании элементарных актов разрушения, т. е. развить картину, которая может претендовать на замену наивных представлений о разрыве межатомных связей. Очевидно, что в твердом теле такой процесс должен носить коллективный характер, и поэтому представляется естественным описывать разрушение как неравновесный фазовый переход, сводящийся к "плавлению" кристаллографических плоскостей, по которым происходит разрыв связей. В разделе 4.1 показано, что такая попытка приводит к термодинамическому критерию разрушения гомогенных материалов, однако при этом остается неясной картина "локального плавления".

Ее интерпретация требует привлечения представлений [54], изложенных в главах 2, 3. Они основываются на рассмотрении конденсированного состояния как системы, значительно удаленной от состояния равновесия. Благодаря этому удается единым образом представить упругое и пластическое поведение твердого тела, его течение и разрушение. Оказывается, что элементарные носители указанных явлений представляются автолокализованными решениями полевых уравнений вязкоупругой среды [92] (см. подраздел 3.1.2). Изложению картины вязкого разрушения, основывающейся на этих представлениях, посвящен подраздел 4.2.1.

Рассмотрение ансамбля элементарных носителей позволяет представить макроскопическую картину разрушения. В соответствии с многообразием его проявлений [218, 243] представляются возможными различные сценарии эволюции системы. Они определяются двумя предельными режимами, первый из которых отвечает обычной картине образования и роста новой фазы — элементарные носители флуктуационно объединяются в очаг разрушения, который вырастает за счет постепенного притока дефектов решетки. Такое поведение рассмотрено в подразделе 4.2.2. В другом предельном режиме происходит поэтапное объединение носителей разрушения — сначала элементарные образуют кластеры, те объединяются в суперкластеры и т. д. до образования магистральной трещины. В разделе

ле 4.3 показано, что такой сценарий реализуется в процессе усталостного разрушения. Здесь для описания эволюции ансамбля дефектов удобно использовать концепцию ультраметрического пространства, представленную в разделах 2.3, 2.4.

4.1 Термодинамические критерии разрушения

К настоящему времени сложилось два подхода к определению теоретической прочности кристаллов. В первом, предложенном Борном [252], предел прочности определяется из условия потери механической устойчивости кристалла [253, 254]. Математически это условие выражается в занулении одного из собственных значений матрицы упругих постоянных, сводящихся к собственным значениям динамической матрицы [255]. Борновский критерий дает завышенную оценку теоретической прочности, поскольку разрушение кристалла может произойти задолго до потери механической устойчивости. В этой связи Орован и Маккензи (см. [256]), а также авторы [257] получали теоретическую прочность, превышающую экспериментальную в 2–5 раз.

Наряду с борновским существует другой критерий прочности кристаллов, физически менее обоснованный и ясный. Он основан на предположении о связи процессов разрушения и пластической деформации с плавлением, в связи с чем называется термодинамическим [258]. В рамках этого критерия теоретическая прочность связывается с основной характеристикой плавления — скрытой теплотой перехода. Поскольку последовательная логическая схема получения такого соотношения отсутствует, данный критерий получил различные математические формулировки [258] — [262]. Наиболее удачная из них [260] позволяет устранить существовавшее ранее расхождение (в 2–5 раз) между теоретической и экспериментально наблюдаемой прочностью кристаллов. Успех термодинамического подхода обусловлен тем, что отнесенная к единице объема скрытая теплота плавления оказывается величиной того же порядка, что и предел прочности кристалла, а деформация разрушения соизмерима с величиной теплового расширения от данной температуры до температуры плавления. Хотя справедливость термодинамического критерия разрушения не вызывает сомнений, его обоснование до последнего времени отсутствовало. Восполнению этого пробела посвящен настоящий раздел [249].

Обратимся сначала к борновскому критерию, согласно которому поте-

ря механической устойчивости обусловлена структурным переходом [255]. Однако при этом не конкретизируется тип превращения, более того, оно не обязательно имеет характер структурного. Указанное выше совпадение характерных термодинамических параметров разрушения и плавления позволяет предположить, что основную роль играет неустойчивость решетки относительно плавления.

В условиях негидростатической нагрузки следует, однако, иметь в виду определенную специфику процесса плавления [263]. Она связана с ориентационной зависимостью химического потенциала твердого тела, декартовы-ские компоненты которого имеют вид

$$\mu_{ij} = (u - Ts)\delta_{ij} - \Omega\sigma_{ij}. \quad (4.1)$$

Здесь u , s — удельные значения внутренней энергии и энтропии; T — температура; Ω — атомный объем; σ_{ij} — тензор напряжений. Условия термодинамического и механического равновесия на границе раздела твердого тела и жидкости, задаваемой нормалью \mathbf{n} , имеют вид [263]

$$\mu_{ij}n_in_j = \mu^l, \quad -\sigma_{ij}n_in_j = p, \quad (4.2)$$

где $\mu^l = u^l - Ts^l + p\Omega^l$ — химпотенциал жидкости; p — давление. Рост внешних напряжений приводит к увеличению левых частей соотношений (4.2) — до тех пор, пока они не выполняются на одной из плоскостей $\mathbf{n} = \mathbf{n}_0$. Именно по этой плоскости и происходит разрушение.

Для нахождения предела прочности в явном виде рассмотрим простейший случай упругоизотропной среды, подверженной одноосному растяжению σ . Тогда условия (4.2) впервые выполняются на плоскости, перпендикулярной оси растяжения, где они принимают вид

$$f^s - (1 - 4\nu)\frac{\sigma^2\Omega^s}{2E} - \sigma\Omega^s = f^l - \frac{\sigma^2\Omega^l}{2K} - \sigma\Omega^l. \quad (4.3)$$

Здесь $f^{s,l}$ — удельные свободные энергии твердого тела и жидкости; $\Omega^{s,l}$ — их атомные объемы; K , ν — модуль всестороннего сжатия и коэффициент Пуассона твердого тела (полагаем $K^s = K^l \equiv K$); E — модуль Юнга. Пренебрегая разностью $\Omega^s - \Omega^l$ и принимая

$$f^l - f^s = q(1 - T/T_m), \quad (4.4)$$

где $q = (s^l - s^s)T_m$ — скрытая теплота плавления; T_m — его температура; получаем предел прочности

$$\sigma_c^2 = \frac{E}{1 - \nu} \frac{q}{\Omega} \left(1 - \frac{T}{T_m}\right). \quad (4.5)$$

Выше мы предполагали, что процесс растяжения является изотермическим. В адиабатическом случае следует положить $T = 0$ в (4.5), что дает

$$\sigma_{ad}^2 = \frac{E}{1 - \nu} \frac{q}{\Omega}. \quad (4.6)$$

С учетом оценки $(1 - \nu)^{-1} \approx 1.4$ найденное значение удовлетворительно согласуется с эмпирическим критерием [262]:

$$\sigma_c^2 = 2E \frac{q}{\Omega}. \quad (4.7)$$

Согласно (4.5) и (4.6) всегда $\sigma_c \leq \sigma_{ad}$, причем изотермическое значение σ_c в точке плавления обращается в нуль, тогда как адиабатическое $\sigma_{ad} \propto q^{1/2}$ всегда остается конечным.

Дальнейшее уточнение оценки (4.6) получается при выходе за рамки приближения (4.4) и приводит к соотношению

$$\sigma_{ad}^2 = \frac{E}{1 - \nu} \frac{1}{\Omega} (q + h_T^s - h_T^l), \quad (4.8)$$

где $h_T^h - h_T^l = - \int_T^{T_m} (c_p^l - c_p^s) dT$; $c_p^{l,s}$ — теплоемкости фаз. Оно хорошо согласуется с феноменологическим выражением [260]:

$$\sigma_c^2 = \frac{2}{\pi} \frac{E}{(1 - \nu^2)} \frac{h_T^s}{\Omega}, \quad (4.9)$$

вытекающим из (4.5), (4.6) и (4.8) в предположении $q = H_T^l$.

Таблица 4.1 содержит данные расчета изотермического предела упругости нитевидных кристаллов ряда металлов. Как и в [261], наблюдается хорошее совпадение с экспериментом для железа и кадмия; для других металлов рассчитанные значения в 3–10 раз превышают экспериментальные.

Таблица 4.1 — Экспериментальные и теоретические величины предела упругости нитевидных бездефектных кристаллов

Эксперимент				Теоретический расчет, ГПа				
Металл	Направление	d , мкм	σ , ГПа	Анизотропия	Упруго-изотропное приближение	[261]	[262]	[260]
Ag	$\langle 001 \rangle$	3.8	1.73 [264]	6.411	7.7	7.36	13.351	11.524
Al	$\langle 111 \rangle$	—	—	8.604	5.858	5.292*	12.369	8.937
	$\langle 100 \rangle$	—	—	5.876				
Au	$\langle 111 \rangle$	—	—	6.136	8.587	7.985	13.743	11.838
	$\langle 100 \rangle$	—	—	6.926				
Cu	$\langle 111 \rangle$	—	2.94 [265]	9.546	14.121	15.84	21.588	18.228
	$\langle 100 \rangle$	—	—	11.507				
Ni	$\langle 111 \rangle$	1.25	2.94 [264]	16.043	25.25	19.698*	31.955	29.792
	$\langle 100 \rangle$	—	—	22.680				
α -Fe	$\langle 111 \rangle$	—	—	30.263	17.383	19.820	30.681	33.712
	$\langle 100 \rangle$	—	—	15.617				
Zn	$\langle 111 \rangle$	1.6	13.15 [264]	18.850	4.177	3.728	11.922	—
	$\langle 0001 \rangle$	—	0.358 [266]	—				
Cd	$\langle 1120 \rangle$	0.25	2.84 [267]	—	2.999	2.260	6.680	15.993

* Вычислено по формуле работы [261]

Это объясняется тем, что только нитевидные кристаллы железа и кадмия имеют предельно малые диаметры, при которых реализуется однородное распределение упругой энергии, присущее образцам толщиной до 1 мкм [261]. Приведенные результаты согласуются также с эмпирическим выражением [261]:

$$\sigma_c = \frac{2}{\Omega}(q + h_T^s). \quad (4.10)$$

Такое совпадение представляется на первый взгляд неожиданным, ввиду явного различия оценок (4.5) и (4.10) [однако (4.8) сводится к (4.10), если принять $\sigma_{ad} = E(q + h_T^s - h_T^l)/2(1 - \nu)(q + h_T^s)$]. Для кадмия критерий (4.10) предсказывает теоретическую прочность, которая меньше реально достигнутой, тогда как наш подход дает удовлетворительное согласие. Из таблицы 4.1 также видно, что критерии (4.7) и (4.9) приводят к значениям предела упругости, превышающим наши оценки в 1.5–2 раза. Ограниченность критерия (4.9) сказывается и в том, что для кадмия он дает значение, превышающее экспериментальное в 5 раз.

Равенства (4.5), (4.6), (4.8) применимы также и к упругоанизотропным телам, если растяжение/сжатие происходит вдоль кристаллографических направлений высокой симметрии. Для кубических кристаллов такие направления ориентированы вдоль осей $\langle 100 \rangle$, $\langle 111 \rangle$. Для иллюстрации эффекта упругой анизотропии был проведен микроскопический расчет, позволяющий воспроизвести зависимость (4.5) для натрия при сжатии в обойме по осям $[100]$, $[111]$ и гидростатическом сжатии [249]. Оказалось, что при одноосном сжатии температура плавления сначала растет вместе с величиной σ , а затем спадает; при этом меньшие температуры плавления соответствуют более жесткому направлению $[111]$. В случае гидростатического сжатия обнаруживается рост температуры плавления с давлением, хорошо согласующийся с экспериментальными данными.

4.2 Микроскопическая картина разрушения

Принято различать два механизма разрушения твердого тела — хрупкое и вязкое разрушение [218, 243]. В первом случае основную роль играют разрывы межатомных связей, во втором они опосредованы процессом пластической деформации. Согласно современным представлениям процесс хрупкого разрушения складывается из трех стадий:

- термофлуктуационное зарождение элементарных носителей разрушения;
- их кластеризация в укрупненные трещины (очаги разрушения);
- безактивационный рост очагов до размеров, начиная с которых концентрация напряжений у острия трещины приводит к достижению предела прочности и становится возможным атермическое распространение ее фронта со скоростью звука.

Количественное исследование двух первых стадий проводилось в работах [268, 269]. При этом элементарный носитель разрушения представлялся как дилатон [247, 268] — устойчивая флуктуационная область повышенной дилатации решетки, реализующаяся за счет ангармонизма фононов. Обусловленная им накачка упругой энергии в объем V_d составляет $W_d \sim K V_d$, где K — модуль всестороннего сжатия. Скорость накачки $v_+ = \Delta W_d / \Delta t$ задается приращением энергии $\Delta W_d / W_d = \Delta K / K \equiv G |\Delta \epsilon_d|$, где G —

постоянная Грюнайзена; ε_d — дилатация, и минимальным интервалом времени $\Delta t \sim \omega_d^{-1}$; ω_d — дебаевская частота. Стабилизация дилатона обеспечивается, если получающаяся в результате величина $v_+ \sim G|\Delta\varepsilon_d|W_d\omega_D$ превосходит скорость рассасывания флуктуации $v_- = W_d/\tau_{ph}$ за счет выноса энергии фононами, вылетающими из дилатона и сталкивающимися за его пределами ($\tau_{ph} \equiv \lambda/a\omega_D$ — время свободного пробега; λ — его длина; a — параметр решетки). Отсюда следует, что для образования дилатона флуктуация дилатации $|\Delta\varepsilon_d|$ должна превосходить критическое значение

$$\varepsilon_c \sim G^{-1} \frac{a}{\lambda}. \quad (4.11)$$

Подставляя это значение в дебаевское уравнение состояния твердого тела $K\varepsilon_d = \sigma_d + (G/V_d)\Delta W_d$, где σ_d — дилатационная составляющая внешних напряжений, и сопоставляя его с выражением $Q = Q_0 - \Omega\sigma_d$ для энергии активации зарождения трещины, находим, что при отождествлении величин Q и ΔW_d высота потенциального рельефа Q_0 и активационный объем Ω определяются формулами

$$Q_0 = \frac{c}{\beta}\varepsilon_c \sim G^{-1} \frac{c}{\beta} \frac{a}{\lambda}, \quad \Omega = \frac{V_d}{G} = G^{-1} a^3 \frac{V_d}{a^3}, \quad (4.12)$$

где β , c — коэффициент теплового расширения и теплоемкость, связанные равенством $K\beta = Gc/V$. Отсюда видно, что для образования дилатона наиболее благоприятны системы с большими значениями коэффициента теплового расширения и длины свободного пробега фононов.

Несмотря на очевидные успехи, дилатонная модель [268] не может объяснить все особенности процесса разрушения, в частности совершенно выпадает из рассмотрения различие в поведении хрупких и вязких тел. Это связано с игнорированием скалывающей составляющей деформации ε_s , флуктуации которой приводят к разрыву межатомных связей, тогда как рост дилатации $|\Delta\varepsilon_d|$ уменьшает энергию активации Q зарождения дилатона. Однако нельзя утверждать, что обусловленное его появлением поле $\varepsilon_d(\mathbf{r})$ означает лишь пропорциональное увеличение скалывающей компоненты $\varepsilon_s(\mathbf{r})$. Действительно, в подразделе 3.1.1 мы видели, что перестройка потенциального рельефа $U(\mathbf{r})$ высотой $Q \propto \varepsilon_d$ под давлением $p \propto \varepsilon_d$ приводит к кинетическому переходу в неравновесное состояние, в котором кристалл приобретает возможность течь подобно жидкости [54]. При этом кроме слабовозбужденных атомов, совершающих колебания вблизи узлов решетки, появляются сильновозбужденные, которые безактивационно движутся над флуктуирующим рельефом Пайерлса, обеспечивая дрей-

фовый режим переноса. Подобно тому как колебаниям слабозвужденных атомов отвечают коллективные возбуждения в виде фононов, движению сильновозбужденных можно сопоставить коллективную моду, связанную с дрейфом. Если фононы имеют реактивный закон дисперсии, то указанная мода отвечает центральному пику структурного фактора, который обусловлен релаксационным законом $\omega = i\nu k^2$, где ν — кинематическая вязкость; k — волновое число. В этой связи уместно назвать такие возбуждения *релаксонами*. В рамках квазичастичного представления интенсивность дрейфовых потоков характеризуется распределением плотности бозе-конденсата релаксонов с волновым вектором \mathbf{k}_0 (в микроскопически однородном случае $\mathbf{k}_0 = 0$). В частности, дилатон представляет локализованную область конденсата размером $\sim \lambda$, образование которой инициировано флуктуациями дилатации $|\Delta\varepsilon_d| > \varepsilon_c$.

Таким образом, сам по себе дилатон, представляющий локальную область возбужденного состояния, не может играть роль элементарного носителя разрушения, поскольку сдвиговая составляющая внешних напряжений ослабляется дрейфовыми потоками. Однако если по каким-то причинам плотность бозе-конденсата релаксонов в центре дилатона понижается, то соответствующая область играет роль концентратора сдвиговых напряжений, окруженного пластичной оболочкой возбужденного состояния. Поскольку образование трещины всегда сопровождается пластическим течением материала вблизи ее фронта, то можно ожидать, что именно такая модель отвечает реальному носителю разрушения.

4.2.1 Исследование элементарного носителя разрушения

Основой нашего рассмотрения является то обстоятельство, что кроме сдвиговых компонент деформации ε_s и напряжений σ_s , описание упруго-вязкой среды, подверженной сильному нагружению, требует использования внутреннего параметра, роль которого играет разность S заселенностей уровней сильно- и слабозвужденных состояний. Микроскопическая картина, развитая в подразделе 1.4.1, показывает, что в рамках такого представления квадрат параметра порядка ε_s^2 определяется плотностью бозе-конденсата релаксонов $|b|^2 \equiv \langle b_{\mathbf{k}}^+ b_{\mathbf{k}} \rangle$, задаваемой операторами их рождения и уничтожения; напряжение $\sigma_s \equiv \langle d_{\mathbf{k}} \rangle$, играющее роль сопряженного поля, сводится к аномальному квазисреднему от поляризации системы $d_{\mathbf{k}}$ относительно разделения по указанным уровням; величина управляющего параметра S представляет среднее от разности $n_{\mathbf{k}2} - n_{\mathbf{k}1}$ опера-

торов заполнения этих состояний. Используя гейзенберговские уравнения движения (1.206) — (1.209), легко видеть (см. подраздел 1.4.1), что эволюция средних значений пространственных фурье-образов $b_{\mathbf{k}}$, $d_{\mathbf{k}}$, $S_{\mathbf{k}}$ представляется уравнениями Лоренца (1.212) — (1.214), если учесть внешнюю накачку, задающую разность S_e заселенностей сильно- и слабовозбужденных состояний, а также диссипативные вклады, определенные временами релаксации τ_b , τ_d , τ_S . В предположении о слабой дисперсии для потенциала атом-релаксонного взаимодействия имеем $v_{\mathbf{k}} = v + (\gamma/2)(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0)^2$, $v \equiv v_{\mathbf{k}=\mathbf{k}_0}$, $\gamma/v > 0$. Тогда, удерживая члены не выше второй степени по $\mathbf{k} - \mathbf{k}_0$, после перехода в прямое пространство для стационарного распределения сдвиговой деформации находим

$$D\nabla^2 \varepsilon_s = -A\varepsilon_s + B\varepsilon_s^3; \quad (4.13)$$

$$A = \frac{S_e}{S_c} - 1, \quad S_c^{-1} = \frac{1}{4}\tau_b\tau_d v^2, \quad B = 4\frac{\tau_S}{\tau_b}S_c^{-1}, \quad D = 2\frac{\gamma S_e}{v S_c}, \quad (4.14)$$

где учтено условие стационарности $\dot{b}_{\mathbf{k}} = \dot{d}_{\mathbf{k}} = \dot{S}_{\mathbf{k}} = 0$. При нагрузках, обеспечивающих условие $S_e > S_c$, уравнение (4.13) имеет однородное решение $\varepsilon_{s0}^2 = A/B \propto S_e - S_c$, отвечающее однородному распределению конденсата релаксонов по кристаллу. Его существование обуславливает кинетический переход системы в сверхпластичное состояние, в котором кристалл обладает аномально низкой вязкостью (такое состояние исследовано в разделе 3.1). С другой стороны, выражение (4.13) сводится к известному уравнению Гросса-Питаевского [210], описывающему неоднородное распределение плотности бозонов, испытывающих взаимное отталкивание. В одномерном случае решение этого уравнения сводится к кинку

$$\varepsilon_s = \varepsilon_{s0} \text{th}(x/\xi), \quad \xi^2 = D/A, \quad (4.15)$$

а в двумерном представляет темный солитон, характеризуемый асимптотиками

$$\varepsilon_s^2 = \varepsilon_{s0}^2 \begin{cases} \text{const} \cdot r^2, & r \ll \xi, \\ 1 - (r/\xi)^{-2}, & r \gg \xi, \end{cases} \quad (4.16)$$

где ξ — корреляционная длина.

Таким образом, под действием внешней нагрузки, обеспечивающей разность заселенностей S_e , превосходящую критическое значение S_c , стационарное распределение бозе-конденсата релаксонов обнаруживает солитонобразные провалы, накладывающиеся на однородный фон. Это означает локальное ухудшение пластических свойств, в связи с чем данные области становятся концентраторами сдвиговых напряжений, размер которых определяется величиной ξ , монотонно изменяющейся с давлением p .

В отличие от топологического солитона, который связан с симметрией поля распределения конденсата $\varepsilon_s(\mathbf{r})$ и не может быть ликвидирован слабым возмущением, приводящим к нарушению динамических законов сохранения, решения (4.15), (4.16) представляют динамический солитон, связанный с симметрией пространства и времени, обуславливающей сохранение импульса и энергии. Действительно, найденное разрежение плотности релаксонов реализуется, если обусловленная их взаимодействием скорость $v_- = |\Delta W_s|/\Delta t$ оттока упругой энергии $W_s \sim \mu a^3$ (μ — модуль сдвига; a — параметр решетки) не меньше скорости ее накачки $v_+ = W_s \omega_D$ за счет внешней нагрузки (ω_D — дебаевская частота). Принимая, что для релаксонов величина ΔW_s определяется формулой типа Грюнрайзена для фононов $\Delta\varepsilon_s = s(\Delta W_s/W_s)$ (s — параметр взаимодействия релаксонов, отвечающий постоянной Грюнрайзена G), и задавая интервал Δt частотой $\omega_r = \nu k^2 < \nu(2\pi/a)^2$, находим условие стабилизации темного солитона (ср. с (4.11))

$$\Delta\varepsilon_s > \varepsilon_f, \quad \varepsilon_f \sim \kappa \equiv s \cdot \text{Re}, \quad \text{Re} \equiv \frac{a^2 \omega_D}{2\pi\nu}. \quad (4.17)$$

В отличие от предельной дилатации ε_c граничная деформация сдвига ε_f определяется не только ангармонизмом, но и пластическими свойствами среды. По определению $|\Delta\varepsilon_s| < 1$ и эффективное число Рейнольдса Re удовлетворяет условию $\text{Re} < s^{-1}$, отвечающему ламинарному течению, обусловленному наличием релаксонов. Физически это условие означает, что пластическое течение не размывает элементарный носитель разрушения в материалах с кинематической вязкостью, превышающей критическое значение

$$\nu_c = sa^2 \omega_D. \quad (4.18)$$

Хотя приведенное рассмотрение относится к однородному случаю, в котором накачка упругой энергии W_d приводит к условию $S_e(\mathbf{r}) = \text{const}$, полученные результаты могут быть применены к дилатону, если отвечающий ему профиль $S_e(\mathbf{r})$ определяется размером λ , намного превышающим длину корреляции ξ . В действительности, однако, реализуется случай $\lambda \geq \xi$, и форма темного солитона $\varepsilon_s(\mathbf{r})$ значительно искажается профилем дилатона $S_e(\mathbf{r})$, хотя основные качественные особенности, присущие случаю $\lambda \gg \xi$, остаются неизменными. При этом самосогласованное аксиальное распределение полей дилатационной и сдвиговой компонент $\varepsilon_d(\mathbf{r}) \propto S_e(\mathbf{r})$, $\varepsilon_s(\mathbf{r})$ имеет вид, показанный на рис. 4.1а. Поскольку усиление сдвиговой компоненты подготавливает разрыв межатомных связей, для обозначения элементарного носителя разрушения, представленного на рис. 4.1б, уместно

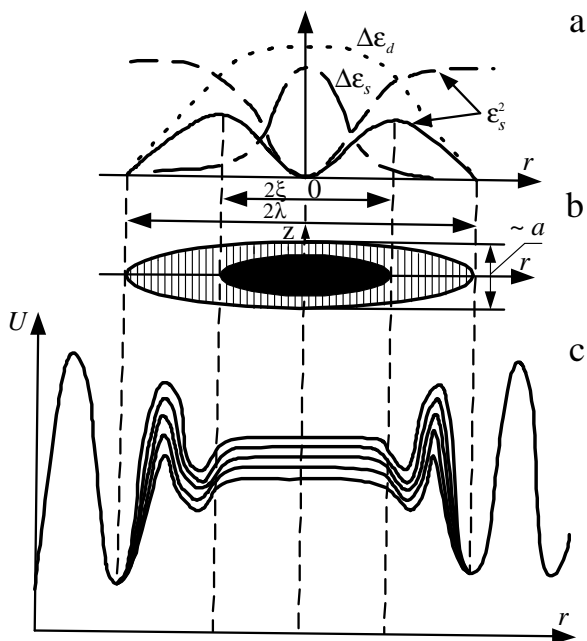


Рисунок 4.1: а — координатные зависимости флуктуаций дилатации $\Delta\epsilon_d$ (пунктир) и сдвиговой деформации $\Delta\epsilon_s$ (штрих–пунктир), а также квадрата сдвиговой деформации ϵ_s^2 в однородной системе (штриховая) и в дилатоне (сплошная); б — модель фрустрона (затушевана область флуктуаций сдвиговых напряжений, заштрихована область пластичного состояния); в — распределение потенциального рельефа в фрустроне

использовать термин фрустрон (от frustration). Соответствующее изменение потенциального рельефа атомов имеет вид, приведенный на рис. 4.1с.

В подразделе 3.1.2 мы видели, что в рамках изложенной полевой схемы вязкоупругая среда представляется по аналогии с теорией Гинзбурга—Ландау для сверхпроводников, поведение которых задается параметром $\kappa \equiv \lambda/\xi$: при $\kappa < 2^{-1/2}$ солитонам выгодно объединиться в кластер, в обратном случае они изолированы друг от друга в смешанном состоянии с идеальным кристаллом [175]. Таким образом, условие (4.17) обеспечивает не только стабилизацию фрустронов, но и возможность их объединения в кластеры. Формально это выражается в положительном значении поверхностной энергии таких кластеров и отрицательной величине соответствующей объемной составляющей. Это позволяет рассматривать эволюцию системы по аналогии с зарождением фазы [11], где роль атомов, лимитирующих ее образование, играют фрустроны, объединяющиеся в очаг разрушения. Такой механизм, описанию которого посвящен следующий подраздел, реализуется в хрупких материалах, где кинематическая вязкость превышает критическое значение (4.18). В обратном случае $\nu < \nu_c$ пластическое течение размывает кластер фрустронов и разрушение не происходит до тех пор, пока скальвающие напряжения не превысят предел прочности, и образуется магистральная трещина. Такой механизм реализуется в вязких материалах, где невозможно не только объединение фрустронов в кластер, но и само их образование.

4.2.2 Кластеризация носителей хрупкого разрушения

В рамках макроскопического подхода скорость изменения свободной энергии \dot{F} , обусловленная образованием кластера из $N \gg 1$ фрустронов, представляется стандартным выражением [12]:

$$\dot{F} = gN + \sigma N^{2/3}, \quad (4.19)$$

где $g = g(p)$ — изменение величины \dot{F} при добавлении одного фрустро-на; $\sigma > 0$ — коэффициент поверхностного натяжения. При малых давлениях, когда $g(p) > 0$, образование кластера невыгодно до тех пор, пока не выполнится условие $g(p) = 0$, отвечающее критическому значению p_c . С ростом давления до значений $p > p_c$ зависимость $\dot{F}(N)$ приобретает немонотонный вид кривой 2 на рис. 4.2. В результате флуктуационный рост кластера, в котором число фрустронов превышает критическое зна-

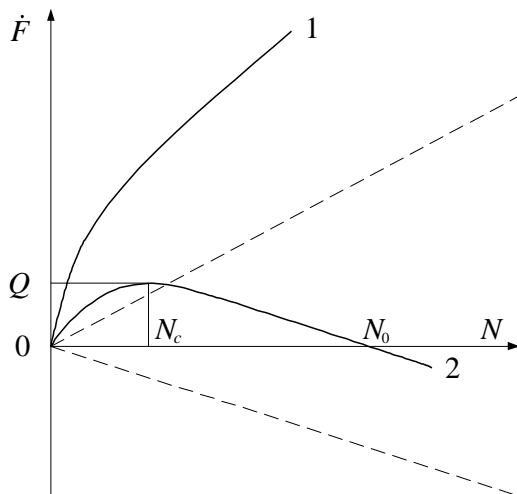


Рисунок 4.2 — Зависимость скорости изменения свободной энергии от числа фрустронов в кластере: 1 — малые нагрузки ($g > 0$); 2 — большие нагрузки ($g < 0$). Штриховые линии получаются в пренебрежении поверхностными слагаемыми

чение $N_c = (2\sigma/3|g|)^3$, приводит к уменьшению скорости диссипации свободной энергии \dot{F} . Упругое поле такого закритического кластера приводит к втягиванию фрустронов пока их число не достигнет предельного значения $N_0 = (\sigma/|g|)^3$, с превышением которого кластер становится генератором энергии ($\dot{F} < 0$). Это означает переход в автокаталитический режим распространения магистральной трещины, т. е. разрушение. Разумеется, простая связь $N_c/N_0 = (2/3)^3$ между числом фрустронов в критическом и предельном очагах разрушения является следствием модели (4.19). Благодаря изменению формы кластера с его ростом, величины g , σ зависят от N , и в действительности указанная связь намного сложнее. Однако на качественном уровне подобные соотношения отражают основные особенности эволюции очага разрушения.

Полное время разрушения τ складывается из инкубационного периода τ_c , необходимого для флуктуационного образования критического кластера, и времени τ_g , требующегося для его роста до предельного числа фрустронов N_0 . Последнее определяется произведением разности $N_0 - N_c$ на время $\tau_1 \sim (T/\sigma_{cl}\varepsilon_c a)(N_0/Dc)$, необходимое на втягивание одного фрустрона в закритический кластер (см. [270])

$$\tau_g \sim (N_0 - N_c)\tau_1 \sim (N_0^2/Dc)(T/\sigma_{cl}\varepsilon_c a). \quad (4.20)$$

Здесь T — температура в энергетических единицах; D — эффективный коэффициент диффузии фрустронов; $c \sim \exp\{\lambda^2 a(p - K\varepsilon_c)/T\}$ — их равновесная концентрация; σ_{cl} — характерное значение поля напряжений, создаваемых кластером. Инкубационный период τ_c определяется произведением времени образования одного фрустрона $\tau_f \sim \omega_D^{-1} \exp\{-\lambda^2 a(p - K\varepsilon_c)/T\}$ на вероятность $\omega_c = N_c^{-1} \exp(-Q\tau_1' N_c/T)$ образования критического кластера, где $Q = gN_c/2$ — отвечающая ему скорость роста свободной энергии; τ_1' — время объединения двух фрустронов, имеющее порядок τ_1 , где под σ_{cl} следует понимать поле σ_1 , создаваемое одним из них. В результате полное время разрушения принимает вид

$$\tau = \tau_0 \exp\left\{-\frac{\lambda^2 a}{T} \left(p - \frac{Ka}{G\lambda}\right)\right\}; \quad (4.21)$$

$$\tau_0 = (\omega_D N_c)^{-1} \exp\left(-\frac{Q\tau_1' N_c}{T}\right) + \frac{N_0^2 T G \lambda}{D a^2 \sigma_{cl}}. \quad (4.22)$$

Здесь равенство (4.21), в котором экспонента представляет вероятность образования фрустрона, записано в виде известной формулы Журкова, в которой влияние внешних условий учитывается только экспоненциальным

множителем [218], [247]. Для выполнения такого условия требуется, чтобы основную роль играл закритический рост кластера, а не его зарождение. Тогда в предэкспоненте (4.22) превалирует второе слагаемое, слабо зависящее от параметров состояния T , σ . В обратном случае, когда основную роль играет зарождение кластера, соотношение $\tau_1 \propto c^{-1} = \exp\{-\lambda^2 a(p - K\varepsilon_c)/T\}$ приводит к двойной экспоненциальной зависимости $\tau_0(T, \sigma)$, намного более сильной, чем экспонента Журкова (4.21). Физически это связано с тем, что кинетическая формула Журкова учитывает только термофлуктуационное образование фрустронов в поле концентратора напряжений, роль которого играет критический кластер.

Проведенное рассмотрение показывает, что процесс хрупкого разрушения определяется образованием и эволюцией ансамбля элементарных носителей разрушения — фрустронов. Последние представляют мезоскопические области локализации сдвиговых деформаций, окруженные сверхпластичной оболочкой. Хрупкий механизм разрушения обеспечивается посредством кластеризации фрустронов в закритический очаг разрушения, что требует вязкости ν , превышающей значение (4.18). В вязких материалах, где реализуется обратное условие, разрушение протекает по дилатонному механизму [247, 268, 271], присущему неоднородным материалам, где наличие концентраторов напряжений приводит к пределу прочности, значение которого гораздо ниже теоретического предела [271]).

4.3 Фрактальная теория усталостного разрушения

Многочисленные экспериментальные данные показывают, что при наложении циклической нагрузки на первой стадии разрушения формируется высокодисперсная бороздчатая структура, распределенная в соответствии с картиной напряженного состояния образца [243]. Если имеется концентратор напряжений (например надрез), то подрастание инициированной им макротрещины осуществляется за счет скачкообразного присоединения отдельных бороздок, которые представляют кластеры носителей разрушения, объединенные в соответствии с распределением поля напряжений. В гомогенных условиях происходит объединение бороздок в более крупные образования — до тех пор пока стадия микросдвига не переходит в микроотрыв, при котором растущая макротрещина мгновенно проскакивает объем металла, и на фоне существующей ячеистой структуры формируется вторичная. Эта стадия реализуется в ограниченном интервале значений коэффици-

циента интенсивности напряжений, с ростом которого происходит переход в стадию макроскопической нестабильности, в результате которой развивается ямочный рельеф излома, связанный с пластической деформацией.

Согласно данным по акустической эмиссии процесс усталостного разрушения имеет скачкообразный характер — с развитием структурных изменений, предшествующих разрушению, образец испускает короткие импульсы различной интенсивности и частоты (см. [243]).

Переходя к трактовке изложенных данных, отметим, что в отличие от предыдущего раздела при усталостном разрушении принципиальную роль играет масштабный фактор, в связи с чем поведение системы определяется не напряжениями σ , а коэффициентом их интенсивности $K \sim \sigma\sqrt{l}$, задаваемым длиной трещины l . В материалах с кинематической вязкостью, превышающей критическое значение (4.18), реализуется хрупкий механизм разрушения, и рост трещины приводит к качественному изменению поведения ансамбля элементарных носителей разрушения. Действительно, при невысоких значениях длины l значение коэффициента интенсивности напряжений $K \propto \sqrt{l}$ настолько малó, что высота активационного барьера $Q \propto K^2 \propto l$, преодолеваемого при объединении фрустронов, достаточна для реализации вероятности $P_N \sim \exp(-QN/T)$ флуктуационного образования кластера, содержащего $N \gg 1$ фрустронов. Мы исследовали такой процесс в подразделе 4.2.2, согласно которому при достижении предельного значения N_0 кластер становится генератором энергии и трещина переходит в автокаталитический режим распространения. Это означает начало хрупкого разрушения.

При увеличении размера трещины l до значений, при которых образование кластера $N \gg 1$ становится практически невозможным, указанный механизм сменяется цепочечным процессом, при котором с вероятностью $P_1 \sim \exp(-Q/T)$ фрустроны объединяются попарно, затем с вероятностью того же порядка пары образуют квартет и т. д. (см. рис. 4.3). Переход к такому процессу обусловлен тем, что при малых l образование кластера, состоящего из N фрустронов, приводит к перемножению единичных вероятностей P_1 ($P_N = P_1^N$), тогда как цепочный процесс характеризуется их суперпозицией, дающей гораздо большее значение $P_N \sim N^{-2} P_1$. В результате кинетика разрушения изменяется критическим образом: если вероятность отсутствия флуктуационного образования кластера за время t характеризуется дебаевской зависимостью $P_1(t) \sim \exp(-t/\tau_0)$, где τ_0 — микроскопическое время, то время его зарождения $t_N \equiv -\tau_0 \ln P_N \sim N\tau_0 \ln P_1^{-1}$ будет соизмеримо с характерным масштабом цепочечного процесса $\sim \tau_0/P_N$, если положить, что кинетика последнего задается зависимостью $P_N(t) \sim \tau_0/t$,

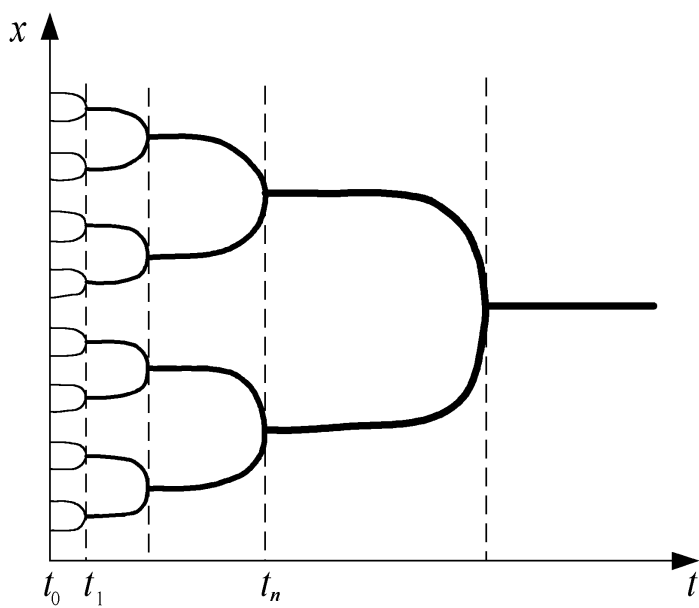


Рисунок 4.3 — Схема цепочечного объединения носителей разрушения

совершенно отличной от дебаевской. Использование фрактальной теории позволяет обобщить этот результат.

Для количественного представления эволюции ансамбля фрустронов введем гипотетическую координату x , значения которой отвечают различным кластерам фрустронов в момент времени t . Как видно из рис. 4.3, в рамках предложенной схемы объединение (удвоение) кластеров происходит в дискретные моменты времени t_n , интервалы $\Delta t_n = t_n - t_{n-1}$ между которыми увеличиваются с ростом n . Будем характеризовать кластеры, реализуемые в промежутке Δt_n , набором координат $\{x_n\}$. Тогда каждый элементарный акт удвоения задается отображением $x_{n+1} = f(x_n)$ координаты x_n в x_{n+1} , причем, как видно из рис. 4.3, обратное отображение $x_n = f^{-1}(x_{n+1})$ является неоднозначным. По аналогии с теорией турбулентности [235] аппроксимируем такое отображение параболой

$$x_{n+1} = 1 - ax_n^2, \quad (4.23)$$

характеризуемой единственным параметром a . Его нижнее критическое значение A_1 , отвечающее образованию самого крупного кластера, определяется условиями $x_n = f(x_n)$, $dx_{n+1}/dx_n = -1$, взятыми в момент образования этого кластера. Используя (4.23), получаем $A_1 = 3/4$.

Для определения следующих значений параметра a проведем отображение (4.23) дважды. Нетрудно видеть [235], что с точностью до квадратичных членов по x_n получающемуся отображению $x_{n+2} = f(x_n)$ можно придать вид (4.23), если провести масштабное преобразование

$$x_n \rightarrow (1 - a)x_n, \quad a \rightarrow \varphi(a) \equiv 2a^2(a - 1). \quad (4.24)$$

Повторяя эту операцию n раз, получим ряд последовательных отображений того же вида:

$$x_{n+2^n} = 1 - a_n x_n^2, \quad a_n = \varphi(a_{n-1}). \quad (4.25)$$

Неподвижные точки этих отображений отвечают объединению 2^n кластеров. Соответствующие стационарные значения A_n определяются решением цепочки уравнений

$$A_1 = \varphi(A_2), \quad A_2 = \varphi(A_3), \quad \dots, \quad A_{n-1} = \varphi(A_n). \quad (4.26)$$

В пределе $n \rightarrow \infty$ отсюда получаем [235]:

$$A_\infty - A_n \propto \delta^n, \quad \delta \simeq 5,73, \quad A_\infty \simeq 1,37. \quad (4.27)$$

Простота и универсальность полученных решений (4.25), (4.27) являются отражением автомодельности поведения системы кластеров, показанной на рис. 4.3 иерархическим деревом Кейли, которое представляет геометрический образ пространства с ультраметрической топологией (см. раздел 2.3). Приведенное рассмотрение простейшего сценария попарного объединения кластеров показывает, что их эволюция представляется не в реальном физическом пространстве, а в ультраметрическом. Разумеется, реальный процесс цепочечной кластеризации может протекать не столь просто, как показано на рис. 4.3. В частности, не исключена возможность объединения произвольного числа кластеров $s \neq 2$ (при этом ветвимость дерева Кейли s не равна 2). Кроме того, точки бифуркации на разных ветвях дерева не обязаны сгруппировываться по вертикалям $t_n = \text{const}$, как это показано на рис. 4.3. И наконец, процесс кластеризации может протекать по нескольким деревьям Кейли, каждое из которых реализуется с определенной вероятностью. Однако, как показано в [108], это не приводит к качественным изменениям в картине, рассмотренной выше на простейшем примере регулярного дерева с $s = 2$.

Согласно определению расстояние u в ультраметрическом пространстве задается наименьшим числом бифуркаций на дереве Кейли, приводящих к слиянию двух точек, между которыми измеряется u (из рис. 4.3 видно, что величина u пропорциональна числу шагов n по ветвям дерева до их срастания). В рамках предложенной картины параметры, представляющие ансамбль фрустронов, становятся функциями расстояния u . Так, элементарный акт слияния кластеров характеризуется дебаевской зависимостью

$$P_u(t) = \exp[-t/\tau(u)] \quad (4.28)$$

с характерным временем

$$\tau(u) = \tau_0 \exp[Q(u)/T], \quad (4.29)$$

где τ_0 — микроскопическое время; $Q(u)$ — высота барьера, разделяющего кластеры, расстояние между которыми составляет u ; T — температура в энергетических единицах. Тогда, принимая, что процесс кластеризации распределен по ансамблю деревьев Кейли в соответствии с законом $p(u)$, $\int p(u) du = 1$, для вероятности отсутствия усталостного разрушения за время t получаем

$$\bar{P}(t) = \int_0^{\infty} p(u) \exp\{-t/\tau(u)\} du. \quad (4.30)$$

Представленная картина разрушения сводится к фрактальной кинетике, развитой в разделе 2.4, где под термодинамическим потенциалом $\Phi(u)$ следует понимать высоту барьера $Q(u)$. В результате подстановка зависимостей (2.56), (2.57) в соотношения (4.29), (4.30) приводит к асимптотикам, указанным в таблице 2.1. При степенном распределении $p_s(u)$, присущем сильно иерархическим системам, логарифмическое нарастание рельефа $Q(u)$ дает степенную зависимость $\overline{P}(t)$, степенной рельеф — медленную логарифмическую зависимость, а экспоненциальное — двойную логарифмическую. Соответственно при быстро спадающем экспоненциальном распределении $p_w(u)$, отвечающем слабо иерархическим системам, имеем последовательно растянутую экспоненту Колерауша, квазистепенное и логарифмическое спадание $\overline{P}(t)$. Характерно, что во всех случаях вероятность отсутствия разрушения $\overline{P}(t) \approx 1$ реализуется в течение времени

$$t_d \sim \tau_0 \exp(Q/T), \quad (4.31)$$

сводящегося к основному результату кинетической теории [247].

Таким образом, иерархическая кластеризация фрустронов, протекающая по цепочечному механизму, приводит к существенному замедлению процесса разрушения. Если поведение обычной системы, исследованной в предыдущем разделе, определяется быстро спадающей экспонентой Дебая, то включение слабой иерархии (экспоненциальное распределение $p_w(u)$) перестраивает ее в растянутую экспоненту Колерауша, квазистепенную и логарифмическую зависимости; при сильной иерархичности, характеризующей степенным распределением $p_s(u)$, наблюдается даже двойное логарифмическое замедление, означающее полное отсутствие разрушения. Следует, однако, иметь в виду, что критическое замедление сказывается только в начальный период $t \ll \tau_M$, а при $t > \tau_M$ имеем $\overline{P}(t) \sim \exp(-t/\tau_M)$, где максимальное время τ_M дается таблицей 2.2 в разделе 2.4. В гомогенных условиях (отсутствие надреза и других повреждений) температурная зависимость максимального времени усталостного разрушения сводится к двум основным типам:

$$\tau_M \propto (T - T_0)^{-a}, \quad \tau_M \propto \exp\{A/(T - T_0)\}; \quad a, A = \text{const} > 0. \quad (4.32)$$

Видно, что иерархическая соподчиненность в ансамбле кластеров практически подавляет процесс разрушения ниже характерной температуры T_0 .

Литература

- [1] A.J. Bray // Adv. Phys. – 1994. – V.43. – P.357.
- [2] Олемской А.И., Коплык И.В. // УФН. – 1995. – Т.165. – С.1105.
- [3] Паташинский А.З., Покровский В.Л. Флуктуационная теория фазовых переходов. – Москва: Наука, 1982.
- [4] Лифшиц И.М. // ЖЭТФ. – 1962. – Т.42. – С.1354.
- [5] Лифшиц И.М., Слезов В.В. // ЖЭТФ. – 1958. – Т.35. – С.479.
- [6] Зельцер А.С., Соболева Т.К., Филиппов А.Э. // ЖЭТФ. – 1995. – Т.108. – С.356.
- [7] Олемской А.И., Хоменко А.В. // ЖЭТФ. – 1996. – Т.110. – С.2144.
- [8] Хакен Г. Синергетика. – Москва: Мир, 1980.
- [9] E. Lorenz // J. Atmosph. Sc. – 1963. – V.20. – P.1675.
- [10] Андронов А.А., Витт А.А., Хайкин С.Э. Теория колебаний. – Москва: Наука, 1981.
- [11] Кацнельсон А.А., Олемской А.И. Микроскопическая теория неоднородных структур. – Москва: Изд-во МГУ, 1987.
- [12] Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика: В 10 т. – Москва: Наука, 1995. – Т.5: Статистическая физика. – Ч.1.
- [13] Хакен Г., Синергетика. Иерархии неустойчивостей в самоорганизующихся системах и устройствах. – Москва: Мир, 1985.

- [14] A.I. Olemskoi, in *Physics Reviews* / Ed. by I. M. Khalatnikov. — London: Gordon & Breach, 1996, V.18, Part 1, 1; Олемской А.И., Флат А.Я. // *УФН*. — 1993. — Т.163, №12. — С.1.
- [15] Хорстхемке В., Лефевр Р. *Индукцированные шумом переходы*. — Москва: Мир, 1987.
- [16] Олемской А.И., Скляр И.А. // *УФН*. — 1992. — Т.162, №6. — С.29.
- [17] Олемской А.И., Торопов Е.А., Скляр И.А. // *ЖЭТФ*. — 1991. — Т.100. — С.987.
- [18] D.J. Amit. *Field Theory, the Renormalization Group, and Critical Phenomena*. — New York: McGraw-Hill, Inc., 1978.
- [19] S.F. Edwards, D.R. Wilkinson // *Proc. Roy. Soc. A*. — 1982. — V.381.— P.17.
- [20] A. Mehta, G.C. Barker // *Rep. Prog. Phys.*— 1994.— V.57. —P.383.
- [21] J.-P. Bouchaud, M.E. Cates, J.R. Prakash, S.F. Edwards // *J. Phys. I (France)*. — 1994. — V.4. — P.1383.
- [22] K.P. Haderl, C. Kuttler // *Granular Matter*. — 1999.— V.2.—P.9.
- [23] P. Bak, K. Sneppen // *Phys.Rev.Lett.* — 1993. — V.71.— P.4083.
- [24] T. Halpin-Healy, Y.-C. Zhang // *Phys.Rep.* —1995.— V.254. — P.215.
- [25] A. Vespignani, S. Zapperi // *Phys.Rev.Lett.* —1997. — V.78. — P.4793; // *Phys. Rev. E.*— 1998. — V.57. — P.6345.
- [26] A. Vespignani, R. Dickman, M.A. Muñoz, S. Zapperi // *Phys. Rev. Lett.* — 1998.— V.81. — P.5676; // *Phys. Rev. E.* — 2000. — V.62.— P.4564.
- [27] D. Dhar, R. Ramaswamy. // *Phys. Rev. Let.* — 1989. — V.63. — P.1659; D. Dhar // *Phys. Rev. Let.* — 1991. — V.64. — P.1613.
- [28] L. Pietronero, A. Vespignani, S. Zapperi // *Phys. Rev. Lett.* — 1994. — V.72. — P.1690; // *Phys. Rev. E.* — 1995. — V.51.— P.1711.
- [29] M. Parzusi, S. Maslov, P. Bak // *Phys. Rev. E.* — 1996. — V.53. — P.414.
- [30] P. Bak, C. Tang, K. Wiesenfeld // *Phys.Rev.Lett.* — 1987.— V.59. — P.381.

- [31] L.P. Kadanoff, S.R. Nagel, L. Wu, S. Zhu // Phys. Rev. A. — 1989. — V.39. — P.6524.
- [32] P. Grassberger, S.S. Manna // J. Phys. (France). — 1990. — V.51. — P.1077.
- [33] T. Hwa, M. Kardar // Phys. Rev. A. — 1992. — V.45. — P.7002.
- [34] L. Gil, D. Sornette // Phys. Rev. Lett. — 1996. — V.76. — P.3991.
- [35] J. Zinn-Justin. Quantum Field Theory and Critical Phenomena. — Oxford: Clarendon Press, 1993.
- [36] S.F. Edwards, R.B.S. Oakeshott // Physica A. — 1989. — V.157. — P.1080.
- [37] S.F. Edwards. Granular Matter: An Interdisciplinary Approach. / Ed. A. Metha. — New-York: Springer-Verlag, 1994.
- [38] C. Tsallis. Lecture Notes in Physics. / Eds. S. Abe, Y. Okamoto — Heidelberg: Springer-Verlag, 2001.
- [39] G.M. Zaslavsky // Chaos. — 1994. — V.4. — P.25; // Physica D. — 1994. — V.76. — P.110; A.I. Saichev, G.M. Zaslavsky // Chaos. — 1997. — V.7. — P.753.
- [40] H. Risken. The Fokker-Planck Equation. — Berlin-Heidelberg: Springer, 1989.
- [41] Олемской А.И. // УФН. — 1998. — Т.168. — С.287.
- [42] A. Chessa, E. Marinari, A. Vespignani, S. Zapperi // Phys. Rev. E. — 1998. — V.57. — P. R6241.
- [43] A.I. Olemskoi, A.V. Khomenko // Phys. Rev. E. — 2001. — V.63. — P.036116.
- [44] A.I. Olemskoi // JETP Let. — 2000. — V.71. — P.285.
- [45] A.I. Olemskoi, D.O. Kharchenko // Physica A. — 2001. — V.293. — P.178.
- [46] J.-P. Bouchaud, A. Georges // Phys. Rep. — 1991. — V.195. — P.127.
- [47] H.C. Fogedby // Phys. Rev. E. — 1998. — V.58. — P.1690.

- [48] D.H. Zanette, P.A. Alemany // Phys. Rev. Lett.— 1995. — V.75. — P.366.
- [49] G. Kaniadakis // e-print cond-mat/0103467.
- [50] Nonequilibrium Statistical Mechanics in One Dimension. / Ed. V. Privman. — Cambridge: Cambridge University Press, 1997.
- [51] J. Marro, R. Dickmann. Nonequilibrium Phase Transitions in Lattice Models. — Cambridge: Cambridge University Press, 1999.
- [52] D. Helbing // e-print cond-mat/0008121.
- [53] A.I. Olemskoi, A.V. Khomenko // e-print cond-mat/0008121.
- [54] A.I. Olemskoi. Theory of Structure Transformations in Non-equilibrium Condensed Matter. — N.-Y.: NOVA Science, 1999.
- [55] A.I. Olemskoi, V.A. Brazhnyi // Physica A. — 1999. — V.273. — P.368.
- [56] Олемской А.И. // УФН. — 2001. — Т.171. — С.503.
- [57] J. Kurchan // J.Phys. I France. — 1992. — V.2. — P.1333.
- [58] Гинзбург С.Л. // ЖЭТФ. — 1983. — Т.85. — С.2171.
- [59] P. Bak, S. Boettcher // Physica D. — 1997. — V.107. — P.143.
- [60] M. Paczuski, S. Maslov, P. Bak // Phys. Rev. E. — 1996. — V.53. — P.414.
- [61] A.I. Olemskoi, A.D. Kiselev // e-print cond-mat/9804104.
- [62] M. Mezard, G. Parisi, M.A. Virasoro. Spin Glass Theory and Beyond. — Singapur: World Scientific, 1987.
- [63] Смирнов А.А. Молекулярно—кинетическая теория металлов. — Москва: Наука, 1966.
- [64] Физическое металловедение / Под ред. Р. Кана. — Москва: Мир, 1968. — Выпуск 3: Фазовые превращения. Металлография.
- [65] Косевич А.М. Основы механики кристаллической решетки. — Москва: Наука, 1972.
- [66] Хачатурян А.Г. Теория фазовых превращений и структура твердых растворов. — Москва: Наука, 1974.

- [67] Иверонова В.И., Кацнельсон А.А. Ближний порядок в твердых растворах. — Москва: Наука, 1977.
- [68] Кристиан Дж. Теория превращений в металлах и сплавах. — Москва: Мир, 1978. — Часть 1.
- [69] A.D. Bruce, R.A. Cowley. Structural phase transitions. — London: Taylor and Francis Ltd., 1981.
- [70] Кривоглаз М.А. Диффузное рассеяние рентгеновских лучей и нейтронов на флуктуационных неоднородностях в неидеальных кристаллах. — Киев: Наукова думка, 1984.
- [71] Бугаев В.Н., Татаренко В.А. Взаимодействие и распределение атомов в сплавах внедрения на основе плотноупакованных металлов. — Киев: Наукова думка, 1989.
- [72] H.E. Stanley. Introduction to phase transitions and critical phenomena. — Oxford: Clarendon Press, 1971.
- [73] Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика: В 10 т. — Москва: Наука, 1978. — Т.10: Статистическая физика. — Часть 2.
- [74] Абрикосов А.А., Горьков Л.П., Дзялошинский И.Е., Методы квантовой теории поля в статистической физике. — Москва: ГИФМЛ, 1962.
- [75] Зубарев Д.Н. Неравновесная статистическая термодинамика. — Москва: Наука, 1971.
- [76] D. Forster. Hydrodynamic fluctuations, broken symmetry, and correlation functions / Reading: Benjamin W.A.— Inc., 1975.
- [77] Барьяхтар В.Г., Криворучко В.Н., Яблонский Д.А. Функции Грина в теории магнетизма. — Киев: Наукова думка, 1984.
- [78] Гетзе В. Фазовые переходы жидкость - стекло. — Москва: Наука, 1991.
- [79] Glassy Metals / Eds. H.-J. Guntherodt, H. Beck. — Berlin, Heidelberg, N.Y.: Springer - Verlag, 1981.
- [80] Metallic glasses / Eds. J.J. Hillman, H.J. Limy. — American Society for Metals, 1978.
- [81] K. Binder, A.P. Young // Rev. Mod. Phys.— 1986. — V.58. — P.801.

- [82] R.G. Palmer // *Adv. Phys.* — 1982. — V.31. — P.669.
- [83] M. Mezard, G. Parisi, N. Sourlas, G. Toulouse, M. Virasoro // *J. Physique.* — 1984. — V.45. — P.843.
- [84] H. Bötger. *Principles of the theory of lattice dynamics.* — Berlin: Academic Verlag, 1983.
- [85] E.H. Lieb // *Int. J. Quant. Chem.* — 1983. — V.34. — P.243.
- [86] Тяпкин Ю.Д., Лясоцкий И.В., Малиенко Е.И. // *ФММ.* — 1974. — Т.34. — С.107.
- [87] Курдюмов Г.В. // *ЖТФ.* — 1948. — Т.18. — С.999.
- [88] I. Prigogine. *Non-equilibrium statistical mechanics.* — N.Y., London: John Wiley and Sons, 1962.
- [89] Паскаль Ю.И. // *Изв. вузов. Физика.* — 1985. — №5. — С.41.
- [90] Jin-ming Zhang // *J. Phys. F.* — 1984. — V.15. — P.769.
- [91] Кащенко М.П., Минц Р.И. // *ЖЭТФ.* — 1978. — Т.75. — С.2280.
- [92] Олемской А.И., Петрунин В.А. // *Изв. вузов. Физика.* — 1987. — №1. — С.82.
- [93] Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. *Теоретическая физика: В 10 т.* — Москва: Наука, 1987. — Т.7: Теория упругости.
- [94] Николис Дж. *Динамика иерархически соподчиненных систем: эволюционное представление.* — Москва: Мир, 1989.
- [95] Доценко В.С. // *УФН.* — 1993. — Т.163, №6. — С.1.
- [96] R. Rammal, G. Toulouse, M. A. Virasoro // *Rev. Mod. Phys.* — 1986. — V.58. — P.765.
- [97] Крылов Н.М., Боголюбов Н.Н. *Введение в нелинейную механику.* — Киев: Изд-во АН УССР, 1937.
- [98] Лифшиц Е.М., Питаевский Л.П. *Физическая кинетика.* — Москва: Наука, 1978.
- [99] E. Feder. *Fractals.* — N.Y.: Plenum, 1989.

- [100] Справочник по специальным функциям / Под ред. Абрамовиц М., Стиган И. – Москва: Наука, 1979.
- [101] Николин В.И. Многослойные структуры и политипизм в металлических сплавах. – Киев: Наукова думка, 1984.
- [102] Кондратьев В.В. // Металлофизика. – 1981. – Т.3, вып.6. – С.13.
- [103] Вуль Д.А., Кривоглаз М.А. // ФММ. – 1981. – Т.51. – С.231; // Металлофизика. – 1982. – Т.4, вып.5. – С.3.
- [104] Устинов А.И., Гаевский А.Ю., Рудь А.Д., Скородзиевский В.С., Чухистов К.В. // ФММ. – 1986. – Т.62. – С.519.
- [105] Олемской А.И. // ФММ. – 1989. – Т.68. – С.56.
- [106] R.G. Palmer, D.L. Stein, E. Abrahams, P.W. Anderson // Phys. Rev. Lett. – 1984. – V.53. – P.958.
- [107] A.I. Olemskoi, A.D. Kiselev // Phys. Lett. A. – 1998. – V.247. – P.221.
- [108] A.T. Ogielski // Phys. Rev. Lett. – 1986. – V.55. – P.1634.
- [109] K. Yvon, M. Francois // Z. Phys. B. – 1989. – V.76. – P.413.
- [110] Зубкус В.Е., Лапинскас С.Р., Торнау Э.Э. // СФХТ. – 1989. – Т.2. – С.82.
- [111] G. Van Tandel, H.W. Zantbergen, S. Amelink // Solid State Comm. – 1987. – V.63. – P.289, 603.
- [112] D.I. Werder, C.H. Chen, R.J. Cava // Phys. Rev. B. – 1988. – V.37. – P.2318.
- [113] A.G. Khachaturyan, J.M. Morris // Phys. Rev. Lett. – 1988. – V.61. – P.215.
- [114] Олемской А.И., Торопов Е.А. // ФММ. – 1991. – №7. – С.32.
- [115] M.E. Mc Henry, M.P. Maley // Phys. Rev. B. – 1989. – V.39. – P.4784.
- [116] Мейлихов Е.З. // СФХТ. – 1989. – Т.2, №9. – С.5.
- [117] Гинзбург С.Л. // ЖЭТФ. – 1986. – Т.90. – С.754.

- [118] Мошалков В.В., Жуков А.А., Леонюк Л.И. и др. // СФХТ. — 1989. — Т.2, №12. — С.84.
- [119] M. Foldeaki, M.E. Mc Henry, R.C. O’Handley // Phys. Rev. B. — 1990. — V.39. — P.11475.
- [120] Гиппиус А.А., Мошалков В.В., Хо Хью Нян и др. // Письма в ЖЭТФ. — 1989. — Т.49. — С.392.
- [121] Гусаковская И.Г., Пирумова С.Н., Атовмян Л.О. // СФХТ. — 1989. — Т.2, №7. — С.61.
- [122] Hydrogen in Metals / Ed. G. Alefeld, J. Volkl. In: Topics in Applied Physics, V.28. — Berlin, Heidelberg, N.Y.: Springer-Verlag, 1978.
- [123] Левинский Ю.В. Диаграммы состояния. — Москва: Metallurgia, 1975.
- [124] Ревкевич Г.П., Олемской А.И., Князева М.А., Кацнельсон А.А. // Металлофизика. — 1991. — Т.13, №9. — С.45.
- [125] H.C. Jamieson, G.C. Weatherly, F.D. Manchester // J. Less-Common Metals. — 1976. — V.50. — P.85.
- [126] Ревкевич Г.П., Кацнельсон А.А., Христов В.М. // Металлофизика. — 1989. — Т.11, №3. — С.57.
- [127] Ревкевич Г.П., Олемской А.И., Кацнельсон А.А., Христов В.М. // Металлофизика. — 1990. — Т.12, №3. — С.71.
- [128] Иверонова В.И., Ревкевич Г.П. Теория рассеяния рентгеновских лучей. — Москва: Изд-во МГУ, 1968.
- [129] Physical Metallurgy. / Ed. R.W. Cahn. — Amsterdam: North Holland and Publishing Company, 1965.
- [130] Ревкевич Г.П., Свешников С.В., Кацнельсон А.А., Христов В.М. // Изв. вузов. Физика. — 1988. — Т.76. — P.117.
- [131] S.D. Axelrod, A.C. Makrides // J. Phys. Chem. — 1969.— V.43. — P.50.
- [132] D.K. Hsu, R.G. Leisure // Phys. Rev. B. — 1979. — V.20. — P.1339.
- [133] Уманский Я.С., Скаков Ю.А. Физика металлов. — Москва: Атомиздат, 1978.

- [134] Ревкевич Г.П., Свешников С.В., Кацнельсон А.А. // Изв. вузов. Физика. — 1988. — Т.75. — С.102.
- [135] Ревкевич Г.П., Кацнельсон А.А., Христов В.М. // Вестник МГУ. Физика — Астрономия. — 1988. — Т.29, №73. — С.72.
- [136] Олемской А.И. // ФТТ. — 1988. — Т.30. — С.3384.
- [137] Ревкевич Г.П., Князева М.А., Олемской А.И., Кацнельсон А.А. // ФММ. — 1992. — №9. — С.43.
- [138] Курдюмов Г.В. // ДАН. — 1948. — Т.6. — С.1543.
- [139] Олемской А.И., Паскаль Ю.И. Проявление неравновесности и неэргодичности при мартенситном превращении. — Томск: 1988. (Препринт №30 Томского филиала / СОАН).
- [140] Курдюмов Г.В., Хандрос Л.Г. // ЖТФ. — 1948. — Т.19. — С.761.
- [141] Курдюмов Г.В., Хандрос Л.Г. // ДАН СССР. — 1949. — Т.66. — С.211.
- [142] Хандрос Л.Г., Арбузова И.А. Металлы, электроны, решетка. — Киев: Наукова думка, 1975. — 109с.
- [143] P.Z. Terraqlio, K. Mukherjee // Acta Met. — 1974. — V.22. — P.835.
- [144] T. Tadaki, M. Tokoro, K. Shimizu // Trans. JIM. — 1975. — V.6. — P.285.
- [145] J.D. Sandrock, R.F. Hehemann // Metallography. — 1971. — V.4. — P.451.
- [146] Лихачев В.А. // Изв. вузов. Физика. — 1985. — №5. — С.21.
- [147] H.S. Tong, C.M. Wayman // Acta Met. — 1974. — V.22. — P.887.
- [148] Ерофеев В.Я., Монасевич Л.А., Павская В.А., Паскаль Ю.И. // Металлофизика. — 1982. — Т.4, №1. — С.52.
- [149] Монасевич Л.А., Ерофеев В.Я., Паскаль Ю.И. — Томск, 1982. — Деп. в ВИНТИИ, Рег.№ 3143-82.
- [150] A. Cornelis, C.M. Wayman // Scripta Met. — 1976. — V.10. — P.359.
- [151] Паскаль Ю.И., Монасевич Л.А. // ФММ. — 1981. — Т.52. — С.1011.

- [152] Паскаль Ю.И., Монасевич Л.А. — Томск, 1980. — Деп. в ВИНТИ, Рег.№ 1667-80.
- [153] Корнилов И.И., Качур О.К., Белоусов Е.В. Никелид титана и другие сплавы с эффектом памяти. — Москва: Наука, 1977.
- [154] H. Warlimont, L. Delaey. Martensitic transformations in copper—silver and gold based alloys. — Oxford, N.Y., Toronto, Sydney: Pergamon Press, 1974.
- [155] Ерофеев В.Я., Паскаль Ю.И. // ДАН. — Т.286.— С.879.
- [156] Паскаль Ю.И., Ерофеев В.Я., Монасевич Л.А. // Металлофизика. — 1984. — Т.6, №6. — С.36.
- [157] Паскаль Ю.И., Монасевич Л.А. Физика деформированного упрочнения сплавов и сталей. — Томск: Изд-во ТГУ, 1980.— 154с.
- [158] Ерофеев В.Я., Монасевич Л.А., Павская В.А., Паскаль Ю.И. // ФММ. — 1982. — Т.53. — С.963.
- [159] Иевлев Ю.И., Мелехин В.П., Минц Р.И., Сегаль В.М. // ФТТ.— 1973. — Т.15. — С.2647.
- [160] J. Baram, V. Gafen, M. Rosen // Scripta Met. — 1981. — V.15. — P.835.
- [161] J. Baram, M. Rosen // Acta Met. — 1982. — V.30. — P.655.
- [162] Плотников В.А., Монасевич Л.А., Паскаль Ю.И. // ФТТ. — 1985. — Т.273. — С.3174.
- [163] Плотников В.А., Монасевич Л.А., Паскаль Ю.И. // ФММ. — 1987. — Т.63. — С.757.
- [164] Плотников В.А., Монасевич Л.А., Понтер В.Э., Паскаль Ю.И. // ДАН. — 1986. — Т.290. — С.110.
- [165] Плотников В.А., Монасевич Л.А., Паскаль Ю.И. // ФММ. — 1986. — Т.61. — С.769.
- [166] С. де Гроот, Мазур П. Неравновесная термодинамика. — Москва: Мир, 1964.
- [167] Кауфман Л., Коэн М. Термодинамика и кинетика мартенситных превращений // Успехи физики металлов. — 1961. — Вып.4. — С.192.

- [168] F. Falk // J. Physique. — 1982. — V.43, Supplement on №12. — P.4-3.
- [169] A.R. Entwisle // Met. Trans. — 1971. — V.2. — P.2395.
- [170] Заславский Г.М. Стохастичность динамических систем. — Москва: Наука, 1984.
- [171] Келли А., Гровз В. // Кристаллография и дефекты в кристаллах. — Москва: Мир, 1970. — С.125.
- [172] Паскаль Ю.И., Ерофеев В.Л., Монасевич Л.А. // Металлофизика. — 1984. — Т.6, вып.6. — С.36.
- [173] Кондратьев В.В. // ФММ. — 1976. — Т.41. — С.1169.
- [174] Хачин В.Н. // Изв. вузов. Физика. — 1985. — №5. — С.88.
- [175] Паскаль Ю.И., Ерофеев В.Л., Монасевич Л.А., Павская В.А. // Изв. вузов. Физика. — 1982. — №6. — С.103.
- [176] С.М. Wayman. Introduction to the crystallography of martensitic transformations. — N.Y., London : Mc Millan, 1967.
- [177] Паскаль Ю.И. // Изв. вузов. Физика. — 1983. — №1. — С.82.
- [178] Скрипов В.П., Коверда В.П. Спонтанная кристаллизация переохлажденных жидкостей. — Москва: Наука, 1984.
- [179] Александров Л.Н. Кинетика кристаллизации и перекристаллизации полупроводниковых пленок. — Новосибирск: Наука, 1985.
- [180] Коверда В.П., Скрипов В.П. // Расплавы. — 1987. — Т.1, №4. — С.3.
- [181] Богданов Н.М., Коверда В.П., Скоков В.Н., Скрипов В.П., Дик А.А. // Кристаллография. — 1988. — Т.33, №5. — С.1251.
- [182] D.A. Kurtze // Phys. Rev. B. — 1986. — V.34. — P.1770.
- [183] Шкловский В.А., Кузьменко В.М. // УФН. — 1989. — Т.157, №2. — С.311.
- [184] Коверда В.П. // ЖТФ. — 1994. — Т.64, №3. — С.62.
- [185] P. Bak. How Nature Works: the Science of Self-Organized Criticality. — Oxford: Oxford University Press, 1997.

- [186] Михайлова Ю.В., Максимов Л.А. // ЖЭТФ. — 1970. — Т.59. — С.1368.
- [187] Хоникомб Р. Пластическая деформация металлов. — Москва: Мир, 1972.
- [188] Пуарье Ж.П. Высокотемпературная пластичность кристаллических тел. — Москва: Металлургия, 1982.
- [189] Ван Бюрен. Дефекты в кристаллах. — Москва: ИЛ, 1962.
- [190] Дамаск А., Динс Дж. Точечные дефекты в металлах. — Москва: Мир, 1966.
- [191] Фридель Ж. Дислокации. — Москва: Мир, 1967.
- [192] Физическое металловедение / Под ред. Р. Кана. — Москва: Мир, 1968. — Выпуск 3: Дефекты кристаллического строения. Механические свойства металлов и сплавов. Металлография.
- [193] Вишняков Я.Д. Дефекты упаковки в кристаллической структуре. — Москва: Металлургия, 1970.
- [194] Хирт Дж., Лоте И. Теория дислокаций. — Москва: Атомиздат, 1972.
- [195] Смирнов Б.И. Дислокационная структура и упрочнение кристаллов. — Ленинград: Наука, 1981.
- [196] Владимиров В.И., Романов А.Е. Дисклинации в кристаллах. — Ленинград: Наука, 1986.
- [197] Р. Де Вит. Континуальная теория дисклинаций. — Москва: Мир, 1977.
- [198] Орлов А.Н., Перевезенцев В.Н., Рыбин В.В. Границы зерен в металлах. — Москва: Металлургия, 1980.
- [199] A. Kadic, D.G.V. Edelen. A Gauge Theory of Dislocations and Disclinations / Lecture Notes in Physics, vol. 174. — Berlin, Heidelberg, N.Y. : Springer Verlag, 1983.
- [200] Рыбин В.В. Большие пластические деформации и разрушение металлов. — Москва: Металлургия, 1985.
- [201] Панин В.Е., Лихачев В.А., Гриняев Ю.В. Структурные уровни деформации твердых тел. — Новосибирск: Наука, 1985.

- [202] Точечные дефекты в твердых телах. Новости ФТТ, вып.9. — Москва: Мир, 1979.
- [203] Барьяхтар В.Г., Олемской А.И. // ФТТ. — 1991. — Т.33. — С.2705.
- [204] V. Heine, M.L. Cohen, D. Weaire. Solid State Physics. vol. 24. — N. Y., London: Academic Press, 1970.
- [205] Monte Carlo Method in Statistical Physics / Ed. K. Binder. — Berlin, Heidelberg, N.Y.: Springer - Verlag, 1979.
- [206] Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теория поля. — Москва: Наука, 1988.
- [207] Боголюбов Н.Н., Ширков Д.В. Введение в теорию квантовых полей. — Москва: Наука, 1976.
- [208] Ахиезер А.И., Пелетминский С.В. Поля и фундаментальные взаимодействия. — Киев: Наукова думка, 1986.
- [209] D.R. Tilley, J. Tilley. Superfluidity and Superconductivity. — N.Y. etc. : Van Nostrand Reinhold Company, 1974.
- [210] Косевич А.М., Иванов Б.А., Ковалев А.С. Нелинейные волны намагниченности. Динамические и топологические солитоны. — Киев: Наукова думка, 1983.
- [211] Зельдович Я.В., Райзер Ю.П. Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений. — Москва: Наука, 1966.
- [212] Коротаев А.Д., Тюменцев А.Н., Гончиков В.Ч., Олемской А.И. // Изв. вузов. Физика. — 1991. — Т.34, №3. — С.81.
- [213] Тюменцев А.Н., Коротаев А.Д., Гончиков В.Ч. и др. Экспериментальное исследование и теоретическое описание дисклинаций. — Ленинград: Наука, 1984.
- [214] Гончиков В.Ч., Вергазов А.Н., Коротаев А.Д., Тюменцев А.Н. // ФММ. — 1987. — Т.64. — С.170.
- [215] Гончиков В.Ч., Тюменцев А.Н., Коротаев А.Д. и др. // ФММ. — 1987. — Т.63. — С.598.
- [216] Гончиков В.Ч., Коротаев А.Д., Тюменцев А.Н. Высокочистые и монокристаллические металлические материалы. — Москва: Наука, 1987. — С.161.

- [217] Тюменцев А.Н., Гончиков В.Ч., Коротаев А.Д. и др. // ФММ. — 1989. — Т.67. — С.591.
- [218] Владимиров В.И. Физическая природа разрушения металлов. — Москва: Металлургия, 1985.
- [219] Гончиков В.Ч., Пинжин Ю.П., Тюменцев А.Н. и др. // ФММ. — 1986. — Т.62. — С.384.
- [220] Трефилов В.И., Моисеев В.Ф., Печковский Э.П. и др. Деформационное упрочнение и разрушение поликристаллических металлов. — Киев: Наукова думка, 1987.
- [221] Кобытев В.С., Попов Л.Е. Структура и пластическое поведение сплавов. — Томск, 1983.
- [222] Бонч-Бруевич В.Л., Звягин И.П., Миронов А.Г. Доменная электрическая неустойчивость в полупроводниках. — Москва: Наука, 1972.
- [223] R. Gilmore. Catastrophe Theory for Scientists and Engineers. — N.Y., Chichester, Brisbane, Toronto: John Wiley and Sons, 1981.
- [224] Главацкая Н.И. Структурные превращения при прокатке и последующих отжигах монокристаллов никеля: Дис. ... канд. физ.-мат. наук. — Киев: ИМФ, 1988.
- [225] Барабаш Р.И., Кривоглаз М.А., Рябошапка К.П. // ФММ. — 1976. — Т.41. — С.33.
- [226] Олемской А.И., Главацкая Н.И. Проблемы нелинейной механики деформируемого твердого тела. — Свердловск: Изд-во АН СССР, 1990. — С.124.
- [227] Вольтерра В. Математическая теория борьбы за существование. — Москва: Наука, 1975.
- [228] Барахтин Б.К., Владимиров В.И., Иванов С.А., Овидько И.А., Романов А.Е. // ФММ. — 1987. — Т.63. — С.1185.
- [229] Горелик С.С. Рекристаллизация металлов и сплавов. — Москва: Металлургия, 1978.
- [230] Панин В.Е., Зуев Л.Б., Данилов В.И., Мних Н.М. // ФММ. — 1988. — Т.66. — С.1005.

- [231] Фролов К.В., Панин В.Е., Зуев Л.Б., Махутов Н.А., Данилов В.И., Мних Н.М. // Изв. вузов. Физика. – 1990. – №2. – С.17.
- [232] Мак Лин Д. Механические свойства металлов. – Москва: Металлургия, 1965.
- [233] Кольский Г. Волны напряжений в твердых телах. – Москва: ИЛ, 1955.
- [234] Олемской А.И., Хоменко А.В. // Изв. вузов. Физика. – 1996. – №6. – С.3.
- [235] Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Гидродинамика. – Москва: Наука, 1988.
- [236] S. Kirkpatrick, D. Sherrington // Phys. Rev. B. – 1978. – V.17. – P.4384.
- [237] J.R.L. De Almeida, D.J. Thouless // J. Phys. A. – 1978. – V.11. – P.983.
- [238] D.J. Thouless, P.W. Anderson, R.G. Palmer // Phil. Mag. – 1977. – V.35. – P.593.
- [239] Vik. S. Dotsenko // J. Phys. C. – 1985. – V.18. – P.6023.
- [240] B.B. Mandelbrot. The Fractal Geometry of Nature. – San Francisco: Freeman, 1982.
- [241] G. Venkataraman. Fluctuations and Mechanical Relaxations // Proc. of Int. Sch. Phys. Enrico Fermi. Course 82: Mechanical and Technical Behaviour of Metallic Materials. – 1982. – P.278.
- [242] Разрушение. Т.1–7 / Под ред. Г. Либовиц. – Москва: Мир, 1973–1976.
- [243] Иванова В.С. Разрушение металлов. – Москва: Металлургия, 1979.
- [244] Мешков Ю.Я., Ахаренко Г.А. Структура металлов и хрупкость стальных изделий. – Киев: Наукова думка, 1985.
- [245] Федоров В.В. Кинетика повреждаемости и разрушения твердых тел. – Ташкент: ФАН, 1985.
- [246] Мелькер А.И., Иванов В.А. // ФТТ. – 1986. – Т.28. – С.3396.
- [247] Журков С.Н. // ФТТ. – 1983. – Т.25. – С.3119.

- [248] Баренблат Г.И., Ботвина Л.Р. // ФХММ. — 1986. — №1. — С.57.
- [249] Олемской А.И., Наумов И.И. Синергетика и усталостное разрушение металлов. — Москва: Наука, 1989. — С.200.
- [250] Стратонович Р.Л. Нелинейная неравновесная термодинамика. — Москва: Наука, 1985.
- [251] Солитоны / Под ред. Р. Буллофа, Ф. Кодри. — Москва: Мир, 1983.
- [252] Борн М., Хуан Кунь. Динамическая теория кристаллической решетки. — Москва: ИЛ, 1958.
- [253] Конусов В.Ф., Михайлов А.М. // Изв. вузов, Физика. — 1975. — №2. — С.38.
- [254] K. Nishioka, J.K. Lee // Phil. Mag. A. — 1981. — V.44. — P.779.
- [255] H. Botger. Principles of the theory of lattice dynamics. — Berlin: Academie Verlag, 1983.
- [256] Келли А. Высокопрочные материалы. — Москва: Мир, 1976.
- [257] Изотов А.Д., Лазарев В.В. // Неорган. материалы. — 1985. — Т.21. — С.706.
- [258] E. Saibel // Phys. Rev. — 1946. — V.69. — P.667.
- [259] R. Furth // Nature. — 1940. — V.145. — P.741.
- [260] Иванова В.С., Терентьев В.Ф. Природа усталости металлов. — Москва: Metallurgia, 1975.
- [261] Канчеев О.Д. // Изв. АН СССР, Металлы. — 1985. — №3. — С.144.
- [262] Лашко Н.Ф. // ЖФХ. — 1948. — Т.18. — С.986.
- [263] Остапенко Г.Т. Термодинамика негидростатических систем и ее применение в теории метаморфизма. — Киев: Наукова думка, 1977.
- [264] S.S. Brenner // J. Appl. Phys. — 1956. — V.27. — P.1484.
- [265] N. Gane // Proc. Roy. Soc. — 1970. — V.41. — P.717.
- [266] R.W. Colmn, G.W. Sears // Acta Met. — 1957. — V.5. — P.131.

- [267] J.C. Cramp, J.W. Mitchell // J. Appl. Phys. — 1970. — V.41. — P.717.
- [268] Петров В.А. // ФТТ. — 1983. — Т.25. — С.3124.
- [269] Петров В.А. // ФТТ. — 1983. — Т.25. — С.3110.
- [270] Гегузин Я.Е. Диффузионная зона. — Москва: Наука, 1979.
- [271] Кайбышев О.А. Сверхпластичность промышленных сплавов. — Москва: Металлургия, 1984.
- [272] Бережкова Г.В. Нитевидные кристаллы. — Москва: Наука, 1969.
- [273] S.G. Samko, A.A. Kilbas, O.I. Marichev. Fractional integrals and derivatives — theory and applications. — Gordon and Breach: New-York, 1993.
- [274] Applications of Fractional Calculus in Physics / Ed. R. Hilfer. — Singapore: World Scientific, 2000.

Приложение А (справочное)

Будем исходить из равенства

$$\int_a^x dx_1 \int_a^{x_1} dx_2 f(x_2) = \int_a^x (x - x') f(x') dx', \quad (\text{A.1})$$

дифференцирование которого по x приводит к тождеству. Методом математической индукции можно показать, что n -кратный интеграл с переменной верхней границей сводится к однократному согласно формуле

$$\int_a^x dx_1 \int_a^{x_1} dx_2 \cdots \int_a^{x_{n-2}} dx_{n-1} \int_a^{x_{n-1}} dx_n f(x_n) = \frac{1}{(n-1)!} \int_a^x (x - x')^{n-1} f(x') dx', \quad (\text{A.2})$$

где $f(x)$ — произвольная функция. При переходе от целого числа n к произвольному ϖ факториал $(n-1)!$ сводится к гамма-функции $\Gamma(n)$ и формула (A.2) дает определение интеграла дробного порядка [273], [274]

$$\mathcal{I}_x^\varpi f(x) \equiv \frac{1}{\Gamma(\varpi)} \int_0^x \frac{f(x')}{(x - x')^{1-\varpi}} dx', \quad \varpi > 0. \quad (\text{A.3})$$

Дробная производная определяется как операция, обратная соответствующему интегралу: $\mathcal{D}_x^\varpi \equiv \mathcal{I}_x^{-\varpi}$. В результате имеем

$$\mathcal{D}_x^\varpi f(x) \equiv \frac{1}{\Gamma(-\varpi)} \int_0^x \frac{f(x')}{(x - x')^{1+\varpi}} dx'. \quad (\text{A.4})$$

В области $0 < \varpi < 1$ удобно использовать выражение

$$\mathcal{D}_x^\varpi f(x) \equiv \frac{\varpi}{\Gamma(1-\varpi)} \int_0^x \frac{f(x) - f(x')}{(x-x')^{1+\varpi}} dx', \quad (\text{A.5})$$

где учитывается известное равенство $x\Gamma(x) = \Gamma(x+1)$ для $x \equiv -\varpi$.

Введем теперь q -производную Джексона, которая является основой анализа самоподобных систем, поскольку в сравнении с обычным случаем она определяет вариацию функции $f(x)$ относительно дилатации аргумента $q \neq 1$, а не сдвига $dx \rightarrow 0$. По определению производная Джексона имеет вид

$$\mathcal{D}_q f(x) \equiv \frac{f(qx) - f(x)}{q-1}, \quad q > 0. \quad (\text{A.6})$$

В случае однородной функции, удовлетворяющей условию

$$f(qx) \equiv q^\alpha f(x), \quad (\text{A.7})$$

где $q > 0$ — параметр дилатации; $\alpha > 0$ — показатель; эта производная сводится к q -числу Джексона:

$$\mathcal{D}_q f(x) = [\alpha]_q f(x), \quad [\alpha]_q \equiv \frac{q^\alpha - 1}{q-1}. \quad (\text{A.8})$$

Нетрудно видеть, что $[\alpha]_q \rightarrow \alpha$ при $q \rightarrow 1$, и $[\alpha]_q \sim q^{\alpha-1}$ при $q \rightarrow \infty$. С другой стороны, q -логарифм Цаллиса

$$\ln_q x \equiv \frac{x^{q-1} - 1}{q-1} \quad (\text{A.9})$$

может быть представлен в виде q -числа Джексона (A.8) с индексом $\alpha = (q-1)(\ln x / \ln q)$. С учетом (A.8) это соотношение и очевидное равенство

$$\ln_q(xy) = \ln_q x + \ln_q y + (q-1)(\ln_q x)(\ln_q y) \quad (\text{A.10})$$

приводят к важному правилу дифференцирования по Джексону:

$$\mathcal{D}_q [f(x)g(x)] = [\mathcal{D}_q f(x)]g(x) + f(x) [\mathcal{D}_q g(x)] + (q-1) [\mathcal{D}_q f(x)] [\mathcal{D}_q g(x)]. \quad (\text{A.11})$$

Обобщая определения (A.5), (A.6), введем дробную ϖ -производную Джексона:

$$\mathcal{D}^\varpi f(x) \equiv \frac{\varpi x^{-\varpi}}{\Gamma(1-\varpi)} \int_0^1 \frac{f(x) - f(qx)}{(1-q)^{1+\varpi}} dq, \quad 0 < \varpi < 1. \quad (\text{A.12})$$

Для однородной функции $f(x)$, удовлетворяющей условию (А.7), определение (А.12) принимает простой вид

$$\mathcal{D}^\varpi f(x) \equiv \{\alpha\}_\varpi x^{-\varpi} f(x), \quad 0 < \varpi < 1, \quad (\text{А.13})$$

где дробное ϖ -число определяется равенством

$$\{\alpha\}_\varpi \equiv \frac{\varpi}{\Gamma(1-\varpi)} \int_0^1 \frac{1-q^\alpha}{(1-q)^{1+\varpi}} dq, \quad 0 < \alpha, \quad 0 < \varpi < 1. \quad (\text{А.14})$$

Оно выражается через Γ -функцию следующим образом:

$$\{\alpha\}_\varpi = \frac{\Gamma(\alpha+1)}{\Gamma(\alpha+1-\varpi)} - \frac{1}{\Gamma(1-\varpi)}. \quad (\text{А.15})$$

Согласно (А.15) $\{\alpha\}_\varpi$ монотонно увеличивается с ростом параметров α , ϖ , принимая нулевое значение в точке $\varpi = 0$, $\alpha = 0$ и характерные значения $\{\frac{1}{2}\}_{\frac{1}{2}} = \frac{\sqrt{\pi}}{2} - \frac{1}{\sqrt{\pi}} \simeq 0.322$, $\{1\}_1 = 1$ в других точках. В частности, имеем

$$\{\alpha\}_\varpi = \begin{cases} \alpha & \text{при } \varpi = 1, \\ \Gamma(1+\alpha) - \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} & \text{при } \varpi = \alpha, \\ \frac{\varpi}{\Gamma(2-\varpi)} & \text{при } \alpha = 1. \end{cases} \quad (\text{А.16})$$

Таким образом, если целое q -число Джексона (А.8) стремится к показателю α в пределе $q \rightarrow 1$, то ϖ -число (А.14), отвечающее дробному интегралу (А.12), сводится к α при $\varpi = 1$.

Приложение В

(справочное)

Для придания полевым уравнениям (1.220) — (1.223) вида синергетической системы (1.212) — (1.214) умножим (1.222) на $\bar{\psi}$ слева, а (1.223) на ψ справа и сложим результаты. Тогда для величин

$$S = \bar{\psi}\psi, \quad \mathbf{j} = (\nabla\bar{\psi})\psi - \bar{\psi}\nabla\psi \quad (\text{B.1})$$

получаем уравнение непрерывности $\dot{S} + \nabla\mathbf{j} = 0$, которое, очевидно, выражает закон сохранения энтропии для консервативных систем; комбинации (B.1) грассмановых полей определяют энтропию S и ее поток \mathbf{j} . Характерно, что уравнения (1.222), (1.223) для грассманово сопряженных полей $\psi, \bar{\psi}$ отличаются только знаком перед производной по времени, так что зависимости $\psi(t), \bar{\psi}(t)$ совпадают при его обращении. Именно это обстоятельство обеспечивает условие сохранения энтропии, хотя для каждого из полей $\psi, \bar{\psi}$ это условие не выполняется: согласно (1.222) в однородном случае величина $\psi(t)$ экспоненциально спадает с декрементом $t^{-1} \int_0^t V_0''(\eta(t')) dt'$, а сопряженное поле $\bar{\psi}(t)$ нарастает с таким же инкрементом. Для энтропии $S \equiv \bar{\psi}\psi$ указанные процессы компенсируются и величина S сохраняется. В результате полученное уравнение непрерывности не содержит обратной связи с параметром порядка η .

Для ее включения следует учесть рассогласование правых частей (1.222), (1.223), которое отражает макроскопическую необратимость времени. С этой целью введем в правую часть (1.222) коэффициент $1 + \varepsilon$, определяемый параметром рассогласования $\varepsilon \ll 1$ (его значение определено в подразделе 1.4.4). Тогда в правой части уравнения непрерывности появляется член $-\varepsilon V_0''(\eta)S$. Кроме того, учтем, что процесс самоорганизации реализуется только при установлении стационарного потока \mathbf{j} , наличие которого приводит к возрастанию энтропии термостата S с постоянной скоростью

$-\nabla \mathbf{j} \equiv (\tau_\eta/\tau_S)S_e$ (энтропия самоорганизующейся системы $\Delta S \equiv S_e - S$ при этом, разумеется, уменьшается). В результате уравнение баланса энтропии принимает вид

$$\dot{S} = (\tau_\eta/\tau_S)S_e - \varepsilon V_0''(\eta)S. \quad (\text{B.2})$$

Отсюда в стационарном режиме $\dot{S} = 0$ получаем равенство $S = (\tau_\eta/\varepsilon\tau_S)S_e/V_0''(\eta)$, которое сводится к виду (1.172) для затравочного потенциала

$$V_0 = \frac{\eta^2}{2} + \frac{\eta^4}{12}. \quad (\text{B.3})$$

Рассмотрим теперь уравнение (1.221) для поля флуктуаций $\varphi(\mathbf{r}, t)$. В отличие от сопряженного поля h флуктуационное φ является неоднородным даже в стационарном состоянии. Используем аппроксимацию $\nabla^2 \varphi = (\xi/a)^2 \varphi$, где a — масштаб изменения стационарной флуктуации, ξ — корреляционная длина, к которой отнесена координата \mathbf{r} . Тогда в стационарном состоянии $\dot{\varphi} = 0$ из (1.221) следует соотношение

$$\varphi = \frac{V_0'''(\eta)S}{V_0''(\eta) - (\xi/a)^2}, \quad (\text{B.4})$$

показывающее, что величины φ , S связаны только за счет ангармонизма $V_0'''(\eta) \neq 0$ затравочного потенциала. Кроме того, условие устойчивости $\varphi > 0$ требует, чтобы масштаб неоднородности превышал значение $(V_0''(\eta))^{-1/2}\xi$. При выполнении более жесткого требования $(a/\xi)^2 V_0''(\eta) \gg 1$ в знаменателе (B.4) можно опустить слагаемое $-(\xi/a)^2$. Указанное неравенство отвечает адиабатическому условию, которое, однако, связывает не временные, а пространственные масштабы.

В адиабатическом приближении уравнение (1.221) для амплитуды наиболее вероятной флуктуации $\varphi(t)$ принимает вид

$$\dot{\varphi} = V_0''(\eta)\varphi - V_0'''(\eta)S. \quad (\text{B.5})$$

С учетом зависимости $S(\eta)$ в стационарном состоянии $\dot{\varphi} = 0$ получаем $\varphi = (\sigma/2)V_0'''(\eta)/[V_0''(\eta)]^2$, $\sigma \equiv S_e/S_c$, где введено характерное значение управляющего параметра

$$S_c \equiv (\varepsilon/2)(\tau_S/\tau_\eta). \quad (\text{B.6})$$

Рассмотрим наконец уравнение (1.220) для поля параметра порядка $\eta(\mathbf{r}, t)$. Подставляя в него зависимость $\varphi(\eta)$, приходим к уравнению

$$\dot{\eta} - \nabla^2 \eta = -\frac{\partial \tilde{V}}{\partial \eta}, \quad \tilde{V}(\eta) \equiv V_0(\eta) + \frac{\sigma}{2V_0''(\eta)}, \quad (\text{B.7})$$

которое отличается от (1.176) градиентным слагаемым. Для зависимости (B.3) синергетический потенциал принимает вид

$$\tilde{V}(\eta) = V_1(\eta) + \frac{\eta^4}{12}, \quad V_1(\eta) \equiv \frac{1}{2} \left[\eta^2 + \frac{\sigma}{1 + \eta^2} \right]. \quad (\text{B.8})$$

Отличие (1.177) и (B.8) обусловлено тем обстоятельством, что потенциал V определен при постоянном поле h , тогда как \tilde{V} — при фиксированной амплитуде флуктуаций φ . Иными словами, первый является функцией поля h , а второй зависит от амплитуды флуктуаций φ . Величины h , φ представляют пару сопряженных параметров стационарного состояния (типа объема и давления в термодинамике), а синергетические потенциалы $V(h)$, $\tilde{V}(\varphi)$ связаны преобразованием Лежандра $\tilde{V} = V - h\varphi$. Уравнение состояния, дающее зависимость $h(\varphi)$, следует из условия $h = -\partial \tilde{V} / \partial \varphi$. Более просто ввести поле $f = -V_0'(\eta) + \nabla^2 \eta \equiv -\delta V_0\{\eta\} / \delta \eta$, которое сводится к обобщенной силе. Тогда уравнение (1.220) принимает вид

$$\dot{\eta} = f + \varphi. \quad (\text{B.9})$$

Сравнивая (B.9) с (1.212), находим связь

$$h = \eta + f + \varphi \equiv [\eta - V_0'(\eta) + \nabla^2 \eta] + \varphi. \quad (\text{B.10})$$

В стационарном состоянии ($\dot{\eta} = 0$) амплитуда наиболее вероятной флуктуации $\varphi = -f$ с точностью до знака совпадает с обобщенной силой, а поле $h = \eta$ сводится к параметру порядка. В общем случае рассогласование $f + \varphi \neq 0$ приводит к изменению параметра порядка со временем, а различие между полями h , φ обусловлено нелинейной составляющей обобщенной силы f .

Следует отметить, что полученные уравнения (B.7), (B.5), (B.2) и уравнения Лоренца (1.212) — (1.214) совпадают только по своей структуре. Так, уравнение баланса энтропии (B.2) подобно уравнению (1.214) содержит отрицательную обратную связь, однако она выражается слагаемым $-\varepsilon V_0''(\eta)S$, пропорциональным энтропии, тогда как соответствующий член

$-A_S \eta h$ ее не содержит. Слагаемое $A_h \eta S$ в (1.213) и $-V_0'''(\eta)S$ в (В.5) совпадают в случае затравочного потенциала (В.3) с точностью до знака. И наконец, полевое уравнение (В.7) для параметра порядка отличается от уравнения Ландау—Халатникова (1.176) только учетом пространственной неоднородности. Как уже отмечалось, физическая причина указанных различий состоит в том, что уравнения Лоренца содержат поле h , сопряженное параметру порядка, тогда как в исходных полевых уравнениях (1.220) — (1.223) фигурирует амплитуда наиболее вероятной флуктуации φ . Поскольку h , φ играют роль сопряженных параметров стационарного состояния системы, то развитый полевой формализм и схема Лоренца оказываются взаимно дополнительными подходами: первый используется при фиксированном значении амплитуды наиболее вероятной флуктуации φ , а второй — при фиксированном поле h . Очевидно, наиболее естественным образом реализуется второй случай, для перехода к которому следует воспользоваться уравнением состояния (В.10).

Навчальне видання

Олемской Олександр Іванович
Хоменко Олексій Віталійович

**СИНЕРГЕТИКА КОНДЕНСОВАНОГО
СЕРЕДОВИЩА**

Рекомендовано Міністерством освіти і науки України як
навчальний посібник для студентів вищих навчальних
закладів, які навчаються за напрямом "Електроніка"

(Російською мовою)

Відповідальний редактор М.Я. Сагун
Редактори: Н.З. Боднар, В.Я. Медведева

Підп. до друку 15.08.02. Формат 60× 84/16.
Умовн.друк.арк. 21,68. Ум.фарбовідбит. 23,31. Облік.-вид.арк. 25,09.
Наклад 300 прим. Вид. №75. Замовлення №

Видавництво СумДУ. Р.с. №34 від 11.04.2000 р.
40007, м. Суми, вул. Римського-Корсакова, 2.
"Ризоцентр"СумДУ. 40007, м. Суми, вул. Римського-Корсакова, 2