

**МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ УКРАИНЫ
СУМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ**

На правах рукописи

Хоменко Алексей Витальевич

УДК 538.9(043.5)

**САМООРГАНИЗАЦИЯ И ФОРМИРОВАНИЕ НИЗКОРАЗМЕРНЫХ
СИСТЕМ ПРИ УДАЛЕНИИ ОТ РАВНОВЕСИЯ**

01.04.07 — физика твердого тела

**Диссертация
на соискание ученой степени доктора
физико–математических наук**

Сумы — 2009

СОДЕРЖАНИЕ

ВВЕДЕНИЕ	7
РАЗДЕЛ 1. ПРОЦЕССЫ ТРЕНИЯ УЛЬТРАТОНКИХ ПЛЕНОК СМАЗКИ И ИНТЕНСИВНОЙ ПЛАСТИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ (ЛИ- ТЕРАТУРНЫЙ ОБЗОР)	16
1.1. Фазовая динамика трения ультратонких пленок смазки	16
1.1.1. Граничный режим трения	16
1.1.2. Методика эксперимента	18
1.1.3. Модель фазовых переходов прерывистого режима трения	23
1.1.4. Неньютоновские свойства и экспериментальное проявление фа- зовых переходов молекулярно—тонких пленок	25
1.1.5. Новая карта и теоретические подходы для описания граничного режима трения	31
1.2. Методы и теории интенсивной пластической деформации	36
1.3. Выводы	40
РАЗДЕЛ 2. СИНЕРГЕТИЧЕСКАЯ ТЕОРИЯ ПЛАВЛЕНИЯ УЛЬТРА- ТОНКОЙ ПЛЕНКИ СМАЗКИ	42
2.1. Основные уравнения	42
2.2. Условия перехода	46
2.3. Описание пространственной неоднородности	52
2.4. Гистерезисные явления при зависимости модуля сдвига от напряжений	55
2.4.1. Скачкообразное плавление	55
2.4.2. Кинетика фазового перехода второго рода	63

2.4.2.1. Случай $\tau_\varepsilon \ll \tau_\sigma, \tau_T$	63
2.4.2.2. Случай $\tau_\sigma \ll \tau_\varepsilon, \tau_T$	66
2.4.2.3. Случай $\tau_T \ll \tau_\sigma, \tau_\varepsilon$	67
2.4.3. Кинетика фазового перехода первого рода	69
2.4.3.1. Случай $\tau_\varepsilon \ll \tau_\sigma, \tau_T$	69
2.4.3.2. Случай $\tau_\sigma \ll \tau_\varepsilon, \tau_T$	70
2.4.3.3. Случай $\tau_T \ll \tau_\sigma, \tau_\varepsilon$	72
2.5. Гистерезисные явления при зависимости модуля сдвига от деформации	73
2.5.1. Фазовый переход второго рода	73
2.5.1.1. Скачкообразное плавление	73
2.5.1.2. Непрерывное превращение	79
2.5.1.3. Фазовая кинетика	80
2.5.2. Фазовый переход первого рода	86
2.6. Влияние температурной зависимости вязкости	90
2.6.1. Соотношение Фогеля—Фулчера	90
2.6.2. Степенная зависимость	94
2.7. Выводы	96
РАЗДЕЛ 3. ВЛИЯНИЕ ФЛУКТУАЦИЙ НА ПЛАВЛЕНИЕ УЛЬТРА- ТОНКОЙ ПЛЕНКИ СМАЗКИ	100
3.1. Влияние аддитивного некоррелированного шума	100
3.1.1. Уравнения Ланжевена и Фоккера—Планка	100
3.1.2. Фазовые диаграммы	106
3.1.3. Плавление ультратонкой пленки смазки за счет диссипативного разогрева поверхностей трения	111
3.1.4. Периодический прерывистый режим трения	117
3.1.5. Самоподобный режим	120

3.2. Влияние коррелированных флуктуаций температуры на динамическую фазовую диаграмму	130
3.2.1. Основные уравнения	130
3.2.2. Метод эффективного потенциала	135
3.2.3. Непрерывное превращение	140
3.2.4. Учет деформационного дефекта модуля сдвига	142
3.2.5. Самоподобное поведение	146
3.2.5.1. Непрерывное превращение	146
3.2.5.2. Учет деформационного дефекта модуля сдвига	151
3.3. Выводы	157
РАЗДЕЛ 4. ФАЗОВАЯ ДИНАМИКА И КИНЕТИКА ИНТЕНСИВНОЙ ПЛАСТИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ	161
4.1. Основные соотношения	161
4.2. Фазовая диаграмма	167
4.3. Кинетика установления равновесного значения плотности энергии дефектов	173
4.3.1. Временные зависимости	173
4.3.2. Координаты $\dot{\varphi} - \varphi$	176
4.4. Влияние шума на процесс интенсивной пластической деформации	178
4.4.1. Фазовая диаграмма	178
4.4.2. Самоподобный режим	183
4.5. Выводы	188
РАЗДЕЛ 5. ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ ВДАЛИ ОТ РАВНОВЕСИЯ	191
5.1. Образование лавин	191
5.1.1. Формирование стационарной лавины	191

5.1.2.	Флуктуационное формирование лавины	198
5.1.3.	Дробная система Лоренца	203
5.2.	Взрывная кристаллизация ультрадисперсных аморфных пленок	207
5.2.1.	Экспериментальные данные	207
5.2.2.	Исследование условий взрывной кристаллизации	209
5.2.3.	Описание взрывной кристаллизации в представлении самоорга- низуемой критичности	212
5.2.4.	Временная зависимость вероятности кристаллизации	218
5.3.	Суперсимметричная теория самоорганизующейся системы с эффектами памяти и потери эргодичности	221
5.3.1.	Микроскопическое представление системы Лоренца	221
5.3.2.	Суперсимметричный лагранжев формализм	227
5.3.3.	Корреляционная техника	231
5.4.	Синергетическое представление фазовых переходов с комплексным пара- метром порядка и между режимами транспортного потока	243
5.4.1.	Переход второго рода с комплексным параметром порядка . . .	243
5.4.2.	Переход между режимами транспортного потока	248
5.5.	Выводы	254
 РАЗДЕЛ 6. ТЕОРИЯ ПОВЫШЕННОЙ ПЛАСТИЧНОСТИ НАНО– И СУБМИКРОКРИСТАЛЛОВ		257
6.1.	Анализ экспериментальных данных	257
6.2.	Распределение упругих полей	268
6.3.	Термодинамика фазового равновесия зернограничной и зеренной фаз	273
6.4.	Обсуждение микроскопической природы гетерофазной структуры зерна	278
6.5.	Выводы	283

ОСНОВНЫЕ ВЫВОДЫ	286
СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ	290
Приложение А	313
Приложение Б	317

ВВЕДЕНИЕ

Будучи наукой о самоорганизующихся системах, синергетика позволяет понять особенности коллективного поведения сильно неравновесных статистических ансамблей в физике, химии, биологии, социологии и т.д. [1–3]. 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 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 термодинамической картины фазовых переходов) 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 зоне пластического течения.

Выявление причин, которые обуславливают трение твердых тел, имеет большое значение как с фундаментальной, так и с практической точки зрения [4, 5]. С одной стороны, развитие нанотехнологий и создание новых высокотехнологичных приборов, например, компьютерных запоминающих устройств и миниатюрных двигателей, требуют глубокого понимания процессов, которые имеют место при трении [6–16]. С другой стороны, несмотря на значительные усилия, до сих пор еще не существует целостной теории рассматриваемого явления.

Актуальность темы. В настоящее время особое место в физических исследованиях отводится наноразмерным системам, поскольку они ведут себя отличным от объемных тел образом и одновременно с этим имеют большое прикладное значение. В частности, узлы трения, представляющие атомарно–гладкие поверхности, разделенные тонким слоем смазки, могут использоваться в системах позиционирования в микроустройствах. При проектировании последних минималь-

ность трения между их подвижными частями является одним из главных критериев. В данной работе разработана феноменологическая схема, позволяющая описать аномальное поведение ультратонких пленок смазки.

Интерес к нано— и субмикрорекристаллам (НК и СМК), полученным фрагментацией металлов в процессе интенсивной пластической деформации (ИПД), определяется с практической точки зрения привлекательным сочетанием высоких значений прочности и пластичности. Для исследователя НК представляет своеобразный физический объект, являющийся промежуточным между обычным поликристаллом и металлическим стеклом. Поэтому теоретическое описание физико—механических свойств НК систем является актуальным как с практической, так и с физической точки зрения. В предлагаемой работе изучение закономерностей фрагментации направлено на описание динамики процесса на основе термодинамической модели [17].

В настоящее время в теории самоорганизующихся систем сложилась своеобразная ситуация. С одной стороны, успешно развивается синергетическая концепция, позволяющая объяснить самоорганизацию (упорядочение) открытой системы за счет усиления беспорядка окружающей среды [1, 3]. С другой стороны, активно исследуются явления самоорганизуемой критичности (СОК) [18–27]. Однако, несмотря на то, что как синергетика, так и теория СОК призваны объяснить одно и то же явление — самоорганизацию [28], они развиваются независимым образом. Это связано с тем, что в рамках синергетического подхода [1] исследуется одиночный статистический ансамбль, тогда как рассмотрение моделей СОК [22–24] сводится, как правило, к исследованию эволюции иерархически соподчиненных ансамблей [29]. Поскольку каждому из них отвечает отдельная область пространства состояний, то необходимо описать и потерю эргодичности, приводящую к кластеризации фазового пространства самоорганизующейся системы [3, 30–32].

Таким образом, последовательная картина сильно неравновесной конденсированной среды требует использования методов, которые позволяют представить

такие особенности, как взаимное влияние подсистемы, испытывающей фазовый переход, и окружающей среды, неэргодичность статистического ансамбля, возникновение иерархических структур и т.д.

Связь работы с научными программами и темами. Диссертационная работа является частью комплексных исследований, выполненных на кафедре физической электроники Сумского государственного университета согласно следующим госбюджетным научно—исследовательским работам (НИР): НИР 0197U016609 "Стохастическая теория неравновесного конденсированного состояния", 1997—1999 гг.; НИР Государственного фонда фундаментальных исследований 0197U016612 "Исследование стохастических систем с мультипликативным шумом при спонтанном нарушении эргодичности", 1997—1999 гг.; НИР 0100U003216 "Суперсимметричная теория неупорядоченных гетерополимеров", 2000—2002 гг.; НИР 0103U000772 "Синергетическая теория конденсированных сред", 2003—2005 гг.; НИР 0106U001940 "Статистическая теория сложных систем экономического типа", 2006—2008 гг. (ответственный исполнитель); НИР 0107U001279 "Синергетика граничного трения", 2007—2008 гг. (научный руководитель); НИР Государственного фонда фундаментальных исследований 0107U008898 "Статистическая нелинейная теория динамических фазовых режимов граничного трения в наноустройствах", 2007—2009 гг. (научный руководитель).

Цель и основные задачи исследования. Целью работы является установление механизмов и моделирование указанных особенностей в низкоразмерных системах в рамках синергетического подхода, представляющего взаимно согласованную эволюцию гидродинамических мод, параметризующих систему. Поскольку понятие самоорганизации является обобщением физической концепции фазового перехода, то предлагаемую феноменологическую теорию следует рассматривать как развитие схемы термодинамических превращений на открытые системы. Для подтверждения общности развитого подхода выбран широкий круг систем: ультратонкие пленки смазок; металлы, подвергаемые ИПД; сыпучие среды; ультра-

дисперсные полупроводниковые аморфные пленки; НК и СМК и т.д. В результате основная задача сводится к исследованию моделей, позволяющих представить экспериментально наблюдаемое поведение.

Достижение цели требовало решения следующих основных задач:

- разработать качественную феноменологическую модель, позволяющую описать поведение ультратонких пленок смазок при трении между атомарно-гладкими твердыми поверхностями, используя детерминистический подход, и в условиях стохастичности;

- на основе теории фазовых переходов определить возможные режимы фрагментации в процессе ИПД;

- разработать оптимальные синергетические схемы, позволяющие самосогласованным образом описать образование лавины сыпучей среды, переход между процессами взрывной и обычной кристаллизации и фазовый переход с комплексным параметром порядка;

- провести суперсимметричное описание самоорганизующейся системы с эффектами памяти и потери эргодичности;

- объяснить аномальные физико-механические свойства НК и СМК на основе термодинамического подхода и концепции о перестройке атомных состояний при значительном удалении от равновесия.

Объект исследования — процессы самоорганизации и формирования низкоразмерных конденсированных систем.

Предмет исследования — фазовая динамика и кинетика самоорганизации и формирования низкоразмерных конденсированных систем при удалении от равновесия под влиянием внешних воздействий.

Методы исследования. При выполнении работы использовались реологические, синергетические и стохастические методы, методы теорий упругости и фазовых переходов, методы математической физики, вычислительной математики и математического моделирования. Самосогласованные нелинейные дифференциальные уравнения решались при использовании адиабатического приближения.

При построении стационарного распределения параметра порядка по его величине использовались уравнения Ланжевена и Фоккера–Планка. Исследование кинетики рассматриваемых процессов проводилось методом фазовой плоскости. Для анализа влияния коррелированного шума использовался метод эффективного потенциала. Микроскопическая теория самоорганизующейся системы построена на основе теории суперсимметричного поля, позволяющей последовательным образом представить эффекты памяти и неэргодичности.

Научная новизна полученных результатов

1. На основе модели вязкоупругой среды, обладающей теплопроводностью, впервые разработана синергетическая теория плавления ультратонкой пленки смазки, учитывающая пространственную неоднородность, гистерезисные явления и температурную зависимость вязкости. Построены фазовые портреты кинетических режимов плавления, соответствующих различным соотношениям времен релаксации сдвиговых напряжений, деформации и температуры смазки. Определены тепловые и упругие параметры, при которых трение уменьшается.
2. При учете белого и цветного гауссовых шумов основных параметров смазки впервые установлены области реализации сухого, жидкостного и прерывистого трения. В случае некоррелированных флуктуаций на основе качественного анализа временных зависимостей напряжений для всех областей описаны переходы между режимами трения и объяснено плавление за счет диссипативного разогрева поверхностей трения. Проведено описание самоподобного поведения твердоподобной смазки, характеризуемого степенным распределением напряжений.
3. В рамках неравновесной термодинамики и теории фазовых переходов Ландау усовершенствован подход, позволяющий получить уравнения эволюции дефектных структур в процессе ИПД при воздействии шума, исходя из многомерного термодинамического потенциала. В детерминистическом случае и

при учете аддитивных некоррелированных шумов впервые построены фазовые диаграммы, которые определяют области существования различных предельных зернистых структур. Найдены условия реализации фрактальных зернистых структур.

4. Впервые предложены самосогласованные синергетические модели, описывающие образование лавины сыпучей среды, переход между режимами взрывной и обычной кристаллизации и фазовый переход с комплексным параметром порядка. Взрывная кристаллизация представлена как явление СОК, при котором распространение фронта является диффузией в ультраметрическом пространстве иерархически соподчиненных лавин.
5. Осуществлено дальнейшее развитие суперсимметричной теории, описывающей поведение неравновесной термодинамической системы с учетом эффектов памяти и неэргодичности. Представлено упорядочение неравновесной термодинамической системы с замороженным беспорядком. Построена фазовая диаграмма, определяющая области существования упорядоченной, неупорядоченной, эргодической и неэргодической фаз.
6. На основе анализа экспериментальных данных о НК и СМК впервые построена термодинамическая модель, позволяющая объяснить их физико-механические свойства. Показано, что зерно НК и СМК представляет гетерогенное состояние, состоящее из центральной области с идеальной кристаллической решеткой и сферического зернограничного слоя с размытым атомным потенциальным рельефом. Объяснена экспериментально найденная зависимость объемной доли этого слоя от размера зерна.

Практическое значение полученных результатов. Данный подход для описания граничного трения развит с целью контролирования поведения смазочных пленок и выбора их параметров таким образом, чтобы свести к минимуму вероятность реализации прерывистого (stick–slip) режима, который является основной причиной разрушения трущихся деталей. Феноменологическая мо-

дель ИПД открывает перспективы для получения материалов с определенными физико–механическими свойствами за счет образования предельных зеренных структур различного типа. Предложенная схема самоорганизации позволяет прогнозировать поведение сыпучих сред, выбирать материалы, предрасположенные к взрывной кристаллизации, а также дает возможность регулировать транспортные потоки. Развитая суперсимметричная теория предназначена для описания эффектов памяти и неэргодичности в зависимости от состояния неравновесной термодинамической системы. На ее основе построена фазовая диаграмма, определяющая термодинамическое состояние в осях интенсивностей замороженного и термического беспорядков. Это позволяет проводить целенаправленный поиск таких систем, как, например, структурные и спиновые стекла, обладающих заданными свойствами. Как отмечалось выше, практическое значение исследования НК и СМК обусловлено тем, что они обладают уникальным сочетанием физико–механических свойств, улучшающим их эксплуатационные характеристики.

Полученные результаты могут быть также использованы в дальнейших исследованиях физических принципов самоорганизации и формирования низкоразмерных систем под влиянием внешних воздействий. Результаты работы включены в учебный процесс при преподавании специальных дисциплин и подготовке магистерских и дипломных работ по специальности "Физическая и биомедицинская электроника".

Личный вклад соискателя. В работе обобщены результаты комплексных исследований, выполненных автором в соавторстве ([33–36, 39–44, 46, 49–52, 54, 56, 57, 60–67, 69–72]) и самостоятельно ([37, 38, 45, 47, 48, 53, 55, 58, 59, 68]). Соискатель принимал участие в постановке задач, проведении исследований, обсуждении и интерпретации полученных результатов, написании научных работ. В публикациях [35–48, 50–62, 68, 70] диссертанту принадлежит ведущая роль в выборе и обосновании направления исследований. В работах [33, 34, 49, 63–67, 69, 71, 72] участие автора диссертации заключалось в аналитическом и численном решении поставленных задач. Физические идеи и методы их исследования, научные выводы

и положения, выносимые на защиту, принадлежат лично диссертанту. Основная часть полученных результатов докладывалась соискателем лично на международных и национальных конференциях, семинарах.

Апробация результатов диссертации. Основные результаты, изложенные в диссертационной работе, докладывались и обсуждались на международных и национальных конференциях, семинарах, таких, как: Middle European Cooperation in Statistical Physics (Lutherstadt Wittenberg, Germany, 1999); XIV, XV, XVI, XVII Міжнародні школи—семінари "Спектроскопія молекул та кристалів" (Одеса, 1999; Чернігів, 2001; Севастополь, 2003; Берегове, Крим, 2005); Всеукраїнські та Міжнародні конференції студентів і молодих науковців з теоретичної та експериментальної фізики ЄВРИКА—2002, 2003, 2004, 2005, 2006, 2007, 2008 (Львів, 2002—2008); International workshop and seminar on Topology in Condensed Matter Physics (Dresden, Germany, 2002); Statistical Physics 2005: Modern Problems and New Applications (Lviv, Ukraine, 2005); Третя всеукраїнська конференція молодих вчених та спеціалістів "Надтверді, композиційні матеріали та покриття: отримання, властивості та застосування" (Київ, 2006); International Conference "Statistical Physics 2006: Theory and Applications" (Kharkiv, Ukraine, 2006); 9—я, 10—я Международные конференции "Высокие давления — 2006, 2008. Фундаментальные и прикладные аспекты" (Судак, 2006, 2008); 2nd International Conference "Quantum Electrodynamics and Statistical Physics — QEDSP2006" (Kharkov, Ukraine, 2006); Международная конференция "Мезоскопические явления в твердых телах" (Донецк, 2007); конференція молодих вчених і аспірантів Інституту електронної фізики НАН України "ІЕФ—2007" (Ужгород, 2007); International Conference "Functional Materials" (Partenit, Crimea, Ukraine, 2007); Міжнародна наукова конференція "Фізико—хімічні основи формування і модифікації мікро— та наноструктур" (Харків, 2008); V та VII Всеукраїнські школи—семінари і конкурси молодих вчених зі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини Інституту фізики конденсованих систем НАН України (Львів, 2005, 2007); научные семинары Сумского государственного университета, Института магнетизма (Киев), Донецкого физико—

технического института им. А.А. Галкина, Института прикладной физики (Сумы) НАН Украины и кафедры макромолекулярной физики физико–математического факультета Карлова университета (Прага, Чехия).

Публикации. По материалам диссертации опубликовано учебное пособие с грифом МОН Украины, 30 статей в специализированных научных журналах (работа [63] является обзорной) и 32 тезисов докладов.

РАЗДЕЛ 1

ПРОЦЕССЫ ТРЕНИЯ УЛЬТРАТОНКИХ ПЛЕНОК СМАЗКИ И ИНТЕНСИВНОЙ ПЛАСТИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ (ЛИТЕРАТУРНЫЙ ОБЗОР)

1.1. Фазовая динамика трения ультратонких пленок смазки

1.1.1. Граничный режим трения

В последние двадцать лет с помощью экспериментального [4–8, 73, 74] и теоретического [4, 75, 76] исследования, а также компьютерного моделирования [77–84] удалось значительно продвинуться в понимании физики трения скольжения гладких твердых поверхностей при наличии тонкой пленки жидкости между ними. Исследования в данной области представляют как фундаментальный, так и практический интерес, поскольку потребность в гладких, слабо трущихся деталях растет в таких высокотехнологичных компонентах, как компьютерные запоминающие устройства, миниатюрные двигатели, аэрокосмические приборы.

Экспериментально обнаружено, что в процессе трения жидкая пленка становится все более тоньше, сначала ее физические свойства изменяются постепенно количественным образом, а затем изменения приобретают резкий качественный характер [4, 5, 7, 8, 73]. Качественные изменения выражаются в неньютоновском механизме течения и замене обычного плавления на стеклование, однако пленка смазки продолжает вести себя как жидкость. В трибологии такое поведение называют "смешанным смазыванием", которое представляет промежуточный режим трения, характеризующийся переходом от объемных свойств к граничным (табл. 1.1).

Для более тонких пленок изменения чаще всего значительнее, поскольку их свойства изменяются качественно. Так, в данном случае могут происходить фазовые переходы первого рода в твердоподобные или жидкоподобные фа-

Таблица 1.1

Основные режимы, характеризующие изменения физических свойств простой бесструктурной ньютоновской жидкости (в большом объеме) при возрастающем ограничении между двумя твердыми поверхностями [8]

Режим	Условия для достижения режима	Статические/равновесные свойства	Динамические свойства
Большой объем жидкости	Толстые пленки (более 15 диаметров молекул, намного больше радиуса гирации для полимеров), низкая или нулевая нагрузка, высокие скорости сдвига	Объемные свойства сплошной среды: плотность объемной жидкости, отсутствие дальнего порядка	Объемные свойства сплошной среды: ньютоновская вязкость, малые времена релаксации, отсутствие температуры стеклования, отсутствие пределов текучести, плотное упруго-гидродинамическое (УГД) смазывание
Смешанный или промежуточный	Пленки средней толщины (4–15 диаметров молекул, порядка радиуса гирации для полимеров), низкие нагрузки	Изменившиеся свойства включают: новый позиционный и ориентационный порядок, корреляции молекул от среднего к дальнему порядку, сложные состояния	Изменившиеся реологические свойства включают: неньютоновское течение, стекловидные состояния, большие времена релаксации, смешанное смазывание
Граничный	Молекулярно-тонкие пленки (менее 4 диаметров молекул), высокие нагрузки, низкие скорости сдвига, гладкие или шероховатые поверхности	Начало нетекучих свойств: переход от жидкой к твердой фазе, появление новых жидкоподобных состояний, эпитаксиально индуцированное образование дальнего порядка	Начало трибологических свойств: отсутствие течения до момента достижения пределов текучести или критического сдвигового напряжения, твердоподобное поведение пленки с диффузией дефектов, движение дислокаций, плавление при сдвиге поверхностей (сдвиговое плавление), граничное смазывание

зы [6–8, 78, 79, 85], свойства которых невозможно описать — даже качественно — в терминах, приемлемых для свойств жидкости, занимающей большой объем (объемной жидкости), таких, например, как вязкость. Эти пленки характеризуются пределом текучести, который является характеристикой разрушения в твердых телах, а их времена молекулярной диффузии и релаксации могут более, чем на десять порядков превышать значения соответствующих времен для объемной жидкости или даже пленок, которые только немного толще. Указанные три режима обобщены в табл. 1.1.

В данном разделе описываются динамические свойства пленок в граничном режиме, в частности, когда происходят переходы между различными типами динамических фаз во время скольжения. Недавние эксперименты с поверхностями, например, из слюды, кварца, оксидов металлов и мономолекулярных поверхностно-активных веществ между которыми при скольжении помещались разнообразные органические жидкости и водные растворы [6–8], показали, что такие фазовые переходы являются скорее правилом, чем исключением. При этом они проявляют себя в появлении прерывистого движения (*stick–slip motion*), подобного режиму, реализующемуся при сухом трении твердых поверхностей [86], который характеризуется периодическими переходами между двумя или более динамическими состояниями во время стационарного скольжения.

1.1.2. Методика эксперимента

Исследование свойств ультратонких слоев смазки требует специального высокотехнологичного оборудования, что связано с их молекулярными размерами. Однако, несмотря на сложность, существуют экспериментальные установки и соответствующие методики, позволяющие измерять толщину молекулярных слоев, их вязкость, коэффициент трения, сдвиговые компоненты вязких и упругих напряжений и т.д.

На рис. 1.1 показана механическая схема взаимодействия, которая характеризует большинство трибологических экспериментов. Верхний блок с массой M скользит со скоростью V_0 под действием пружины с коэффициентом жесткости k по гладкой подложке, покрытой слоем смазки толщиной h . Привод — устройство, приводящее систему в движение, движется со скоростью V . Важно отметить, что на практике почти во всех случаях, приложенная, измеренная или определенная сила ($F = (x - x_0)k$) отличается от истинной или внутренней силы трения, возникающей на поверхностях (F_0). Связь сил F и F_0 зависит от конструкции системы. Согласно рис. 1.1, механическое взаимодействие обеспечивается через материал смазки. Это простейший тип механического соединения, используемый в аппарате поверхностных сил (в англоязычной терминологии — surface force apparatus (SFA)) и в атомно-силовом микроскопе (atomic force microscope (AFM)) [87–91].

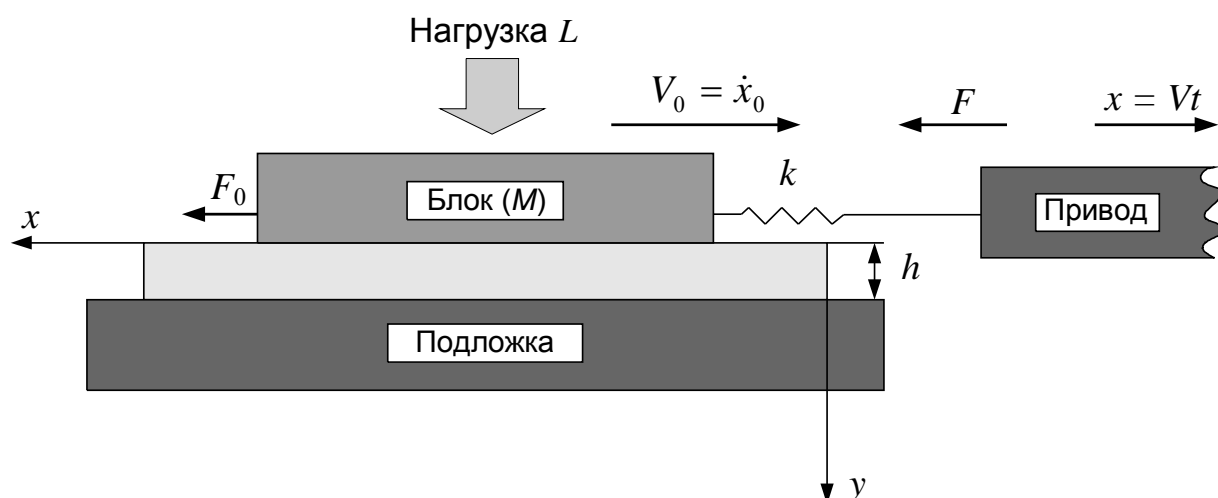


Рис. 1.1. Схема геометрии эксперимента и механического взаимодействия двух сдвигаемых поверхностей

Самый простой способ измерения динамических параметров смазки при трении между двумя твердыми поверхностями — использование двух атомарно-гладких поверхностей небольшого размера, наклеенных на сферические или цилиндрические поверхности, которые трутся между собой. Этот принцип использо-

ван при построении аппарата поверхностных сил и атомно—силового микроскопа.

В обзоре [89] описаны два типа аппарата поверхностных сил (SFA Mk II и SFA Mk III). Последний из них обладает улучшенной системой регулировки расстояния между исследуемыми трущимися поверхностями. Схема SFA Mk III приведена на рис. 1.2. Здесь микрометр M_1 , дифференциальный микрометр M_2 ,

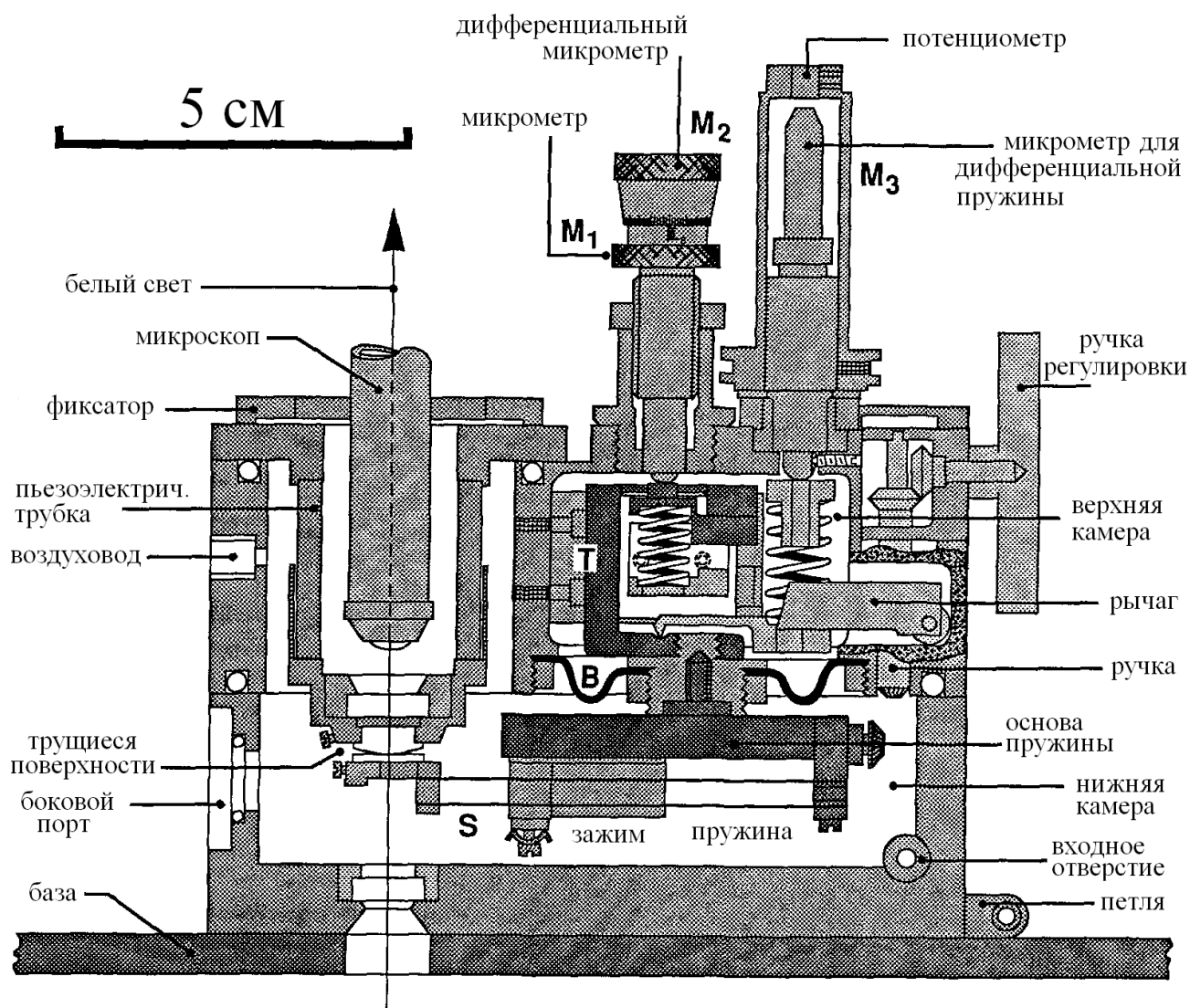


Рис. 1.2. Установка SFA Mk III для измерения сил между двумя молекулярно—гладкими поверхностями [89]

дифференциальная пружина M_3 и пьезоэлектрическая трубка представляют контрольные элементы. Для измерения расстояния между трущимися поверхностями используются оптические интерференционные методики. При этом белый свет проходит через взаимодействующие поверхности в перпендикулярном к ним на-

правлении. Прошедший луч света фокусируется на спектрометре, который разделяет его в различных длинах волн. В результате образуется спектр цветных полос, анализ которого позволяет определить форму трущихся поверхностей и расстояние между ними (в пределах 0.1 нм). Также можно определить площадь контакта (с точностью до $\pm 5\%$). С помощью аппарата поверхностных сил измеряются нормальные и сдвиговые компоненты действующих сил (с точностью до $\pm 1\%$) и величина приложенной нагрузки (с точностью до $\pm 5\%$).

Нижняя камера, в которой находятся слюдяные трущиеся поверхности, полностью заполнена жидкой исследуемой смазкой. При этом она не выдавливается из-под поверхностей трения под действием нагрузки, что облегчает проведение эксперимента. Верхняя камера герметично отделена от нижней тефлоновыми вставками *B*. С помощью указанных методик проводились эксперименты с атомарно-гладкими поверхностями из слюды [92–94], кварца [95] и сапфира [96]. Роль смазок при этом играли полимерные цепочки [97], поверхностно-активные вещества [90, 98], протеиновые составы [99] и металлические слои, осажденные на слюду [100].

На верхней панели рис. 1.3 изображены типичные траектории трения, которые получены с помощью аппарата поверхностных сил для двух скользящих поверхностей слюды, разделенных смазочным слоем гексадекана толщиной ~ 1 нм. На нижней панели рисунка приведены результаты эксперимента для сферических молекул ОМЦТС. Эти пики прерывистого режима представляют твердоподобное и жидкоподобное состояния пленки [6, 79], сначала давая статическую силу трения F_s (сухое трение), а затем — кинетическую силу трения F_k (жидкостное трение). В этом эксперименте сдвиговая скорость и температура постоянны. На начальном этапе сила трения F монотонно растет, а затем наступает режим прерывистого трения. Из сравнения рисунков видно, что для упорядочения цепных молекул необходимо большее время, чем для сферических. Также следует отметить, что в случае сферических молекул установившийся stick–slip режим более стационарен (значения F_s и F_k не изменяются с течением времени).

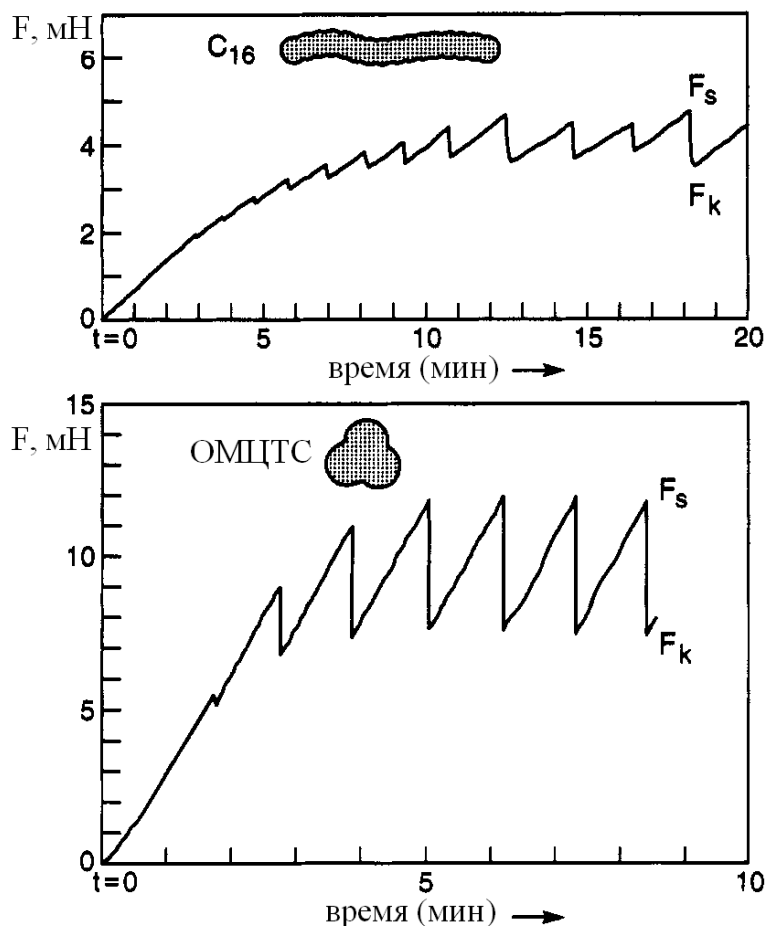


Рис. 1.3. Зависимость полной силы трения от времени в эксперименте по трению двух атомарно—гладких поверхностей в аппарате поверхностных сил при начале движения в момент времени $t = 0$: верхняя панель — слой смазки состоит из цепных молекул гексадекана; нижняя панель — слой состоит из квази—сферических молекул октаметилциклотетрасилоксана (ОМЦТС) [8]

Понимание причин прерывистого режима трения особенно важно в трибологии, поскольку его пики являются основной причиной разрушения и изнашивания трущихся деталей. При этом прерывистое трение представляет более распространенное явление [101, 102], которое также обуславливает генерацию звука (звук струны скрипки, скрип двери, дребезжание машин), чувственное восприятие (структура вкуса и осязания), землетрясения, неоднородные потоки жидкости, такие, как бьющее струей течение полимерных жидкостей. Прерывистый режим трения также может служить механизмом, лежащим в основе дискретизации ионных управляющих токов и действия потенциалов через биологические мембраны.

Таким образом, перед тем как продолжить изложение, рассмотрим теоретические предпосылки, объясняющие возникновение прерывистого режима трения.

1.1.3. Модель фазовых переходов прерывистого режима трения

Компьютерное моделирование молекулярной динамики показало, что тонкая межповерхностная пленка во время скольжения подвергается фазовому переходу первого рода между твердоподобным и жидкоподобным состояниями [78, 79], и навело на мысль, что он является причиной наблюдаемого прерывистого режима поведения простых изотропных жидкостей между двумя твердыми кристаллическими поверхностями. Согласно такой интерпретации, прерывистый режим возникает скорее в результате резких изменений текучих свойств пленки во время перехода [79, 85], чем вследствие постепенных или непрерывных изменений. Соответствующая модель, показанная на рис. 1.4, предполагает, что внутренняя сила трения изменяется прерывистым образом (во время фазовых переходов), а не непрерывно. Результирующий прерывистый режим также отличается, например, пики являются более острыми, и он может исчезнуть после превышения некоторой критической скорости V_c — наступает кинетический режим скольжения [103, 104]. Отметим, что показанное на рис. 1.4 смещение при скольжении порядка только двух постоянных решетки, во многих же практических задачах оно намного больше. Указанный тип трения главным образом можно наблюдать в экспериментах с гладкими поверхностями при наличии различных жидких смазочных материалов или конденсирующихся паров [6, 8, 77]. Моделирование [78, 79] проводилось для многих из рассматриваемых свойств ультратонких жидких пленок, подвергаемых сдвигу между молекулярно—гладкими поверхностями, и — как будет уточнено далее — до сих пор предлагает наиболее адекватное объяснение экспериментальных данных для случая, показанного на рис. 1.3.

Так как прерывистое движение наблюдается и в экспериментах при неизменной температуре поверхностей трения, для его объяснения вводится konce-

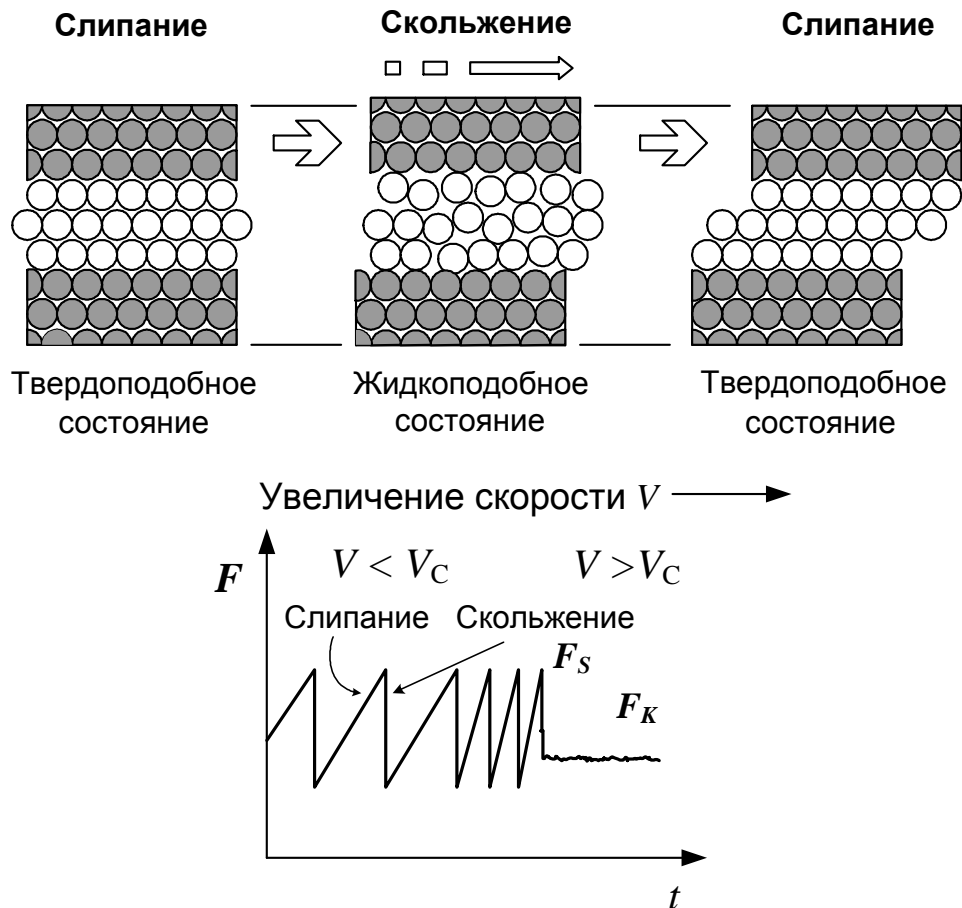


Рис. 1.4. Модель "фазовых переходов" прерывистого режима трения, в которой тонкая пленка жидкости попеременно застывает или плавится на протяжении сдвига между двумя твердыми кристаллическими поверхностями, и временная эволюция силы трения F при температуре $T < T_c$ с увеличением скорости V [8]

пция "сдвигового плавления" [76, 83], которая схематически показана на рис. 1.4. Этот рисунок объясняет прерывистый (stick–slip) режим. Сначала смазка твердоподобная (stick), затем при превышении некоторого критического напряжения σ (напряжение текучести) она резко переходит в жидкоподобную фазу (slip) за счет разупорядочения, при этом верхняя поверхность немного приподнимается. При дальнейшем движении за счет сдавливания стенок под воздействием нагрузки L (см. рис. 1.1) смазка снова затвердевает (stick).

Тем не менее, как отмечалось ранее и будет показано ниже, два состояния тонкой межповерхностной пленки — это не есть в точности то же самое, что и

объемная жидкая или твердая фазы [8]. Присущие им свойства обычно сильно отличаются, и более корректно было бы рассматривать их как жидкоподобное и твердоподобное, или, возможно, как динамическое и статическое "эпитаксиальные" состояния. Это обусловлено тем, что они возникают только в межповерхностных пленках, свойства которых определяются не столько взаимодействием молекул смазки друг с другом (что имеет место в объемных жидкостях), как ограничением и эпитаксиальными взаимодействиями между атомами пленки и поверхности. При этом результаты моделирования молекулярной динамики показывают [85], что структура цепных молекул как в твердоподобном, так и в жидкоподобном состояниях (режимы слипания и скольжения) не отличается.

Особенно в случае цепных молекул типа гексадекана, жидкоподобное состояние очень отличается от основного состояния жидкости. Эффекты, найденные при изменении величины нагрузки, температуры, сдвиговой скорости и т.д. сильно скоррелированы, и поэтому позволяют построить теорию трения таких систем. Полученные экспериментальные данные обеспечивают новое понимание влияния молекулярной формы на структуру и динамику молекул в ультратонких слоях и более определенно описывают граничные переходы и эффекты неустойчивости, результатом которых является промежуточный режим трения.

1.1.4. Неньютоновские свойства и экспериментальное проявление фазовых переходов молекулярно-тонких пленок

С одной стороны, высказывались предположения [90] о всего лишь большей упорядоченности смазки вследствие сжатия стенок, при котором функция плотности распределения становится более выраженной, но при этом жидкость остается истинной. С другой стороны, при дискретных толщинах пленок (в несколько молекулярных слоев) были проведены численные эксперименты [78, 79], показывающие, что жидкость кристаллизуется. Согласно [8], обе точки зрения вполне обоснованы, поскольку моделирование жидкости между гладкими, бесструктурными

поверхностями показало, что каждая молекула может стать захваченной ими, сохраняя способность довольно быстро перепрыгивать с одной поверхности на другую. Таким образом, одновременно наблюдаются упорядоченность и высокая диффузная подвижность в направлении перпендикулярном поверхностям. Существует вероятность того, что даже при наличии дальнего порядка в направлении параллельном структурным поверхностям, молекулы, вмороженные в каждый центр захвата, смогут перепрыгивать между ними (и поверхностями) с частотами, близкими к характерным для объемных жидкостей. Очевидно, что эти межповерхностные пленки проявляют уникальные свойства, качественно и количественно отличающиеся от присущих жидкой фазе большого объема.

В работе [81] на основе численного решения уравнения Ланжевена исследовались динамические переходы пленки смазки, состоящей из трех атомных слоев, которая находится между двумя сдвигаемыми твердыми поверхностями. Несмотря на нерегулярность атомных траекторий среднего слоя, обнаружено, что его структура характерна для твердого тела с дефектами, т.е., с одной стороны, она не является идеально трехмерной, а с другой, в точности не сводится к присущей жидкости. Такое стационарное состояние отвечает "прерывистому движению на атомном уровне". Это означает, что средний слой движется на протяжении времени релаксации, а затем останавливается, приликая к верхней или нижней поверхностям, до тех пор, пока напряжение не достигнет порогового значения. Таким образом, наблюдались структурные переходы пленки из жидкой в твердую фазу, которым соответствуют твердое с дефектной структурой и твердоподобное состояния.

Как показано в работе [73], времена релаксации жидкостей, ограниченных двумя твердыми поверхностями, могут увеличиваться на много порядков, даже если сравнивать их с пленками, которые толще только на несколько ангстрем. К тому же, процессы молекулярного переупорядочивания, возникающие в таких тонких пленках скоррелированы на больших расстояниях, что проявляется в больших объемах активации, связанных с измеренными модулями сдвига [105]. Недавние численные исследования также обосновали точку зрения, что при фазовых пе-

реходах в тонких пленках жидкости происходят процессы согласованного движения большого количества молекул с различными характерными временами [106].

Довольно большие величины времен релаксации для цепных молекул являются причиной возникновения "эффектов памяти". Если в ходе эксперимента трущиеся поверхности остановить на время t_s , а затем продолжить скольжение в том же направлении и с такой же скоростью, то для установления стационарного режима потребуется время, величина которого будет зависеть от t_s . Однако, как показано в работе [8], в некоторых случаях стационарный режим достигается немедленно. Для вязких жидкостей выполняется закон вязкого течения

$$\sigma = \eta \dot{\varepsilon}, \quad (1.1)$$

где σ — напряжение, под действием которого смазка течет;

η — вязкость;

ε — деформация, производная от которой связывается со скоростью движения.

При остановке поверхностей трения ($\dot{\varepsilon} = 0$), согласно (1.1), напряжения должны мгновенно релаксировать к нулю. Однако такой релаксации не происходит, так как после остановки в течение времени t_s при последующем движении продолжается установившийся режим прерывистого трения [8]. Если бы напряжения быстро релаксировали, то после такой остановки прерывистому режиму должно было предшествовать монотонное увеличение силы трения. Такая особенность выполняется только для ультратонких слоев и связана с тем, что смазка во время положения покоя поверхностей трения остается зажатой между ними в том состоянии, в котором система находилась перед остановкой. Следовательно, при температурах, при которых объемные смазки ведут себя как жидкости, ультратонкие пленки смазки могут проявлять свойства твердых тел.

Резкое падение значения силы трения F на пике (см. рис. 1.3) указывает, что плавление пленки и соответствующее изменение трения имеют скачкообразный характер. Таким образом, как отмечается в работе [8], если плавление зарождается

в определенной точке внутри контактной зоны, оно должно быстро распространяться по всей площади контакта. Возможно, что этот процесс аналогичен хрупкому разрушению в твердом теле, при котором трещина, появившаяся в каком-то месте, быстро увеличивается по всему материалу. Указанное также подобно резкому увеличению скорости зернограничного проскальзывания в неравновесных границах зерен за счет слияния их жидкоподобных участков при достижении сдвиговым напряжением σ критического значения [107].

Согласно [8], жидкоподобное состояние имеет эффективную вязкость η_{eff} , которая по величине намного порядков больше характерной для объемной жидкости и является неньютоновской. Это продемонстрировано с помощью следующего простого вычисления, основанного на обычном уравнении для течения Куэтта, примененного к геометрии рис. 1.1: $\eta_{eff} = F_k h / AV$, где F_k — кинетическая сила трения; h — толщина пленки; A — площадь контакта; V — скорость скольжения. Используя типичные значения для экспериментов с гексадеканом: $F_k = 5$ мН, $h = 1$ нм, $A = 3 \cdot 10^{-9}$ м², $V = 10^{-3}$ мм/с, получено $\eta_{eff} \approx 2000$ Н·м⁻²·с или 20000 Па, что в $\sim 10^6$ раз больше, чем вязкость η_b объемной жидкости. В работе [8] показано, что эта очень высокая эффективная вязкость, тем не менее, создает маленькую силу трения или коэффициент трения. Так, при приложенной нагрузке L в рассмотренном эксперименте около 20 мН, коэффициент трения составляет $\mu = F_k / L = 0.25$. Если нанометровая пленка ведет себя как объемная жидкость, то коэффициент трения при тех же условиях скольжения равен 0.000001. Такое низкое значение никогда не наблюдалось ни в какой из трибологических систем, и можно считать, что эта величина является теоретически самым малым пределом, который достигается при определенных экспериментальных условиях.

Неньютоновские свойства гидрокарбонатных пленок в жидкоподобном состоянии также выражаются в поведении кинетической силы трения F_k , которая не зависит от скорости скольжения. Это означает, что эффективная вязкость уменьшается с увеличением скорости сдвига, т.е. пленка, находясь в жидкоподобном состоянии, проявляет сдвиговое утончение [108, 109]. При различных условиях

скольжения обнаружено [6, 85], что две поверхности продолжают оставаться отделенными несколькими слоями жидкости, хотя и немного измененными по толщине и структуре. К тому же, эти многослойные жидкости подвергаются более, чем одному типу динамического фазового перехода, что проявляется в существовании различных типов прерывистого режима движения и в других трибологических свойствах [6, 73, 77, 82]. В следующих разделах данное обстоятельство получит обоснование при помощи учета коррелированных флуктуаций температуры и зависимости модуля сдвига смазки от напряжений и деформации.

Остановимся теперь на фундаментальных проблемах, касающихся основ определений и различий между твердым и жидким состояниями [6]. Существуют два общих определения: одно связано с дальним порядком молекул в твердых телах и отсутствием его в жидкостях, другое — с конечными модулями сдвига для твердого состояния, которые обращаются в ноль в жидкостях. Первое определение [110] означает отсутствие критической точки для перехода твердое состояние — жидкость благодаря разрушению симметрии типа порядок — беспорядок на протяжении этого превращения. Таким образом, переходы твердое состояние — жидкость являются переходами первого рода, при которых вещество не может непрерывно переходить из одного состояния в другое. Осциллирующие силы с малым радиусом действия, типичные для взаимодействия поперек тонких жидких пленок, указывают на то, что такую простую картину (строго применимую к жидкой фазе бесконечного объема) нельзя однозначно использовать для молекулярно-тонких пленок, которые могут непрерывно становиться более упорядоченными и твердоподобными с уменьшением толщины пленки. Действительно, хорошо известно, что в двумерном случае представляется возможным получить непрерывный переход из твердого в жидкое состояние, также как и другие типы фаз, не имеющие трехмерного аналога. Здесь не говорится о стеклах, являющихся обычными жидкостями, в которых релаксационные процессы протекают крайне медленно, то есть они являются неравновесными жидкостями, а также не имеются в виду аморфные твердые тела, представляющие неравновесные кристаллические тела.

Второе определение заключается в том, что твердые тела сопротивляются сдвигу, а жидкости нет. Установлено, что это простое определение нельзя однозначно применить к молекулярно—тонким пленкам, которые могут сопротивляться сдвигу и в то же время могут релаксировать и течь. С помощью исследования сдвиговых свойств тонких пленок жидкостей, описанного в работе [6], достигнут существенный прогресс в понимании этого сложного явления. Здесь экспериментально обнаружено, что молекулярно—тонкие пленки могут находиться в состоянии, не являющемся ни жидким, ни твердым, и что свойства пленок могут изменяться непрерывно от жидкоподобных к твердоподобным в зависимости от толщины пленки и скорости сдвига.

С увеличением температуры смазки силы трения прерывистого режима, как правило, уменьшаются, а при превышении некоторой критической температуры T_c прерывистое скольжение полностью исчезает, и движение продолжается равномерно в жидкоподобном кинетическом режиме [8]. Статический и кинетический коэффициенты трения также уменьшаются с ростом температуры. Это может происходить за счет уменьшения активационного энергетического барьера для скачков молекул при более высокой температуре, поскольку пленка становится более жидкоподобной. С другой стороны, такая характеристика прерывистого трения, как отношение статической и кинетической сил трения (F_s/F_k), остается приблизительно постоянной [111] или незначительно возрастает с увеличением температуры, даже несмотря на то, что при критической температуре T_c статическая компонента F_s исчезает полностью. Согласно [8], резкое исчезновение статического трения выше T_c подобно его резкому исчезновению при превышении критической скорости V_c .

Экспериментально наблюдалась следующая ситуация [8]. Когда пленка находится в режиме скольжения, ее состояние жидкоподобно. При остановке поверхностей молекулы пленки релаксируют, а затем спустя время τ_0 переходят в твердоподобное состояние. Если время остановки меньше, чем τ_0 , то молекулы остаются в жидкоподобной конфигурации, так что после возобновления движения

процесс скольжения продолжается в кинетическом режиме ($F = F_k$). Если время остановки больше, чем τ_0 , то пленка повторно затвердевает, и при возобновлении движения поверхности остаются слипшимися (режим слипания), пока не достигнется предел текучести при $F = F_s$, когда пленка плавится, и поверхности скользят (режим проскальзывания). Это явление обуславливает единственный пик прерывистого режима или пик "прилипания" (статического трения). На протяжении скольжения молекулы обратно переупорядочиваются в стационарную конфигурацию за время плавления τ_s , которое не обязательно совпадает с τ_0 . Установлено, что чем больше скорость скольжения, тем более жидкоподобнее или "нетвердоподобнее" становится пленка, и тем большее последующее время требуется ей для того, чтобы снова затвердеть.

Согласно [8], модель фазовых переходов подтверждается также тем обстоятельством, что молекулы пленки достигают полного жидкоподобного состояния с максимальным беспорядком, когда скорость скольжения V или температура T превышают некоторое наибольшее значение. Таким образом, любое дальнейшее увеличение V или T не может больше увеличить беспорядок в пленке при заданном значении нагрузки. Поскольку время затвердевания τ_0 определяется состоянием пленки в момент прекращения скольжения, указанное дает ответ на вопрос: почему τ_0 становится независимым от V и T при превышении ими некоторых критических значений. Эти верхние критические величины должны отличаться от значений V_c и T_c , которые отвечают исчезновению прерывистого режима. Обе они больше, чем V_c и T_c , и их можно считать скоростями и температурами, при которых параметр порядка или фактор Дебая–Валлера сдвигаемой пленки [79] достиг наименьшего значения и больше не изменяется с дальнейшим увеличением V или T [8].

1.1.5. Новая карта и теоретические подходы для описания граничного режима трения

На рис. 1.5 приведена кривая Страйбека, которая широко используется в трибологии для представления известных режимов трения для тонких слоев сма-

зок. На этой кривой сила трения F представлена как функция аргумента $A\eta_b V/h$, где A — площадь контакта; η_b — объемная вязкость смазочного материала; h — толщина смазки. По традиционной схеме сплошная кривая на рисунке показыва-

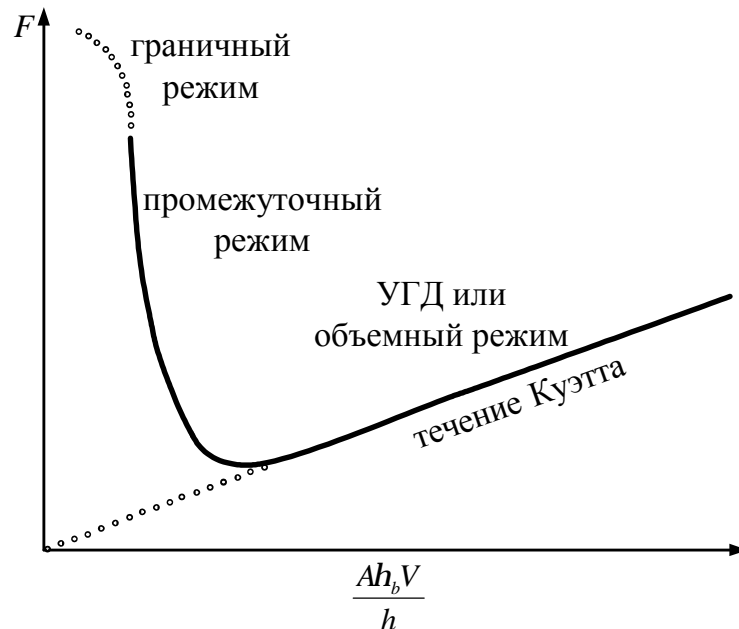


Рис. 1.5. Традиционная кривая Страйбека, на которой сплошная линия показывает как сила трения смазочного материала зависит от экспериментальных параметров (УГД — упруго-гидродинамический режим) [9]

ет силу трения F , причем возникающие механические напряжения определяются стандартным образом $\sigma = F/A$, а скорость сдвиговой деформации — $\dot{\epsilon} \equiv V/h$. Для тонких слоев, поведение которых отличается от объемных смазок, сила трения дается классическим уравнением для течения Куэтта:

$$F = AV\eta_b/h = A\eta_b\dot{\epsilon}, \quad \sigma = F/A = V\eta_b/h = \eta_b\dot{\epsilon}. \quad (1.2)$$

Диаграмму на рис. 1.5 можно объяснить следующим образом. При нулевой скорости $V = 0$ (начало координат) имеем контакт твердых тел, и реализуется статическое трение. С повышением скорости оно заменяется сухим (граничным) трением. При дальнейшем возрастании V в зазор между поверхностями трения наносится смазочный материал, и возникает трение поверхностей, обработанных смазкой. Когда и смазочный материал и контакт твердых тел участвуют в трении,

такой вид трения называется "смешанным трением". При еще большем увеличении скорости происходит увеличение количества смазки, помещенной в зазор, и уменьшение вклада контакта поверхностей за счет увеличения поддерживающего гидродинамического давления. Сила трения при этом падает, и поверхности становятся "подвешенными". Точка с минимальным коэффициентом трения (граничная точка) отвечает переходу между смешанным трением и жидкостным (гидродинамическое трение), т.е. контакт твердых тел исчезает, и происходит полное разделение поверхностей смазочным материалом.

Сила трения, возрастающая после прохождения граничной точки, относится к вязкому трению. Она возрастает вместе со скоростью. Потери на трение также обусловлены вязким трением, приводящим к повышению температуры составляющих частей. Вязкость уменьшается при повышении температуры. С другой стороны, вязкое трение уменьшается при снижении вязкости, так что постоянное воздействие приводит к снижению коэффициента трения (на рисунке 1.5 этот участок не показан). После непрерывной работы трущихся поверхностей в течение длительного времени установится тепловой баланс между выделением тепла за счет трения и тепловыми потерями составляющих элементов (теплопроводность поверхности материала и конвективная теплопередача смазочного материала), поэтому возникает постоянный коэффициент трения.

Граничный режим трения (который далее рассматривается в данной работе) приводит к множеству эффектов (см. предыдущие пункты), однако они никак не отображены на диаграмме Страйбека (рис. 1.5). Поэтому для учета перечисленных эффектов была предложена новая карта трения [9], согласующаяся с имеющимися экспериментальными данными [7, 8, 89–100]. Эта карта, показанная на рис. 1.6, представляет обобщенную диаграмму Страйбека¹. С увеличением нагрузки L ньютоновское течение вязкой жидкости в УГД режиме переходит в граничный режим. При больших нагрузках L и малых толщинах h смазки сила трения имеет

¹Здесь эффективная вязкость $\eta_{eff} = Fh/AV$ не совпадает с объемной и может быть найдена только экспериментально, причем она уже не является константой, а зависит от скорости сдвиговой деформации $\dot{\epsilon}$.

максимум (статическое трение F_s). Если теперь повысить скорость, установится прерывистый (stick—slip) режим, а дальнейшее возрастание V приведет к постоянному значению коэффициента трения μ , не зависящему от величины скорости, и, соответственно, постоянной кинетической силе трения F_k .

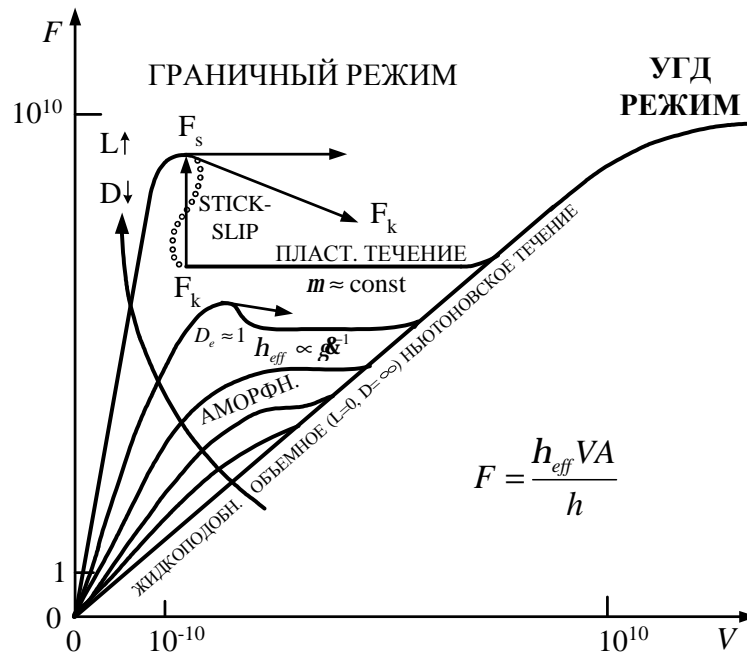


Рис. 1.6. Новая карта трения, раскрывающая особенности граничного режима [9]

Неньютоновское сдвиговое утончение наблюдается при более малой нагрузке и большей толщине пленки смазки. Сила трения проходит через максимум в точке, где число Дебора $\mathcal{D}_e \sim 1$ (\mathcal{D}_e — отношение времени естественной релаксации граничного слоя смазки ко времени проскальзывания при прерывистом режиме [8, 112]). При малых скоростях движение может быть ньютоновским даже для больших значений приложенной нагрузки, но только при очень больших величинах эффективной вязкости η_{eff} . Скорость скольжения V измерена в произвольных единицах и значения 10^{-10} , 10^{10} условно показывают большой диапазон.

Для объяснения результатов экспериментов в основном используется феноменологическая концепция фазового перехода пленки смазки из жидкоподобного в твердоподобное состояние и наоборот. Следует отметить, что это фазовое превращение в отличие от обычного перехода жидкость — твердое тело может быть как первого, так и второго рода. Последний вариант связан с тем, что он происходит

в условиях, когда симметрия обоих состояний пленки существенно изменена, во-первых, наличием ограничивающих твердых тел и, во-вторых, наличием упругой деформации [6, 113].

Описанию прерывистого движения посвящен ряд теоретических работ. В одной из первых представлено феноменологическое материальное уравнение, связывающее силы трения со скоростью, координатами и переменной, играющей роль параметра порядка и отражающей степень плавления пленки [75]. Также существует подход [113], в котором фазовый переход пленки смазки рассматривается с точки зрения теории Ландау в предположении, что имеется состояние частичного термодинамического равновесия при медленно меняющемся параметре порядка, квадрат которого равен модулю сдвига.

Объяснить природу описанных в данном разделе аномальных особенностей граничного трения позволило, в частности, экспериментальное исследование реологических свойств пленки смазки [7, 8]. Кроме того, с этой целью использовалось теоретическое представление смазочного материала как вязкоупругой среды, обладающей теплопроводностью. Так, в работе [76] на основе уравнения Гинзбурга–Ландау, где параметр порядка определяет сдвиговое плавление [77] и затвердевание, описано экспериментально наблюдаемое поведение ультратонкой пленки смазки. Построена динамическая фазовая диаграмма, определяющая области жидкостного, прерывистого и сухого трения в координатах температура – толщина пленки. Фазовая динамика в случае адсорбированных молекул рассмотрена в работах [111, 114], в которых отмечено важное значение сдвигового плавления. С помощью исследования временных рядов силы трения представлена связь трения на макроуровне с образованием и разрушением молекулярных связей [84].

Известно, что сдвиговая вязкость слоя смазки зависит от температуры [9, 115–117]. Следовательно, при выводе основных уравнений, описывающих процесс трения, необходимо определить явный вид температурной зависимости вязкости. В действительности, в конкретных системах она имеет различный вид. Как показывают экспериментальные результаты, эта функция обычно подчиняется ли-

бо соотношению Фогеля—Фулчера, либо степенной зависимости [9, 115—117]. В частности, эмпирическая формула Фогеля—Фулчера объясняется в рамках теорий свободного объема и избыточной конфигурационной энтропии [115, 117]. Эти две идеи реализуются в микроскопической модели Изинга—Накано. Введение зависящего от температуры эффективного поля позволяет учесть сохранение полного свободного объема при определенных внешних условиях. В свою очередь, при наличии замороженного беспорядка межатомных связей стеклование представляется как реологический переход.

Исследование влияния шума на процесс трения имеет очевидное фундаментальное и практическое значение, поскольку в конкретных экспериментальных ситуациях флуктуации изменяют фрикционное поведение критическим образом, например, обеспечивая условия для уменьшения трения [4, 81, 83, 118]. В частности, тепловой шум, проявляющийся в любых экспериментах, может переводить ультратонкую пленку смазки из устойчивого твердоподобного состояния в жидкоподобное и, таким образом, преобразовывать сухое трение в жидкостное или прерывистый (*stick—slip*) режим. Поэтому в последнее время значительное внимание уделялось изучению влияния шума и случайных примесей в граничной области на статическое и динамическое трение [81, 119, 120]. Эти исследования показали, что периодические поверхности характеризуются меньшим коэффициентом трения в процессе скольжения, чем непериодические.

1.2. Методы и теории интенсивной пластической деформации

Одним из перспективных способов получения мелкозернистых материалов с размером зерна менее 100 нм является интенсивная пластическая деформация (ИПД) [121—124]. При больших величинах деформаций в образцах (как правило металлических) формируется фрагментированная структура, которая сохраняет остаточные признаки аморфного состояния.

Существует несколько методов ИПД: винтовая экструзия, кручение под

квазигидростатическим давлением, равноканальное угловое прессование, прокатка, всесторонняя ковка и т.д. Особенности винтовой экструзии посвящен обзор [125]. Во всех этих способах фрагментируемый образец подвергается многократной ИПД. Использование методов ИПД позволяет получить массивные образцы с практически беспористой структурой материала, что не удастся другими способами получения наноструктурированных объемных материалов.

В процессе ИПД в материале образуется множество различных дефектных структур, которые эволюционируют в ходе деформации. Основная особенность материалов, сформированных при ИПД — наличие неравновесных границ зерен, служащих источником больших упругих напряжений [107]. Следует отметить, что границы зерен содержат большое количество дислокаций. Причем плотность дислокаций внутри зерен гораздо меньше, чем на их границах. Дислокации создают дальнедействующие поля напряжений, и являются причиной избыточной энергии границ зерен. Релаксации напряжений и установления равновесного состояния границ зерен можно добиться с помощью отжига деформированного материала.

Свойства фрагментированных образцов сильно отличаются от свойств поликристаллов [126]. Согласно соотношениям Холла—Петча [127]

$$\sigma_y = \sigma_0 + k_y R^{-1/2}, \quad H_v = H_0 + k R^{-1/2}, \quad (1.3)$$

где σ_0 — внутреннее напряжение, препятствующее движению дислокаций;

k_y, k, H_0 — постоянные;

R — радиус зерен, размер зерна оказывает сильное влияние на предел текучести σ_y и твердость H_v материалов.

Однако если деформация осуществляется диффузионным скольжением, то при небольшой температуре T/T_m (T_m — температура плавления) скорость деформации $\dot{\epsilon}$ можно определить выражением [126]

$$\dot{\epsilon} = \frac{B\sigma\Omega\delta D}{8k_B T R^3}, \quad (1.4)$$

где B — коэффициент пропорциональности;

σ — приложенное напряжение;

Ω — атомный объем;

δ — толщина границы зерна;

D — коэффициент зернограницной диффузии;

k_B — постоянная Больцмана.

Соотношения Холла—Петча (1.3) предсказывают упрочнение материала при уменьшении радиуса зерен R . Однако согласно (1.4), при нанометровом размере зерен диффузионное скольжение становится существенным даже при комнатных температурах, и при этом растет скорость деформации. Коэффициент зернограницной диффузии D также может возрастать с уменьшением размеров зерен. Таким образом, влияние размера зерен на прочностные свойства НК материалов неоднозначно. В результате ИПД твердость материала может как увеличиваться [128], так и уменьшаться [129]. Характер изменения свойств при фрагментации сильно зависит от свойств используемого материала. Так, в [129] исследовались сплавы, и падение прочностных характеристик с увеличением степени фрагментации было объяснено структурными изменениями в твердых растворах. С другой стороны, показано [130], что деформационное упрочнение определяется контактным взаимодействием дислокаций и эволюцией их плотности с деформацией.

Процесс ИПД сложный и многоуровневый. По этой причине теоретическое описание ИПД является чрезвычайно сложной задачей, и необходимо приветствовать все попытки в этом направлении [131]. Проблема состоит в разумном выборе основных параметров задачи и в обоснованном пренебрежении практически бесконечной совокупностью других параметров. Фактически, в процессе ИПД между собой взаимодействуют множество дефектных подсистем, однако главным решающим дефектом разумно положить самый крупный из них, каковым является граница зерна. По сути, процесс фрагментации зерен сводится к продуцированию новых границ и, как следствие, к измельчению зерна. Данный процесс не является прямым превращением работы внешних сил в энергию границ зерен, а протекает как через промежуточные этапы через формирование иерархии дефектных подструктур, и влияние этой цепочки можно учесть коэффициентами теории.

В связи с тем, что процессы, происходящие при ИПД, довольно сложны и начали исследоваться недавно, в настоящее время не существует содержательной теории, которая позволяет описать их полностью. Исследованием ИПД занимаются в основном экспериментаторы, что также говорит об отсутствии достаточного теоретического уровня описания. Существующая теория [131], которая базируется на обобщении экспериментальных данных, не может объяснить причину формирования предельного состояния, когда при последующих циклах ИПД зерна перестают измельчаться [125]. Чтобы описать этот процесс искусственно вводится некоторый притягивающий аттрактор. Не получило объяснения наличие в структуре зерен двух резко отличающихся размеров [107]. Кроме того, в теории отсутствует температурный аспект задачи, в силу чего "за бортом" оказались такие важные варианты проблемы как низкотемпературное равноканальное угловое прессование [132], низкотемпературная квазигидроэкструзия [133] и т.д. В связи с этим разработана термодинамическая теория [17], которая позволяет качественно описать указанные эффекты, исходя из многомерного термодинамического потенциала (подраздел 4.1).

В работе [134] синергетический подход используется для описания нелинейной динамики дислокаций и пластичности кристаллов. Отмечается, что вывод реакционно-диффузионных уравнений, определяющих эволюцию дефектов, основан на феноменологических и эвристических соображениях. Кроме того, построение подходов, которые позволяют получить связь макроскопической кинетики дислокационного ансамбля с микроуровнем, сталкивается с трудностями учета многих факторов микроструктурного строения и статистического усреднения. Указаны экспериментальные данные, которые свидетельствуют о фрактальности и самоподобии пространственно упорядоченной системы линий скольжения, возникающей в результате пластической деформации. Принципиально важно, что описание этого факта не представляется возможным без учета устойчивых неоднородных флуктуаций плотности дислокаций и статистически случайного характера формирования фрагментов. Вместе с этим, обращается внимание на необходимость рассмо-

трения механизмов образования под действием внешних напряжений дислокационных структур, вызывающих фрагментацию решетки. Показано, что самоорганизация дислокаций в процессе ИПД отражается также в постоянстве произведения средних углов разориентации на средний размер фрагментов или ячеек дефектных структур [135].

1.3. Выводы

Анализ литературных источников позволяет сделать следующие выводы.

1. Для описания эффектов, реализующихся при граничном трении, используется широкий спектр моделей, которые строятся на основе различных принципов. В настоящее время не существует подхода, который описывал бы все наблюдаемые особенности поведения. Построение микроскопической теории, следующей из первых принципов, затруднено многофакторностью процесса граничного трения. Поэтому необходимо построить феноменологическую модель, которая позволяет описать экспериментально обнаруженные эффекты: сдвиговое и термодинамическое плавление, эффекты памяти, гистерезисные явления при плавлении, непрерывное и скачкообразное плавление и т.д.

2. Несмотря на большое прикладное значение процесс ИПД недостаточно изучен теоретически. Любая новая теория этого процесса представляется полезной для выявления его закономерностей. До настоящего времени не проведен анализ влияния шума на процесс ИПД и не описано образование фрактальных зернистых структур, которые экспериментально наблюдаются.

3. Актуальность данного исследования обусловлена тем, что при рассмотрении граничного трения намечены способы снижения трения, позволяющие увеличить срок эксплуатации трущихся деталей. Исследование влияния шума на процесс ИПД позволяет определить режимы, при которых формируются материалы с несколькими предельными зернистыми структурами, обладающие заданными свойствами. Они могут быть использованы при решении конкретных техниче-

ских задач. Прикладная ценность полученных результатов обусловлена широким использованием исследуемых систем в современной технике. С фундаментальной точки зрения диссертационная работа имеет также определенное значение, поскольку позволяет продвинуться в понимании физики трения и ИПД.

РАЗДЕЛ 2

СИНЕРГЕТИЧЕСКАЯ ТЕОРИЯ ПЛАВЛЕНИЯ УЛЬТРАТОНКОЙ ПЛЕНКИ СМАЗКИ

2.1. Основные уравнения

Основой предлагаемого в этом разделе подхода является синергетическая концепция фазового перехода [1, 33, 34], которая представляет обобщение феноменологической теории Ландау. Согласно последней, фазовое превращение описывается параметром порядка ϕ , по степеням которого проводится разложение свободной энергии F [110]. Равновесное значение ϕ определяется условием:

$$\partial F / \partial \phi = h, \quad (2.1)$$

где h — внешнее поле;

F — свободная энергия при $h = 0$.

Процесс релаксации к равновесию описывается уравнением [136]:

$$\dot{\phi} = -\frac{1}{\eta} \left(\frac{\partial F}{\partial \phi} - h \right). \quad (2.2)$$

Здесь η — кинетический коэффициент, который можно рассматривать как обобщенную вязкость. При величине ϕ близкой к равновесному значению $\phi_0 = 0$, используется линейное приближение $\partial F / \partial \phi \approx \phi / \chi$, где $\chi \equiv \partial \phi / \partial h = (\partial^2 F / \partial \phi^2)^{-1}$ — восприимчивость. В результате релаксационное уравнение (2.2) принимает линейный вид

$$\tau \dot{\phi} = -\phi + \chi h, \quad (2.3)$$

где

$$\tau = \chi \eta \quad (2.4)$$

представляет время релаксации.

Выражения (2.3), (2.4) использовались Ландау и Халатниковым для исследования аномального поглощения звука вблизи точки фазового перехода второго рода [137]. Они предположили, что здесь восприимчивость расходится $\chi \rightarrow \infty$,

а вязкость η практически не зависит от температуры T . В их теории аномально большая величина τ отвечает процессу замораживания.

Для вязкоупругой среды модуль сдвига G играет роль обратной восприимчивости. В случаях вязкоупругого перехода и перехода типа смещения (например, мартенситного) модуль G стремится к нулю вблизи точки перехода, и время релаксации расходится [138, 139]. В некоторых работах, см. например [116], используется тот факт, что обобщенная восприимчивость фактически не зависит от температуры, а вязкость сильно возрастает при температуре стеклования. Таким образом, аномально большое значение восприимчивости типично для фазового перехода, и аномально большое значение кинетического коэффициента (вязкости) свойственно стеклованию.

Согласно приведенным в предыдущем подразделе данным, смазка представляет очень вязкую жидкость, которая ведет себя подобно аморфному твердому телу — имеет большую эффективную вязкость и характеризуется пределом текучести [8, 140, 141]. Исходя из этого, получим на основе реологического описания вязкоупругой среды, обладающей теплопроводностью, систему кинетических уравнений, которые определяют взаимно согласованное поведение сдвиговых напряжений σ и деформации ε , а также температуры T в ультратонкой пленке смазки в процессе трения между атомарно—гладкими слюдяными поверхностями [35, 36, 38, 39, 55]. Основное предположение используемого подхода состоит в том, что релаксационное уравнение для σ имеет вид, подобный по математической структуре уравнению Ландау—Халатникова (2.3)

$$\tau_\sigma \dot{\sigma} = -\sigma + G\varepsilon. \quad (2.5)$$

Здесь первое слагаемое в правой части описывает дебаевскую релаксацию в течение времени $\tau_\sigma \equiv \eta_\sigma/G$, определяемого значениями эффективной вязкости η_σ и нерелаксированного модуля сдвига $G \equiv G(\omega)|_{\omega \rightarrow \infty}$. Путем замены ε/τ_σ на $d\varepsilon/dt$ кинетическое уравнение (2.5) сводится к соотношению типа Максвелла для описания вязкоупругой среды, широко используемому в теории граничного трения [4, 142]. В

стационарном случае $\dot{\sigma} = 0$ (2.5) приводит к закону Гука $\sigma = G\varepsilon$.

Релаксационное поведение вязкоупругой смазки в процессе трения описывается также уравнением Кельвина–Фойгта [140, 141]

$$\dot{\varepsilon} = -\varepsilon/\tau_\varepsilon + \sigma/\eta, \quad (2.6)$$

где τ_ε — время релаксации деформации;

η — сдвиговая вязкость.

Второе слагаемое в правой части описывает течение вязкой жидкости под действием сдвиговой компоненты напряжений. В стационарном случае $\dot{\varepsilon} = 0$ получаем выражение, подобное закону Гука $\sigma = G_\varepsilon\varepsilon$, где $G_\varepsilon \equiv \eta/\tau_\varepsilon \equiv G(\omega)|_{\omega \rightarrow 0}$ — релаксированное значение модуля сдвига. Поскольку формально уравнение (2.5) не сводится к уравнению Кельвина–Фойгта (2.6) [140–142], в работе предполагается, что эффективная вязкость $\eta_\sigma \equiv \tau_\sigma G$ не совпадает с действительной η . Кроме того, примем простейшие приближения для температурных зависимостей: $G_\varepsilon(T)$, $G(T)$, $\eta_\sigma(T) = \text{const}$,

$$\eta = \frac{\eta_0}{T/T_c - 1}, \quad (2.7)$$

где η_0 — характерное значение вязкости η при $T = 2T_c$. Это обусловлено тем, что величины G_ε , G , η_σ зависят от температуры очень слабо, в то время как действительная вязкость η расходится при уменьшении температуры до критического значения T_c [115, 116]. Совместно уравнения (2.5) – (2.7) представляют новую реологическую модель, поскольку они сводятся к дифференциальному уравнению второго порядка относительно напряжения σ или деформации ε (см. подпункт 2.5.1.3). Следует отметить, что реологические свойства пленок смазки исследуются экспериментально, что позволяет построить фазовую диаграмму [7, 8].

Согласно синергетической концепции [1, 33, 34], для дополнения системы уравнений (2.5), (2.6), которые содержат параметр порядка σ , сопряженное поле ε и управляющий параметр T , необходимо получить кинетическое уравнение для температуры. Его можно вывести, используя основные соотношения теории упругости [142]. Будем исходить из выражения, связывающего производные по времени

от энтропии S и внутренней энергии U с равновесным упругим напряжением σ_{el}

$$T \frac{dS}{dt} = \frac{dU}{dt} - \sigma_{el} \frac{d\varepsilon}{dt} \quad (2.8)$$

(в равновесии изменение количества тепла $\delta Q = T\delta S$). В неравновесном случае неоднородного нагрева среды эта связь принимает вид:

$$-\operatorname{div} \mathbf{q} = \frac{dU}{dt} - \sigma \frac{d\varepsilon}{dt}. \quad (2.9)$$

Здесь поток тепла дается соотношением Онзагера

$$\mathbf{q} = -\kappa \nabla T, \quad (2.10)$$

где κ — коэффициент теплопроводности, и полное напряжение $\sigma = \sigma_{el} + \sigma_v$ включает также вязкую составляющую σ_v . Вычитая (2.9) из (2.8), учитывая выражение

$$\frac{dS}{dt} = \frac{\partial S}{\partial U} \left(\frac{\partial U}{\partial t} \right)_\varepsilon \frac{dT}{dt} + \frac{\partial S}{\partial U} \frac{\partial U}{\partial \varepsilon} \frac{d\varepsilon}{dt} + \left(\frac{\partial S}{\partial \varepsilon} \right)_U \frac{d\varepsilon}{dt} = \frac{\rho c_v}{T} \frac{dT}{dt} + \frac{1}{T} \frac{\partial U}{\partial \varepsilon} \frac{d\varepsilon}{dt} - \frac{\sigma_{el}}{T} \frac{d\varepsilon}{dt} \quad (2.11)$$

и предполагая, что слой смазки и атомарно-гладкие поверхности слюды имеют различные температуры T и T_e соответственно, получаем:

$$\rho c_v \dot{T} = \frac{\kappa}{l^2} (T_e - T) + \sigma_v \dot{\varepsilon} + T \frac{\partial \sigma_{el}}{\partial T} \dot{\varepsilon}. \quad (2.12)$$

Здесь ρ — плотность смазки;

c_v — удельная теплоемкость;

l — масштаб теплопроводности, и использованы равенства $(\kappa/l^2)(T_e - T) \approx -\operatorname{div} \mathbf{q}$ и $\partial U / \partial \varepsilon = \sigma_{el} - T \partial \sigma_{el} / \partial T$.

Первое слагаемое в правой части (2.12) описывает передачу тепла от слоя смазки к поверхностям трения. Второе слагаемое учитывает диссипативный разогрев вязкой жидкости, текущей под действием напряжений [143–146]. Третье слагаемое представляет источник тепла, обусловленный обратимым механокалорическим эффектом, для которого в линейном приближении $T(\partial \sigma_{el} / \partial T) \dot{\varepsilon} \approx \sigma_{el} \dot{\varepsilon}$. В результате уравнение теплопроводности принимает вид

$$\rho c_v \dot{T} = \frac{\kappa}{l^2} (T_e - T) + \sigma \dot{\varepsilon}. \quad (2.13)$$

Введем единицы измерения

$$\sigma_s = \left(\frac{\rho c_v \eta_0 T_c}{\tau_T} \right)^{1/2}, \quad \varepsilon_s = \frac{\sigma_s}{G_0} \equiv \left(\frac{\tau_\varepsilon}{\tau_T} \right)^{1/2} \left(\frac{\rho c_v T_c \tau_\varepsilon}{\eta_0} \right)^{1/2}, \quad T_c \quad (2.14)$$

для переменных σ, ε, T соответственно ($G_0 = \eta_0/\tau_\varepsilon$, $\tau_T \equiv \rho l^2 c_v/\kappa$ — время теплопроводности). Тогда после подстановки в (2.13) производной $\dot{\varepsilon}$, выраженной по формуле (2.6), основные уравнения (2.5), (2.6), (2.13) принимают вид:

$$\tau_\sigma \dot{\sigma} = -\sigma + g\varepsilon, \quad (2.15)$$

$$\tau_\varepsilon \dot{\varepsilon} = -\varepsilon + (T - 1)\sigma, \quad (2.16)$$

$$\tau_T \dot{T} = (T_e - T) - \sigma\varepsilon + \sigma^2, \quad (2.17)$$

где введена константа $g = G/G_0$. Уравнения (2.15) – (2.17) формально совпадают с синергетической системой Лоренца [1, 33, 34], которая используется для описания как фазовых термодинамических, так и кинетических превращений.

2.2. Условия перехода

Согласно экспериментальным данным для органических смазочных материалов [7, 8], время релаксации напряжений при нормальном давлении составляет $\tau_\sigma \sim 10^{-10}$ с и возрастает на несколько порядков при высоких давлениях, принимая макроскопические значения. Релаксация сдвиговой деформации происходит за микроскопическое время $\tau_\varepsilon \approx a/c \sim 10^{-12}$ с, где $a \sim 1$ нм — постоянная решетки или межмолекулярное расстояние и $c \sim 10^3$ м/с — скорость звука. Поскольку ультратонкая пленка смазки имеет менее четырех молекулярных слоев, температура релаксирует к значению T_e в течение времени, удовлетворяющего условию $\tau_T \ll \tau_\sigma$. Поэтому для анализа системы (2.15) – (2.17) воспользуемся адиабатическим приближением, в рамках которого характерные временные масштабы удовлетворяют неравенствам:

$$\tau_\varepsilon \ll \tau_\sigma, \quad \tau_T \ll \tau_\sigma. \quad (2.18)$$

Они означают, что в процессе эволюции деформация $\varepsilon(t)$ и температура $T(t)$ следуют изменению напряжений $\sigma(t)$. Используя определения температуропроводности $\chi \equiv \kappa/c_v$, эффективной кинематической вязкости $\nu_\sigma \equiv \eta_\sigma/\rho$ и скорости звука $c \equiv (G/\rho)^{1/2}$, второе условие (2.18) удобно записать в виде:

$$l \ll L, \quad (2.19)$$

согласно которому характерная длина теплопроводности не должна превышать значение

$$L = \sqrt{\frac{\chi\nu_\sigma}{\rho c^2}}. \quad (2.20)$$

Тогда левые части уравнений (2.16), (2.17) можно приравнять к нулю. В результате зависимости деформации ε и температуры T от напряжений σ принимают вид:

$$\varepsilon = \sigma - (2 - T_e) \frac{\sigma}{1 + \sigma^2}, \quad (2.21)$$

$$T = T_e + (2 - T_e) \frac{\sigma^2}{1 + \sigma^2}. \quad (2.22)$$

Согласно (2.21), при $T_e < 1$ зависимость $\varepsilon(\sigma)$ имеет минимум в точке $\sigma = \sigma_+$, определяемой равенством

$$\sigma_\mp = \frac{1}{2} \left[(T_e - 4) \mp \sqrt{(T_e - 2)(T_e - 10)} \right]^{1/2}, \quad (2.23)$$

и затем монотонно возрастает². Если $T_e > 1$ деформация ε линейно увеличивается с напряжением σ в гуковской области $\sigma \ll 1$. При значениях T_e в интервале $(1, 10)$ функция $\varepsilon(\sigma)$ имеет монотонно возрастающий вид с минимумом в точке 0. В точке $T_e = 10$ появляется плато, которое при $T_e > 10$ трансформируется в максимум и минимум, отвечающие напряжениям σ_- и σ_+ соответственно. Согласно (2.22), при $T_e < 2$ с ростом напряжения σ температура T асимптотически возрастает от минимальной величины T_e при $\sigma = 0$ до значения $T = 2$, а при $T_e > 2$ управляющий параметр убывает от максимального значения T_e при $\sigma = 0$ до этой же асимптоты $T = 2$. Очевидно, что такое уменьшение обусловлено отрицательной обратной

²Спадающий участок функции $\varepsilon(\sigma)$ не имеет физического смысла

связью напряжений σ и деформации ε с температурой T в уравнении (2.17), которая является отражением принципа Ле–Шателье для рассматриваемой задачи. С другой стороны, положительная обратная связь напряжений σ и температуры T с деформацией ε в уравнении (2.16) обуславливает плавление, которое вызывает рост ε , связанный с неустойчивостью твердоподобной фазы. Однако, согласно (2.17), последнее приводит к уменьшению T вследствие процесса самоорганизации.

Указанная положительная обратная связь σ и T с ε означает, что переход смазки из твердоподобного в жидкоподобное состояние обусловлен как нагреванием, так и влиянием напряжений, создаваемых твердыми поверхностями при трении [39]. Это согласуется с рассмотрением неустойчивости твердой фазы в рамках представления сдвигового динамического плавления, индуцированного беспорядком, при отсутствии тепловых флуктуаций [76]. Если деформации сдвига отсутствуют, то тепловое среднеквадратическое отклонение молекул (атомов) определяется равенством

$$\langle u^2 \rangle = T/Ga. \quad (2.24)$$

Среднее значение смещения за счет сдвига находится из соотношения

$$\langle u^2 \rangle = \sigma^2 a^2 / G^2. \quad (2.25)$$

Таким образом, согласно предлагаемому подходу, рассматриваемый переход пленки смазки из твердоподобного в жидкоподобное состояние происходит благодаря термодинамическому и сдвиговому плавлению. Будем предполагать, что пленка смазки становится более жидкоподобной, и сила трения уменьшается с возрастанием температуры за счет уменьшения энергии активации скачков молекул.

Согласно (2.12), отрицательная обратная связь σ и ε с T в (2.17), обеспечивающая устойчивость системы, реализуется всегда в ходе процесса релаксации к стационарному состоянию при $\dot{\varepsilon} < 0$. Как показано в [33, 34], это условие удовлетворяется в адиабатическом пределе (2.18). Указанная обратная связь может быть также обусловлена механокалорическим эффектом, при котором выполняется не-

равенство $\partial\sigma_{el}/\partial T < 0$.

Подставляя (2.21) в (2.15), получаем уравнение типа Ландау–Халатникова:

$$\tau_\sigma \dot{\sigma} = -\partial V/\partial\sigma, \quad (2.26)$$

где синергетический потенциал имеет вид

$$V = \frac{1}{2}(1-g)\sigma^2 + g\left(1 - \frac{T_e}{2}\right)\ln(1 + \sigma^2). \quad (2.27)$$

В стационарном состоянии выполняется условие $\dot{\sigma} = 0$, и потенциал (2.27) принимает минимум. При температуре T_e меньше критического значения

$$T_{c0} = 1 + g^{-1}, \quad g \equiv G/G_0 < 1, \quad G_0 \equiv \eta_0/\tau_\varepsilon, \quad (2.28)$$

данный минимум соответствует напряжению $\sigma = 0$, при этом плавление не происходит, и реализуется твердоподобное состояние смазки (кривая 1 на рис. 2.1а).

В противном случае $T_e > T_{c0}$ стационарное значение напряжения отлично от нуля (кривая 2)

$$\sigma_0 = \left(\frac{gT_e - (g+1)}{1-g} \right)^{1/2} \quad (2.29)$$

и возрастает с T_e согласно корневой зависимости (рис. 2.1б). Это приводит к плавлению смазки и ее переходу в жидкоподобное состояние. Выражения (2.21), (2.22) дают соответствующие стационарные значения деформации и температуры:

$$\varepsilon_0 = \sigma_0/g, \quad T_0 = 1 + g^{-1}. \quad (2.30)$$

Следует отметить, что, с одной стороны, величина температуры плавления T_0 совпадает с критическим значением (2.28) и, с другой стороны, она отличается от температуры T_e . Это имеет место благодаря тому, что в стационарном состоянии реализуется первое равенство (2.30) вместо связи $\sigma_0 = \varepsilon_0$. Поскольку T_{c0} представляет минимальное значение температуры, при которой начинается переход из твердоподобного в жидкоподобное состояние, указанное означает, что отрицательная обратная связь сдвиговых напряжений σ и деформации ε с температурой T (см. третье слагаемое в правой части уравнения (2.17)) уменьшает температуру смазки настолько, что процесс самоорганизации обеспечивается только на пределе. В

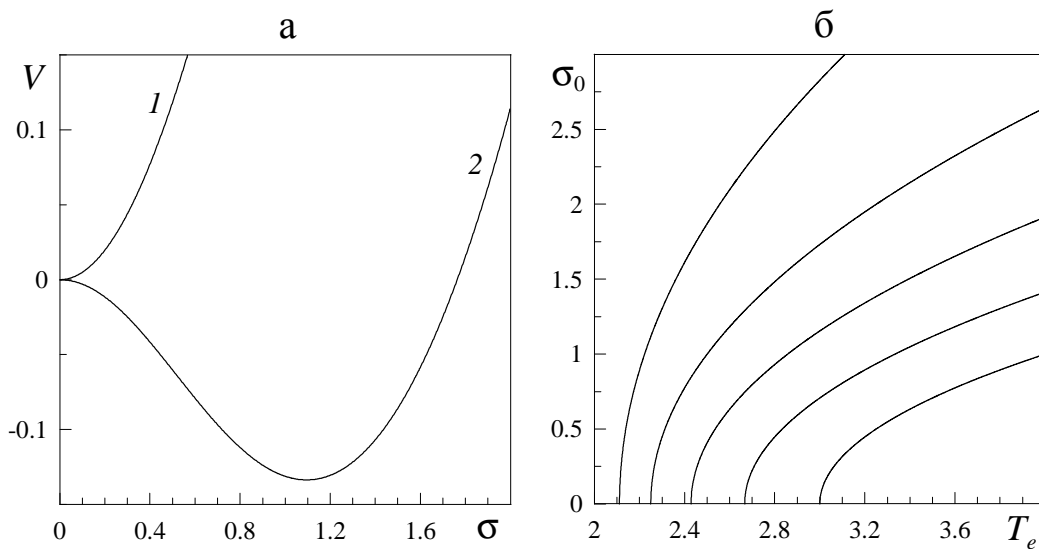


Рис. 2.1. Зависимость синергетического потенциала (2.27) от напряжения для фазового перехода второго рода (а) при $g = 0.5$ (кривая 1 отвечает $T_e = 1 \leq T_{c0}$, кривая 2 — $T_e = 4.2 > T_{c0}$) и зависимость стационарных значений сдвиговых напряжений σ_0 от температуры T_e (2.29) (б). Кривые отвечают значениям $g = 0.5, 0.6, 0.7, 0.8, 0.9$ и расположены справа налево

стационарном состоянии вязкость при плавлении принимает значение

$$\eta_m = \eta_0 g. \quad (2.31)$$

Возможны две противоположные ситуации в зависимости от величины параметра $g = G/G_0$. В случае $g \gg 1$, при котором характерная вязкость η_0 имеет малое значение, выражения (2.28) – (2.30) принимают вид:

$$\sigma_0 = (1 - T_e)^{1/2}, \quad T_0 = T_{c0} = 1. \quad (2.32)$$

Такая ситуация соответствует пределу очень вязкой жидкости. В противоположном случае $g \ll 1$, отвечающем большому значению η_0 , вместо (2.32), имеем предел твердоподобного (замерзшего) состояния

$$\sigma_0 = (gT_e - 1)^{1/2}, \quad T_0 = T_{c0} = g^{-1} \equiv \eta_0/\tau_\varepsilon G. \quad (2.33)$$

Твердоподобное состояние смазки соответствует сдвиговым напряжениям $\sigma = 0$, поскольку уравнение (2.15) выпадает из рассмотрения. Уравнение (2.16), содержащее вязкие напряжения, сводится к закону Дебая, описывающему быструю релаксацию сдвиговой деформации в течение микроскопического времени $\tau_\varepsilon \sim 10^{-12}$ с. При этом уравнение теплопроводности (2.17) принимает вид простейшего выражения для релаксации температуры, которое не содержит слагаемых, представляющих диссипативный разогрев и механокалорический эффект вязкой жидкости.

Согласно уравнению (2.16), появление вязких напряжений σ_v приводит к пластическому течению жидкоподобной смазки со скоростью $V = h\partial\varepsilon/\partial t$ (h — толщина пленки) [39]. В частности, в случае аппарата поверхностных сил [89, 147, 148] в уравнениях (2.15) – (2.17) эффективная амплитуда деформации $\varepsilon = x_{max}/h$ определяется как отношение амплитуды деформации (отклонения) x_{max} к h . Эффективная скорость сдвига

$$\dot{\varepsilon} = \varepsilon\omega = V/h = \varepsilon/\tau_\sigma \quad (2.34)$$

представляет произведение деформации ε на частоту колебаний ω . Отметим, что в нашей задаче под ε следует понимать сумму упругой и вязкой компонент сдвиговой деформации.

В работах [113, 147] показано, что пластическое течение слоя смазки реализуется при наличии в нем упругих напряжений. При этом действие сдвиговых напряжений приводит к уменьшению модуля сдвига смазочного материала [149]. Согласно [9], для граничного режима трения с увеличением вязких напряжений

$$\sigma_v = F_v/A \quad (2.35)$$

растет вязкая сила трения:

$$F_v = \eta_{eff}VA/h, \quad (2.36)$$

где η_{eff} — эффективная вязкость;

A — площадь контакта.

Из сопоставления (2.35) и (2.36) получим выражение для скорости через напряжения:

$$V = \sigma_v h / \eta_{eff}. \quad (2.37)$$

Следовательно, с ростом напряжений полная сила трения уменьшается, так как возрастает относительная скорость движения сдвигаемых поверхностей (смазка плавится). Это согласуется с соотношением максвелловского типа между напряжениями и деформацией ε : $\partial\sigma/\partial t = -\sigma/\tau_\sigma + G\partial\varepsilon/\partial t$.

2.3. Описание пространственной неоднородности

Опишем неоднородное распределение сдвиговых напряжений σ и деформации ε , а также температуры T в смазке вдоль оси y перпендикулярной к поверхностям трения [37, 38] (согласно рис. 1.1, значение $y = 0$ соответствует движущейся границе)³. С этой целью предположим, что дивергенция вектора потока тепла $\mathbf{q} = -\kappa\nabla T$ равна $-\text{div}\mathbf{q} \approx (\kappa/l^2)(T_e - T) + \kappa\nabla^2 T$, где ∇ означает производную по y . Соответственно измеряя координату y в единицах l , уравнение (2.17) приобретает дополнительный член, описывающий неоднородное распределение температуры:

$$\tau_T \dot{T} = \nabla^2 T + (T_e - T) - \sigma\varepsilon + \sigma^2. \quad (2.38)$$

Воспользуемся синергетическим принципом иерархического соподчинения гидродинамических мод σ , ε , T (адиабатическим приближением) (2.18). Тогда левые части уравнений (2.16) и (2.38), содержащие малые времена релаксации, можно приравнять нулю, что обеспечивает возможность аналитического решения. Кроме того, в рамках одномодового приближения заменим оператор ∇^2 отношением $(l/L)^2$, где L — максимальная длина теплопроводности (2.20)⁴. В результате

³Следует отметить, что такое описание относится к случаю, когда граничный режим трения реализуется в пленках жидкостей большей тощины (до десяти молекулярных слоев), обладающих сферическими молекулами, например, ОМЦС.

⁴Последующее рассмотрение показывает, что величину l можно рассматривать как толщину пленки смазки.

деформация ε и температура T выражаются через напряжение σ :

$$\varepsilon = \sigma \left\{ 1 - \frac{2[1 - (l/L)^2] - T_e}{1 - (l/L)^2 + \sigma^2} \right\}, \quad (2.39)$$

$$T = T_e + \frac{T_e(l/L)^2 + (2 - T_e)\sigma^2}{1 - (l/L)^2 + \sigma^2}. \quad (2.40)$$

Подстановка выражения (2.39) в (2.15) при условии $\sigma^2 \ll 1 + (l/L)^2$ и обратный переход от $(l/L)^2$ к оператору ∇^2 дают в области $gT_e \approx 1$

$$\tau_\sigma \dot{\sigma} \approx -[1 + g(1 - T_e)]\sigma + (2g - 1)\sigma^3 + \nabla^2 \sigma - 2g\nabla^2 \sigma^3 + 2g\nabla^4 \sigma. \quad (2.41)$$

Тогда в рамках автомодельного приближения, в соответствии с которым каждая производная ∇ добавляет порядок малости, пренебрегая степенями σ больше третьего порядка, система (2.15), (2.16) и (2.38) сводится к уравнению Гинзбурга–Ландау–Халатникова:

$$\tau_\sigma \dot{\sigma} = \nabla^2 \sigma - \frac{\partial E}{\partial \sigma}, \quad (2.42)$$

вид которого определяется синергетическим потенциалом

$$E = [1 + g(1 - T_e)] \frac{\sigma^2}{2} + (1 - 2g) \frac{\sigma^4}{4}. \quad (2.43)$$

Если температура T_e меньше критического значения (2.28) с параметром $g \equiv G/G_0 < 1/2$ потенциал (2.43) имеет минимум, соответствующий напряжению $\sigma = 0$, т.е. твердоподобному состоянию смазки. В противоположном случае $T_e > T_{c0}$ ненулевое стационарное значение напряжения

$$\sigma_0 = \left(\frac{gT_e - (g + 1)}{1 - 2g} \right)^{1/2} \quad (2.44)$$

отвечает жидкоподобному состоянию. Согласно выражениям (2.39) и (2.40), при $(l/L) = 0$ соответствующие стационарные значения деформации и температуры равны:

$$\varepsilon_0 = \sigma_0 \left[\frac{T_e(1 - g) + g - 2}{g(T_e - 3)} \right], \quad T_0 = \frac{T_e - 2(g + 1)}{g(T_e - 3)}. \quad (2.45)$$

В стационарном состоянии $\dot{\sigma} = 0$ уравнение (2.42) имеет первый интеграл:

$$\frac{1}{2}(\nabla \sigma)^2 = E + |E_0|, \quad E_0 \equiv E(\sigma_0) \simeq -\frac{[gT_e - (g + 1)]^2}{4(1 - 2g)}. \quad (2.46)$$

Здесь учтено, что в "упорядоченной" фазе при выполнении условий $\sigma = \sigma_0$, $\nabla\sigma = 0$ постоянная интегрирования равна абсолютному значению энергии упорядочения E_0 . Эта величина также определяет плотность потенциала в области резкого изменения напряжения, и ее умножение на толщину смазочного слоя дает оценку по порядку энергии пленки [110].

Решение уравнения (2.42) в стационарном состоянии показывает, что распределение сдвиговых напряжений представляется формулой

$$\sigma = \sigma_0 \operatorname{th} \left(\frac{y_0 - y}{\xi} \right), \quad \xi^2 \equiv \frac{2}{gT_e - (g + 1)}, \quad (2.47)$$

где длина корреляции ξ расходится при критическом значении температуры поверхностей трения (2.28). Постоянная интегрирования $y_0 \gg \xi$ определяет ширину граничной области, в которой сдвиговое напряжение уменьшается от стационарного значения (2.44) до нуля. Подстановка величины (2.47), спадающей на корреляционном расстоянии ξ , в (2.39) дает подобную зависимость деформации ε от y . Подставляя распределение (2.47) в формулу (2.40), видим, что в переходной области температура монотонно увеличивается от значения

$$T = T_e + \frac{T_e(l/L)^2 + (2 - T_e)\sigma_0^2 \operatorname{th}^2(y_0/\xi)}{1 - (l/L)^2 + \sigma_0^2 \operatorname{th}^2(y_0/\xi)} \quad (2.48)$$

при $y = 0$ до максимальной величины $T = T_e/[1 - (l/L)^2]$ при $y = y_0$. Если параметр l равен толщине слоя смазки, то в области $y_0 < y < l$ сдвиговое напряжение изменяет знак и увеличивается по абсолютному значению, а температура уменьшается. Такой вид зависимости $T(y)$ означает, что вблизи границы $y = y_0$ смазка находится в более жидкоподобном состоянии. При этом формальный анализ соотношения (2.46) в точке $y = y_0$, соответствующей $\sigma = 0$, приводит к конечному градиенту сдвигового напряжения:

$$\nabla\sigma_0 = \frac{\sigma_0}{\xi} = \frac{gT_e - (g + 1)}{[2(1 - 2g)]^{1/2}}. \quad (2.49)$$

2.4. Гистерезисные явления при зависимости модуля сдвига от напряжений

2.4.1. Скачкообразное плавление

Уравнение Максвелла предполагает использование идеализированной модели Генки. Для зависимости напряжений от деформации $\sigma(\varepsilon)$ эта модель представляется законом Гука $\sigma = G\varepsilon$ при $\varepsilon < \varepsilon_m$ и константой $\sigma_m = G\varepsilon_m$ при $\varepsilon \geq \varepsilon_m$ (σ_m, ε_m — максимальные значения упругих сдвиговых напряжений и деформации, $\sigma > \sigma_m$ приводит к вязкому течению со скоростью деформации $\dot{\varepsilon} = (\sigma - \sigma_m)/\eta$). В действительности, простейшая кривая $\sigma(\varepsilon)$ обладает не одним, а двумя участками: первый, гуковский, имеет большой наклон, задаваемый модулем сдвига G , а за ним следует намного более пологий участок пластической деформации, наклон которого определяется коэффициентом упрочнения $\Theta < G$. Очевидно, представленная картина означает, что модуль сдвига смазки, входящий в уравнение (2.5), зависит от величины напряжений [113, 149]. Будем использовать простейшее приближение

$$G(\sigma) = \Theta + \frac{G - \Theta}{1 + (\sigma/\sigma_p)^\beta}, \quad (2.50)$$

описывающее представленный выше переход режима упругой деформации в пластический. Он происходит при характерном значении сдвигового напряжения σ_p , величина которого не превышает значение σ_s (в ином случае пластический режим не проявляется). В результате время релаксации τ_σ приобретает зависимость от величины напряжения

$$\frac{1}{\tau_\sigma(\sigma)} = \frac{1}{\tau_p} \left(1 + \frac{\theta^{-1} - 1}{1 + (\sigma/\sigma_p)^\beta} \right), \quad (2.51)$$

где введено время релаксации на участке пластического течения (ср. с (2.4))

$$\tau_p = \eta_\sigma / \Theta \quad (2.52)$$

и параметр

$$\theta = \Theta / G < 1, \quad (2.53)$$

определяющий отношение углов наклона кривой деформации на пластическом и гукковском участках. Следует отметить, что выражение типа (2.51) было предложено впервые Хакеном [1] для описания жесткого режима излучения лазера и использовалось ранее [34] для представления кинетики фазового перехода первого рода. Однако при этом (2.51) содержало квадрат отношения $\sigma/\sigma_p(\beta = 2)$, и получающаяся зависимость $V(\sigma)$ синергетического потенциала от параметра порядка имела четный характер. При описании структурных фазовых переходов жидкости характерно наличие инвариантов третьего порядка, которые нарушают указанную четность [110, 150]. Поэтому в приближении (2.51) при получении выражений (2.54)–(2.59) используется линейный член $\sigma/\sigma_p(\beta = 1)$ вместо квадратичного $(\sigma/\sigma_p)^2(\beta = 2)$. Видно, что следующая ниже зависимость (2.54) уже не является четной. Таким образом, нечетные значения β отвечают эксперименту, в котором скольжение блока во взаимно противоположных направлениях не эквивалентно с энергетической точки зрения.

В рамках адиабатического приближения (2.18) система уравнений Лоренца (2.15) – (2.17), где вместо τ_σ необходимо использовать зависимость $\tau_\sigma(\sigma)$, как и ранее, сводится к уравнению Ландау–Халатникова (2.26) с τ_p вместо τ_σ . Однако в синергетическом потенциале (2.27) коэффициент $g = G/G_0$ заменяется на параметр $g_\Theta = G^2/G_0\Theta < 1^5$, который предполагается не зависимым от σ , и появляется нечетное слагаемое, пропорциональное $\theta^{-1} - 1$:

$$V = \frac{1}{2}(1 - g_\Theta)\sigma^2 + g_\Theta \left(1 - \frac{T_e}{2}\right) \ln(1 + \sigma^2) + \alpha^2(\theta^{-1} - 1) \left(\frac{\sigma}{\alpha} - \ln \left|1 + \frac{\sigma}{\alpha}\right|\right). \quad (2.54)$$

Здесь введена константа $\alpha = \sigma_p/\sigma_s$. При малых значениях температуры T_e зависимость $V(\sigma)$ (2.54) имеет монотонно возрастающий вид с минимумом в точке $\sigma = 0$, который соответствует стационарному твердоподобному состоянию. Как видно из

⁵При $g_\Theta < 1$ согласуются формулы (2.27) и (2.54).

рис. 2.2, при значении

$$T_c^0 = 1 + (g_\Theta^{-1} - 1) \left(2\sqrt{p/3} \operatorname{ctg}(2\delta) + r/3 \right); \quad (2.55)$$

$$\operatorname{tg} \delta = \operatorname{tg}^{1/3}(\nu/2), \quad (|\delta| \leq \pi/4), \quad \operatorname{tg} \nu = \frac{2}{q} \sqrt{\left(\frac{p}{3}\right)^3}, \quad (|\nu| \leq \pi/2),$$

$$p = s - \frac{r^2}{3}, \quad q = \frac{2r^3}{3^3} - \frac{rs}{3} + t,$$

$$r = 3^3 \left(\frac{1}{3^2(1-g_\Theta)} + \frac{\alpha^2}{2^2} - \frac{\gamma^2}{2^2 \cdot 3^3} - \frac{\gamma\alpha}{2 \cdot 3} \right), \quad \gamma = \frac{\alpha(\theta^{-1} - g_\Theta)}{1 - g_\Theta},$$

$$s = 3^3 \left[\frac{1}{(1-g_\Theta)} \left(\frac{1}{3^2(1-g_\Theta)} + \frac{\alpha^2\theta^{-1}}{2} - \frac{\gamma^2}{2 \cdot 3^3} - \frac{\gamma\alpha\theta^{-1}}{2 \cdot 3} - \frac{\gamma\alpha}{2 \cdot 3} \right) + \frac{\gamma^3\alpha}{3^3} \right],$$

$$t = 3^3 \left[\frac{1}{(1-g_\Theta)^2} \left(\frac{1}{3^3(1-g_\Theta)} + \frac{\alpha^2\theta^{-2}}{2^2} - \frac{\gamma^2}{2^2 3^3} - \frac{\gamma\alpha\theta^{-1}}{2 \cdot 3} \right) + \frac{\gamma^3\alpha\theta^{-1}}{3^3(1-g_\Theta)} \right]$$

появляется плато, трансформирующееся при $T_e > T_c^0$ в минимум, отвечающий напряжению $\sigma_0 \neq 0$, и максимум σ^m , который отделяет минимумы в точках $\sigma = 0$ и $\sigma = \sigma_0$. С дальнейшим ростом температуры T_e минимум "упорядоченной" фазы, соответствующий жидкоподобному состоянию $\sigma = \sigma_0$, становится глубже, при этом высота межфазного барьера уменьшается, исчезая при критическом значении $T_{c0} = 1 + g^{-1}$ (2.28). Стационарные значения сдвиговых напряжений в жидкоподобном состоянии имеют вид (см. рис. 2.2 и 2.3):

$$\sigma_0 = 2\epsilon \cos\left(\frac{\varphi}{3}\right) - \frac{\gamma}{3}, \quad (2.56)$$

$$\sigma^m = 2\epsilon \cos\left(\frac{\varphi}{3} - \frac{2\pi}{3}\right) - \frac{\gamma}{3}; \quad (2.57)$$

$$\epsilon \equiv (-\psi/3)^{1/2}, \quad \cos \varphi \equiv -\omega/2\epsilon^3, \quad \psi = \zeta - \frac{\gamma^2}{3}, \quad \omega = \frac{2\gamma^3}{3^3} - \frac{\gamma\zeta}{3} + \xi,$$

$$\gamma = \frac{\alpha(\theta^{-1} - g_\Theta)}{1 - g_\Theta}, \quad \zeta = \frac{1 + g_\Theta(1 - T_e)}{1 - g_\Theta}, \quad \xi = \frac{\alpha[\theta^{-1} + g_\Theta(1 - T_e)]}{1 - g_\Theta}.$$

При $T_e \geq T_{c0}$ зависимость $V(\sigma)$ имеет тот же характер, что и при отсутствии дефекта модуля (см. кривую 4 на рис. 2.2).

Отмеченные особенности соответствуют положительным значениям сдвиговых напряжений σ . На отрицательной полуоси при $T_e > T_{c0}$ с увеличением $|\sigma|$ наблюдается очень слабый минимум зависимости $V(\sigma)$, который сопровождается

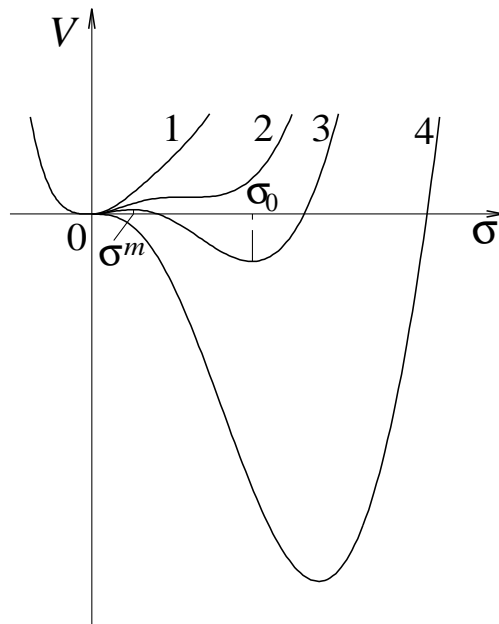


Рис. 2.2. Зависимость синергетического потенциала (2.54) от напряжения для фазового перехода первого рода при различных температурах: 1 — $T_e < T_c^0$; 2 — $T_e = T_c^0$; 3 — $T_c^0 < T_e < T_{c0}$; 4 — $T_e \geq T_{c0}$

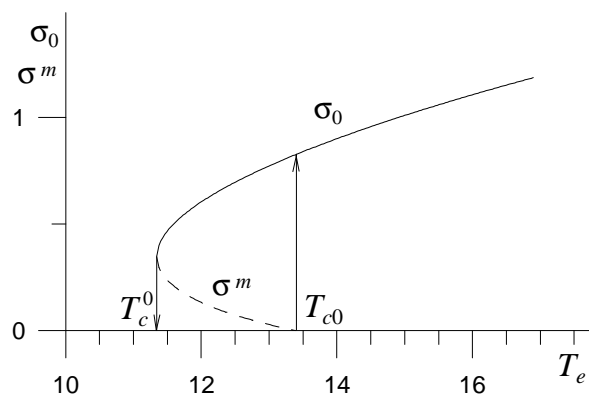


Рис. 2.3. Зависимость стационарных значений напряжений от температуры T_e при $g_{\Theta} = 0.2$, $\theta = 0.4$, $\alpha = 0.5$ (сплошная кривая соответствует устойчивому значению σ_0 , штриховая кривая — неустойчивому σ^m)

бесконечным увеличением потенциала V при $\sigma = -\sigma_p$. Таким образом, отрицательные значения полей σ , ε практически не реализуются.

Характерной особенностью нашего подхода является тот факт, что энергетический барьер, присущий синергетическому переходу первого рода — плавлению кристаллической смазки, наблюдается только при наличии дефекта модуля сдвига. Представленная ситуация является более сложной, чем обычные фазовые переходы. Действительно, в последнем случае стационарное значение температуры системы T_0 сводится к значению T_e , определяемому термостатом. В нашем случае T_0 сводится к критическому значению T_{c0} для синергетического перехода второго рода — плавления аморфной смазки, которое происходит при отсутствии дефекта модуля (см. подраздел 2.2). При учете дефекта модуля реализуется температура

$$T_0 = T_e + (2 - T_e) \frac{\sigma_0^2}{1 + \sigma_0^2}, \quad (2.58)$$

задаваемая положением минимума зависимости (2.54). Как видно из выражений (2.56), (2.58), T_0 плавно уменьшается от значения

$$T_m = T_c^0 + (2 - T_c^0) \frac{(\sigma_0^c)^2}{1 + (\sigma_0^c)^2},$$

$$\sigma_0^c = \left[\frac{1}{3^{1/2}} \left(\frac{\gamma^2}{3} - \frac{1 + g_\Theta (1 - T_c^0)}{1 - g_\Theta} \right)^{1/2} - \frac{\gamma}{3} \right]^2 \quad (2.59)$$

при $T_e = T_c^0$ до T_{c0} при $T_e \rightarrow \infty$. Как показано на рис. 2.4, стационарная температура T_0 линейно возрастает от 0 до T_{c0} с ростом T_e , значения которой находятся в том же интервале, и после скачка вниз при $T_e = T_{c0}$, величина T_0 плавно уменьшается. При уменьшении температуры T_e стационарное значение температуры T_0 возрастает. Когда достигается точка T_c^0 (2.55), значение T_0 претерпевает скачок от T_m (2.59) до T_c^0 . При $T_e < T_c^0$ стационарная температура T_0 снова становится равной T_e .

Поскольку стационарное значение напряжений $\sigma_0 > 0$ (2.56), увеличивающееся с ростом T_e , реализуется только при $T_e > 1 + g_\Theta^{-1}$ и $g_\Theta < 1$, рассмотрению подлежит интервал значений $T_c^0 > 2$. В этом интервале максимальная температура

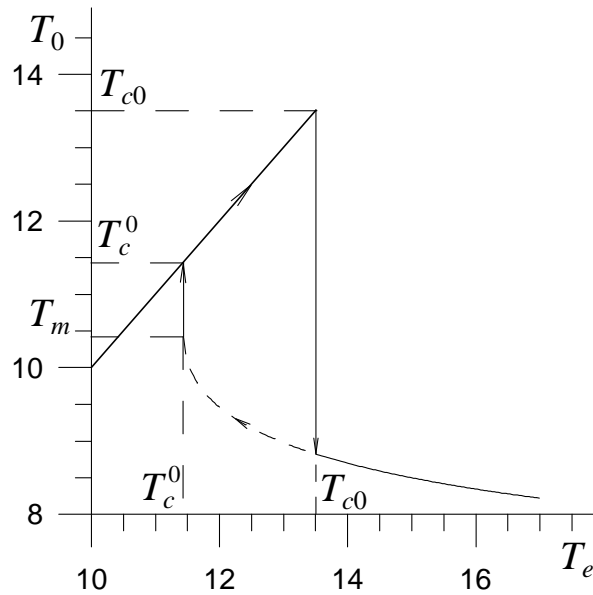


Рис. 2.4. Зависимость стационарного значения температуры смазки T_0 от температуры T_e при использовании (2.56) ($g_\Theta = 0.2$, $\theta = 0.4$, $\alpha = 0.5$)

системы (2.59) ниже, чем минимальная температура поверхностей трения (2.55), и как видно из рис. 2.4 при $T_e > T_c^0$ стационарная температура пленки T_0 всегда ниже значения T_e .

Переход к рассмотрению фазового превращения первого рода достигается и непосредственно заменой постоянного коэффициента g в (2.15) зависимостью (2.50) в безразмерной форме $g(\sigma) = G(\sigma)/G_0$:

$$g(\sigma) = g_\theta \left[1 + \frac{\theta^{-1} - 1}{1 + (\sigma/\alpha)^\beta} \right], \quad (2.60)$$

где $g_\theta = \Theta/G_0$; $\theta = \Theta/G$; $\alpha = \sigma_p/\sigma_s$. Для данного случая исследованы два значения коэффициента: $\beta = 1$ и $\beta = 2$. Согласно проведенному рассмотрению, для каждого из них плавление пленки смазки происходит по механизму фазового перехода первого рода, но для второго варианта удалось произвести более полное аналитическое исследование, поэтому он представлен подробнее. Ниже показано, что для значения $\beta = 1$ результаты аналогичны.

В случае, когда $\beta = 2$, в рамках адиабатического приближения $\tau_\varepsilon, \tau_T \ll \tau_\sigma$ система Лоренца (2.15)–(2.17) сводится к уравнению Ландау–Халатникова (2.26),

в котором синергетический потенциал является четной функцией напряжений σ и определяется выражением (см. положительную область σ на рис. 2.2)

$$V = \frac{1}{2}(1 - g_\theta)\sigma^2 + g_\theta \left(1 - \frac{T_e}{2}\right) \ln(1 + \sigma^2) - \frac{1}{2}g_\theta\alpha^2 (\theta^{-1} - 1) (\alpha^2 - 1)^{-1} \times \\ \times [(T_e - 2) \ln(1 + \sigma^2) + (\alpha^2 - T_e + 1) \ln(1 + \sigma^2/\alpha^2)]. \quad (2.61)$$

При малых значениях T_e зависимость $V(\sigma)$ имеет монотонно возрастающий вид с минимумом в точке $\sigma = 0$. При температуре

$$T_c^0 = g_\theta^{-2} \left[g_\theta (\alpha^2 + g_\theta + 1 - \alpha^2 g_\theta \theta^{-1}) + 2\alpha^2 g_\theta \theta^{-1} (g_\theta - 1) + \frac{\alpha^4}{2} D^{1/2} \right], \quad (2.62)$$

где

$$D = 16g_\theta^2\alpha^{-4} (g_\theta - 1) (\theta^{-1} - 1) (\alpha^{-2} - \theta^{-1}), \quad (2.63)$$

появляется плато, которое при $T_e > T_c^0$ трансформируется в минимум, отвечающий значению напряжений $\sigma_0 \neq 0$, и максимум, разделяющий минимумы жидкоподобной "упорядоченной" и твердоподобной "неупорядоченной" фаз. С дальнейшим ростом температуры поверхностей T_e минимум жидкоподобной фазы углубляется, а высота межфазного барьера спадает, исчезая при критическом значении $T_{c0} = 1 + \theta/g_\theta = 1 + g^{-1}$ (2.28). Стационарные значения напряжений даются выражением (см. рис. 2.3)

$$\sigma_0^m = \left\{ \frac{1}{2}\alpha^2 (g_\theta - 1)^{-1} \left[1 + \alpha^{-2} - g_\theta\alpha^{-2} (T_e - 1) - g_\theta\theta^{-1} \mp D_0^{1/2} \right] \right\}^{1/2}, \quad (2.64)$$

где

$$D_0 = [g_\theta (T_e - 1) \alpha^{-2} + g_\theta \theta^{-1} - 1 - \alpha^{-2}]^2 - 4\alpha^{-2} (g_\theta - 1) [g_\theta \theta^{-1} (T_e - 1) - 1], \quad (2.65)$$

и верхний знак соответствует минимуму функции $V(\sigma)$, а нижний — максимуму. При $T_e \geq T_{c0}$ кривая $V(\sigma)$ имеет тот же вид, что и для фазового перехода второго рода.

Согласно выражениям (2.64), (2.58), стационарное значение температуры системы T_0 плавно увеличивается от значения T_m при $T_e = T_c^0$. Как показано на рис. 2.5, стационарная температура T_0 линейно возрастает от 0 до T_{c0} с ростом T_e ,

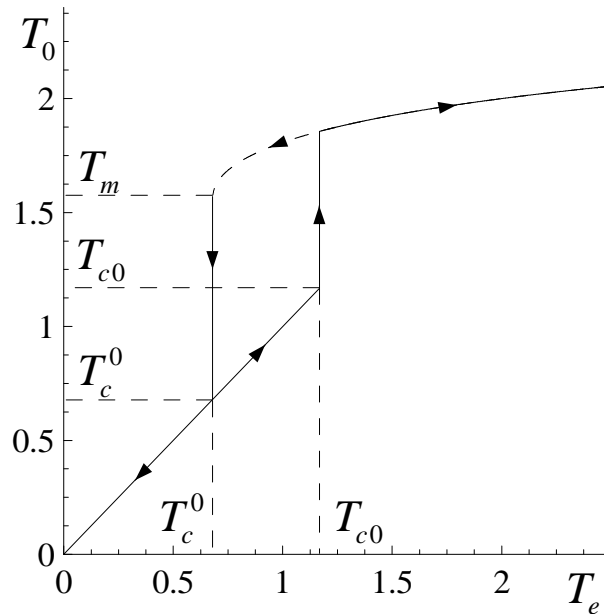


Рис. 2.5. Зависимость стационарного значения температуры смазки T_0 от температуры T_e при использовании (2.64) ($g_\theta = 0.6$, $\theta = 0.1$, $\alpha = 0.75$)

значения которой находятся в том же интервале, и после скачка вверх при $T_e = T_{c0}$, величина T_0 плавно увеличивается. При уменьшении температуры T_e стационарное значение температуры T_0 убывает. Когда достигается точка T_c^0 (2.62), значение T_0 уменьшается скачком от T_m до T_c^0 . При $T_e < T_c^0$ стационарная температура T_0 снова становится равной T_e .

В случае, когда $\beta = 1$, синергетический потенциал является нечетной функцией σ и определяется выражением (см. рис. 2.2)

$$\begin{aligned}
 V = & \frac{1}{2}(1 - g_\theta)\sigma^2 + g_\theta \left(1 - \frac{T_e}{2}\right) \ln(1 + \sigma^2) - g_\theta(\theta^{-1} - 1)\alpha \times \\
 & \times \left\{ \sigma - \alpha \ln \left|1 + \frac{\sigma}{\alpha}\right| + (T_e - 2) \left[\frac{\alpha}{1 + \alpha^2} \ln \left|1 + \frac{\sigma}{\alpha}\right| + \right. \right. \\
 & \left. \left. + \frac{\alpha}{2(1 + \alpha^2)} \ln(1 + \sigma^2) + (1 + \alpha^2)^{-1} \operatorname{tg}^{-1} \sigma \right] \right\}. \quad (2.66)
 \end{aligned}$$

Зависимость $V(\sigma)$ при $\sigma > 0$ аналогична случаю $\beta = 2$. Для определения координат особых точек системы необходимо решить кубическое уравнение, в результате получаются громоздкие выражения, которые здесь не приводятся.

2.4.2. Кинетика фазового перехода второго рода

2.4.2.1. Случай $\tau_\varepsilon \ll \tau_\sigma, \tau_T$

В подразделе 2.2 проведен качественный анализ системы уравнений (2.15) – (2.17) в адиабатическом приближении, когда характерные времена релаксации удовлетворяют условиям $\tau_\varepsilon, \tau_T \ll \tau_\sigma$. В данном подразделе рассмотрены случаи, когда наименьшим является одно время релаксации [34, 40, 41]. В частности, при $\tau_\varepsilon \ll \tau_\sigma, \tau_T$ в (2.16) можно положить $\dot{\varepsilon} = 0$, что дает связь

$$\varepsilon = (T - 1)\sigma. \quad (2.67)$$

Учитывая ее в оставшихся уравнениях (2.15), (2.17) и используя масштаб τ_σ для измерения времени, приходим к системе

$$\dot{\sigma} = -\sigma [1 - g(T - 1)], \quad (2.68)$$

$$\dot{T} = \tau^{-1} [T_e - T - \sigma^2 (T - 2)], \quad (2.69)$$

где параметр $\tau \equiv \tau_T / \tau_\sigma$. Фазовый портрет характеризуется наличием двух особых точек $D(T_e, 0)$ и $O\left(1 + g^{-1}, \sqrt{[T_e - (g^{-1} + 1)](g^{-1} - 1)^{-1}}\right)$. Поскольку аналитически получить точное решение системы уравнений (2.68), (2.69) не представляется возможным, с этой целью используется метод фазовой плоскости [151]. Он позволяет определить фазовые портреты системы. Точный их вид находится путем численного интегрирования уравнений методом Рунге–Кутты 4–го порядка.

Анализ показателей Ляпунова

$$\lambda_D = \frac{1}{2} [g(T_e - 1) - 1 - \tau^{-1}] \left(1 \pm \sqrt{1 + 4\tau^{-1} [g(T_e - 1) - 1] [g(T_e - 1) - 1 - \tau^{-1}]^{-2}} \right) \quad (2.70)$$

показывает, что в предкритической области $T_e \leq T_{c0}$ точка D представляет устойчивый узел. Принимая во внимание, что при таких значениях T_e особая точка O не реализуется, приходим к выводу — с течением времени система эволюционирует в отвечающую точке D стационарное твердоподобное состояние согласно фазовому портрету, приведенному на рис. 2.6а.

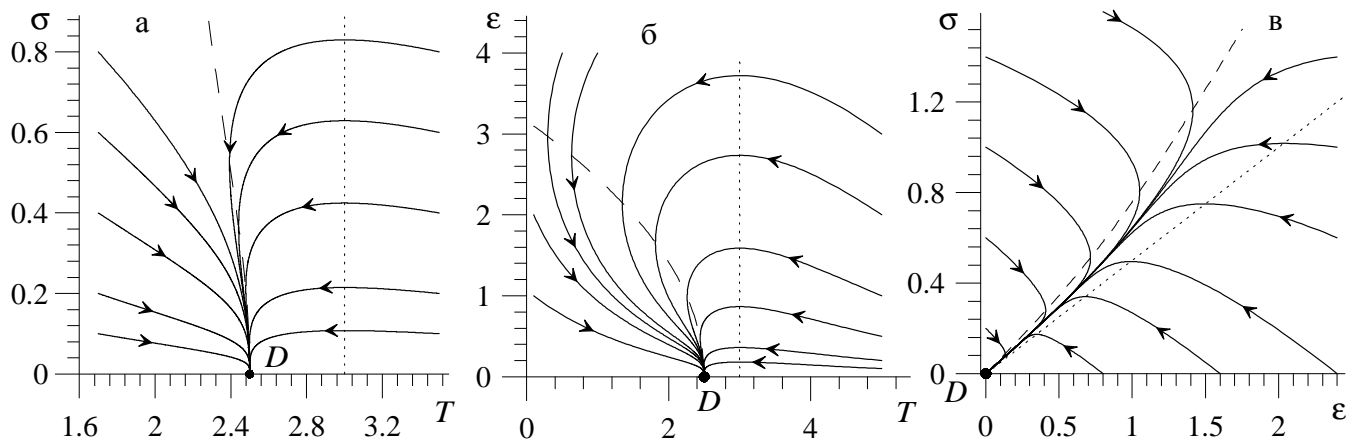


Рис. 2.6. Фазовые портреты твердоподобной фазы ($T_e = 2.5$, $g = 0.5$): а — $\tau_\epsilon \ll \tau_\sigma = \tau_T$; б — $\tau_\sigma \ll \tau_\epsilon = \tau_T$; в — $\tau_T \ll \tau_\epsilon = \tau_\sigma$. Здесь и на всех последующих рисунках штриховая линия указывает точки, в которых фазовые траектории имеют вертикальную касательную, пунктирная — горизонтальную

Рост параметра $\tau = \tau_T/\tau_\sigma$ приводит к закручиванию траекторий вокруг точки D , т.е. с увеличением инерционности изменения температуры по сравнению с напряжениями проявляется тенденция к возникновению прерывистого режима трения. В закритической области $T_e > T_{c0}$ точка D является седлом (рис. 2.7).

Показатели Ляпунова особой точки O определяются выражением:

$$\lambda_O = \frac{T_e - 2g^{-1}}{2\tau(g^{-1} - 1)} \left\{ 1 \pm \sqrt{1 - 8\tau \frac{g(T_e - 1 - g^{-1})(g^{-1} - 1)^2}{(T_e - 2g^{-1})^2}} \right\}. \quad (2.71)$$

Отсюда видно, что при значениях параметра τ , ограниченных сверху величиной

$$\tau_c = \frac{(T_e - 2g^{-1})^2}{8g(T_e - 1 - g^{-1})(g^{-1} - 1)^2}, \quad (2.72)$$

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

Таким образом, в закритической области $T_e > T_{c0}$ при $\tau_\sigma \ll \tau_T$ возникает прерывистый режим трения (см. рис. 2.7в), характеризуемый частотой

$$\omega = \frac{2g^{-1} - T_e}{2\tau_T(g^{-1} - 1)} \left[8\tau \frac{g(T_e - 1 - g^{-1})(g^{-1} - 1)^2}{(T_e - 2g^{-1})^2} - 1 \right]^{1/2} \quad (2.73)$$

и коэффициентом затухания

$$\alpha = \frac{1}{2}\tau_T^{-1}(g^{-1} - 1)^{-1}(2g^{-1} - T_e). \quad (2.74)$$

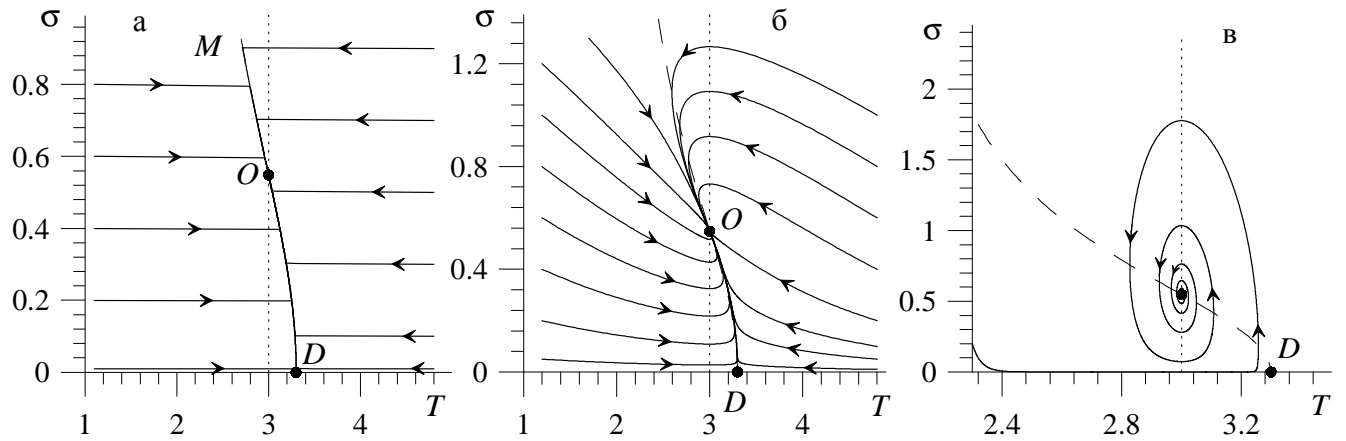


Рис. 2.7. Фазовые портреты жидкоподобной фазы ($T_e = 3.3$, $g = 0.5$): а — $\tau_\varepsilon \ll \tau_\sigma = 10^2 \tau_T$; б — $\tau_\varepsilon \ll \tau_\sigma = \tau_T$; в — $\tau_\varepsilon \ll \tau_T = 10^2 \tau_\sigma$

С ростом температуры в интервале $T_e > T_{c0}$ величины ω , α спадают, а критическое отношение времен релаксации (2.72) возрастает. Иными словами, возбуждение системы способствует исчезновению затухающих колебаний, представляющих прерывистый режим трения. Однако, как видно из рис. 2.7, проявлению прерывистого движения способствует рост параметра $\tau = \tau_T / \tau_\sigma \gg 1$.

Обратный предел $\tau_T \ll \tau_\sigma$ отвечает адиабатическому приближению, представляющему стандартную картину фазового перехода — плавления смазки. Согласно рис. 2.7а, уменьшение параметра $\tau \rightarrow 0$ приводит к выделению на фазовом портрете системы участка MOD , к которому быстро сбегаются со временем все траектории [34, 41]. Участок MOD , положение которого определяется внешними условиями (величиной T_e), был назван в [152] "руслом большой реки". Исследование временных зависимостей пути, пройденного конфигуративной точкой, показывает, что она быстро достигает участок MOD и затем медленно движется по нему. Таким образом, движение здесь преимущественно определяет кинетику системы. В этом и состоит обнаруженная в [152] универсальность кинетической картины фазового перехода.

2.4.2.2. Случай $\tau_\sigma \ll \tau_\varepsilon, \tau_T$

Полагая в (2.15) $\dot{\sigma} = 0$, находим связь

$$\sigma = g\varepsilon, \quad (2.75)$$

подстановка которой в (2.16), (2.17) дает систему

$$\dot{\varepsilon} = -\varepsilon [1 - g(T - 1)], \quad (2.76)$$

$$\dot{T} = \tau^{-1} [T_e - T - \varepsilon^2 g(1 - g)], \quad (2.77)$$

где время измерено в единицах τ_ε и параметр $\tau \equiv \tau_T/\tau_\varepsilon$. Подобно первому случаю фазовый портрет определяется наличием особых точек $D(T_e, 0)$, $O\left(1 + g^{-1}, \sqrt{[T_e - (g^{-1} + 1)]g^{-1}(1 - g)^{-1}}\right)$. Показатели Ляпунова имеют вид

$$\lambda_D = \frac{1}{2} [g(T_e - 1) - \tau^{-1} - 1] \left\{ 1 \pm \sqrt{1 + 4\tau^{-1} \frac{g(T_e - 1 - g^{-1})}{[\tau^{-1} - g(T_e - 1 - g^{-1})]^2}} \right\}, \quad (2.78)$$

$$\lambda_O = -\frac{1}{2}\tau^{-1} \left[1 \pm \sqrt{1 - 8\tau(T_e - 1 - g^{-1})} \right]. \quad (2.79)$$

Как и выше, точка D при $T_e \leq T_{c0}$ представляет устойчивый узел, а при $T_e > T_{c0}$ — седло. Точка O реализуется только в жидкоподобной области $T_e > T_{c0}$, где она является устойчивым узлом при малых значениях параметра τ и устойчивым фокусом, если величина τ превышает критическое значение

$$\tau_c = \frac{1}{8} (T_e - 1 - g^{-1})^{-1}. \quad (2.80)$$

Соответствующие значения для частоты и декремента затухания колебаний имеют вид:

$$\omega = \frac{1}{2}\tau_T^{-1} [8\tau(T_e - 1 - g^{-1}) - 1]^{1/2}, \quad (2.81)$$

$$\alpha = (2\tau_T)^{-1}. \quad (2.82)$$

Проведенный анализ и вид фазовых портретов на рис. 2.8 показывают, что, как и в предыдущем случае, при больших значениях параметра τ система характеризуется затухающими колебаниями, т.е. прерывистым движением (рис. 2.8в), а с

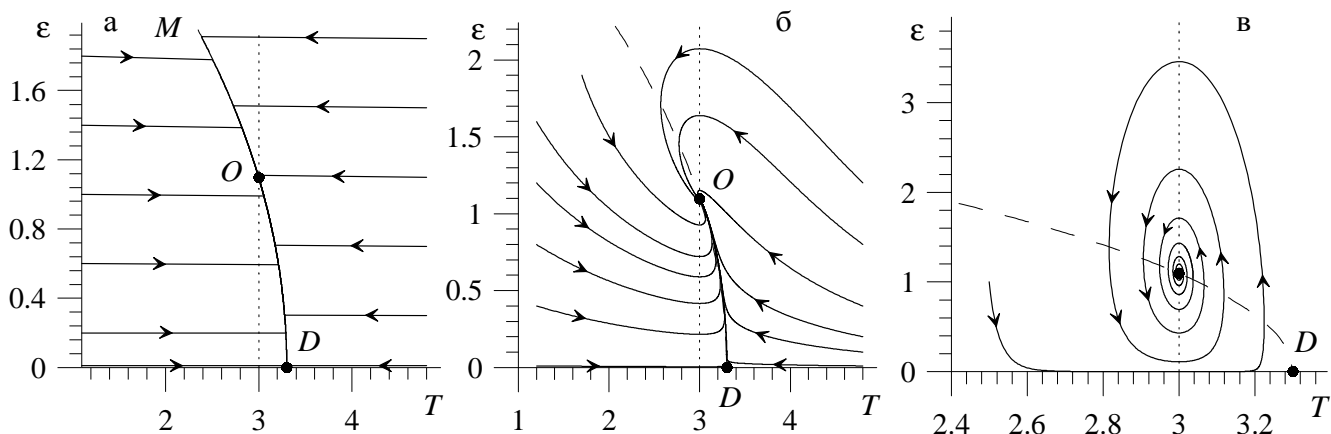


Рис. 2.8. Фазовые портреты жидкоподобной фазы ($T_e = 3.3$, $g = 0.5$): а — $\tau_\sigma \ll \tau_\varepsilon = 10^2 \tau_T$; б — $\tau_\sigma \ll \tau_\varepsilon = \tau_T$; в — $\tau_\sigma \ll \tau_T = 10^2 \tau_\varepsilon$

уменьшением величины τ до значений $\tau \ll 1$ достигается диссипативный режим релаксации (рис. 2.8а). Подобным же образом, в адиабатическом пределе $\tau \rightarrow 0$ проявляется универсальность кинетического поведения, состоящая в выделении участка MOD на рис. 2.8а, на котором система медленно эволюционирует к стационарной точке O [34, 41].

2.4.2.3. Случай $\tau_T \ll \tau_\sigma, \tau_\varepsilon$

Полагая в (2.17) $\dot{T} = 0$, находим

$$T = T_e - \sigma\varepsilon + \sigma^2, \quad (2.83)$$

и уравнения (2.15), (2.16) принимают вид

$$\dot{\sigma} = -\sigma + g\varepsilon, \quad (2.84)$$

$$\dot{\varepsilon} = \tau^{-1} [-\varepsilon + (T_e - 1)\sigma - \sigma^2(\varepsilon + \sigma)], \quad (2.85)$$

где время измерено в единицах τ_σ и параметр $\tau \equiv \tau_\varepsilon/\tau_\sigma$. Фазовый портрет имеет особые точки $O \left(\sqrt{[T_e - (g^{-1} + 1)]g^{-1}(1 - g)^{-1}}, \sqrt{[T_e - (g^{-1} + 1)](g^{-1} - 1)^{-1}} \right)$, $D(0, 0)$ (см. рис. 2.9), первая из которых реализуется только в жидкоподобной

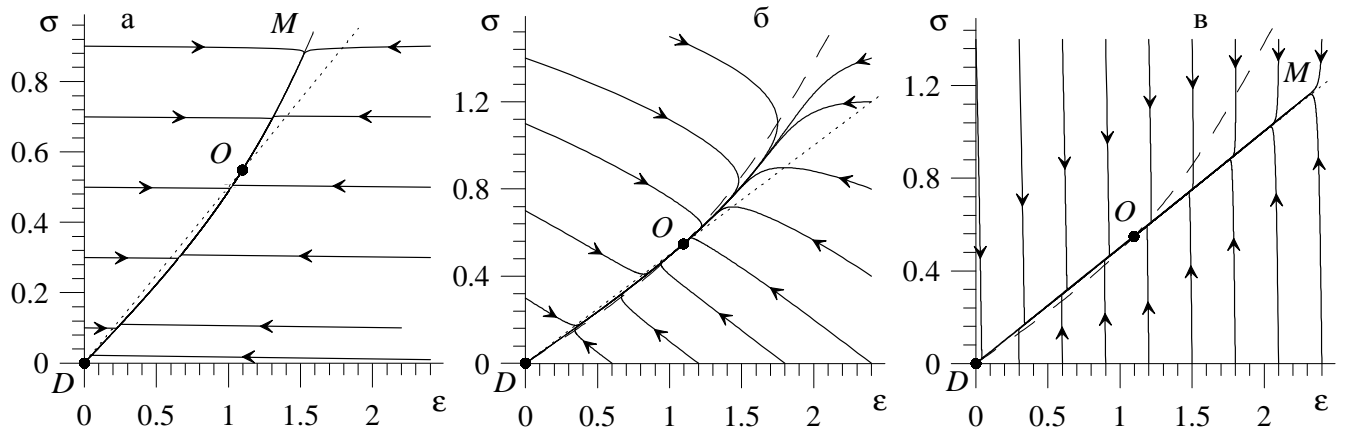


Рис. 2.9. Фазовые портреты жидкоподобной фазы ($T_e = 3.3$, $g = 0.5$): а — $\tau_T \ll \tau_\sigma = 10^2 \tau_\epsilon$; б — $\tau_T \ll \tau_\sigma = \tau_\epsilon$; в — $\tau_T \ll \tau_\epsilon = 10^2 \tau_\sigma$

области $T_e > T_{c0}$. Соответствующие показатели Ляпунова имеют вид:

$$\lambda_D = -\frac{1}{2} (1 + \tau^{-1}) \left[1 \pm \sqrt{1 + 4\tau^{-1}g(1 + \tau^{-1})^{-2}(T_e - 1 - g^{-1})} \right], \quad (2.86)$$

$$\lambda_O = -\frac{1}{2} \left(1 + \tau^{-1} \frac{T_e - 2}{g^{-1} - 1} \right) \left[1 \pm \sqrt{1 - 8\tau \frac{(g^{-1} - 1)[T_e - g^{-1} - g(T_e - 1)]}{[\tau(g^{-1} - 1) + T_e - 2]^2}} \right]. \quad (2.87)$$

При $T_e \leq T_{c0}$ точка D является устойчивым узлом, а с переходом в закритическую область $T_e > T_{c0}$ трансформируется в седло. Точка O , характеризующая жидкоподобную фазу, при значениях параметра τ , принадлежащих интервалу (τ_-, τ_+) , где

$$\tau_{\pm} = (g^{-1} - 1)^{-1} [3T_e + 2 - 4g^{-1} - 4g(T_e - 1)] \pm (g^{-1} - 1)^{-1} \sqrt{8[g^{-1} + g(T_e - 1) - T_e][2g^{-1} + 2g(T_e - 1) - T_e - 2]}, \quad (2.88)$$

представляет устойчивый фокус, а вне его — устойчивый узел. Характерные величины частоты и коэффициента затухания

$$\omega = \frac{1}{2} \tau_\epsilon^{-1} (g^{-1} - 1)^{-1} \times \left[8\tau (g^{-1} - 1) [T_e - g^{-1} - g(T_e - 1)] - [\tau (g^{-1} - 1) + T_e - 2]^2 \right]^{1/2}, \quad (2.89)$$

$$\alpha = \frac{1}{2} \tau_\epsilon^{-1} (g^{-1} - 1)^{-1} [\tau (g^{-1} - 1) + T_e - 2] \quad (2.90)$$

являются соизмеримыми при всех значениях T_e , τ . Поэтому в отличие от рассмотренных выше случаев здесь прерывистый режим трения практически не проявляется.

Согласно фазовым портретам, показанным на рис. 2.9, универсальность кинетического поведения системы проявляется как при $\tau_\varepsilon \ll \tau_\sigma$, так и при $\tau_\varepsilon \gg \tau_\sigma$. В первом случае выход на универсальный участок происходит за счет быстрого изменения деформации $\varepsilon(t)$ при практически неизменных напряжениях $\sigma(t)$ (рис.2.9а), а во втором наблюдается обратная картина — величина $\sigma(t)$ изменяется очень быстро, а $\varepsilon(t)$ почти не изменяется (рис.2.9в). В промежуточной области $\tau_\varepsilon \sim \tau_\sigma$ универсальность проявляется только при малых начальных значениях деформации $\varepsilon(0)$ и напряжений $\sigma(0)$: $\varepsilon(0) \ll \varepsilon_0$, $\sigma(0) \ll \sigma_0$ (рис.2.9б). Отметим, что в отличие от ранее рассмотренных случаев универсальный участок фазовых траекторий имеет не спадающий, а нарастающий характер, соответствующий кривой деформации [42, 43, 113].

2.4.3. Кинетика фазового перехода первого рода

2.4.3.1. Случай $\tau_\varepsilon \ll \tau_\sigma, \tau_T$

Рассмотрим, как и для фазового перехода второго рода, различные предельные соотношения времен релаксации τ_σ , τ_ε , τ_T . При этом в исходном уравнении (2.15) вместо постоянной g используем зависимость (2.60). Отметим, что для фазового перехода первого рода не проводится стандартный аналитический анализ особых точек на устойчивость вследствие громоздкости получаемых выражений. Фазовые портреты построены для значения температуры поверхностей, находящегося в интервале (T_c^0, T_{c0}) реализации фазового перехода первого рода. Для области температур $T_e \geq T_{c0}$ фазовые портреты аналогичны рассмотренным в предыдущем пункте.

Полагая в (2.16) $\dot{\varepsilon} = 0$, получаем связь $\varepsilon = (T - 1)\sigma$. Учитывая ее в оставшихся уравнениях (2.15), (2.17) и используя масштаб τ_σ для измерения времени, приходим к системе (ср. с (2.68), (2.69))

$$\dot{\sigma} = -\sigma \left[1 - g_\theta \left(1 + \frac{\theta^{-1} - 1}{1 + [\sigma/\alpha]^2} \right) (T - 1) \right], \quad (2.91)$$

$$\dot{T} = \tau^{-1} [T_e - T - \sigma^2 (T - 2)]. \quad (2.92)$$

Фазовый портрет системы (2.91), (2.92) имеет три особые точки $D(T_e, 0)$, $S(T^m, \sigma^m)$, $O(T_0, \sigma_0)$, где

$$T_0^m = T_e - \sigma_0^m \varepsilon_0^m + (\sigma_0^m)^2, \quad (2.93)$$

$$\varepsilon_0^m = (1 + (\sigma_0^m)^2)^{-1} (T_e + (\sigma_0^m)^2 - 1) \sigma_0^m, \quad (2.94)$$

характерные значения σ_0^m определяются равенствами (2.64) и (2.65).

В рассматриваемом интервале температур точка S является седлом, O — устойчивым узлом или фокусом, а точка D — устойчивым узлом. На рис. 2.10 показано, каким образом изменяется фазовый портрет с увеличением отношения времен релаксации $\tau = \tau_T/\tau_\sigma$. Сравнивая с рис. 2.7, видно, что в окрестности точки O поведение является практически тем же, что и для фазового перехода второго рода: в адиабатическом пределе $\tau_T \ll \tau_\sigma$ траектории быстро сбегаются к универсальному участку OS (рис. 2.10а), а в противоположном пределе $\tau_T \gg \tau_\sigma$ проявляется режим затухающих колебаний, представляющих прерывистое движение. Основное отличие состоит в появлении сепаратрисы в области малых значений напряжений, которое отражает наличие барьера на зависимости $V(\sigma)$.

2.4.3.2. Случай $\tau_\sigma \ll \tau_\varepsilon, \tau_T$

Подстановка выражения (2.60) для величины g в исходное уравнение (2.15), где следует положить $\dot{\sigma} = 0$, приводит к кубическому уравнению, решение которого удобно записать в виде

$$\sigma = \frac{1}{3} (g_\theta \varepsilon + \sigma_+^0 + \sigma_-^0), \quad (2.95)$$

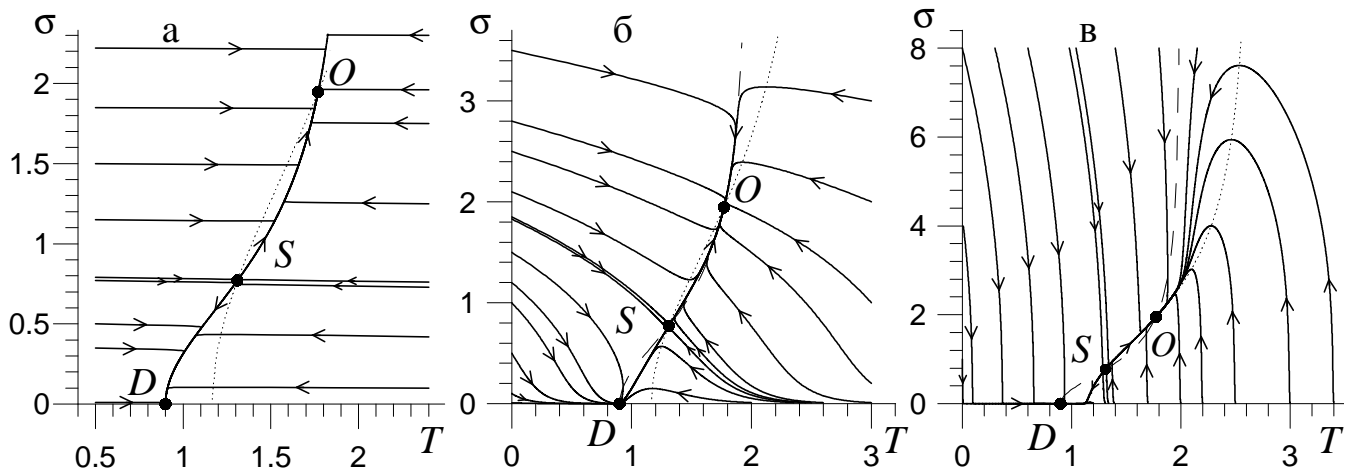


Рис. 2.10. Фазовые портреты для фазового перехода первого рода ($T_e = 0.9$, $g_\theta = 0.6$, $\theta = 0.1$, $\alpha = 0.75$): а — $\tau_\varepsilon \ll \tau_\sigma = 10^2 \tau_T$; б — $\tau_\varepsilon \ll \tau_\sigma = \tau_T$; в — $\tau_\varepsilon \ll \tau_T = 10^2 \tau_\sigma$

где введены функции

$$\sigma_\pm^0 = \left\{ \frac{1}{2} (2g_\theta^3 \varepsilon^3 + 27g_\theta \varepsilon \alpha^2 \theta^{-1} - 9g_\theta \varepsilon \alpha^2) \pm Q^{1/2} \right\}^{1/3}, \quad (2.96)$$

$$Q = (3\alpha^2 - g_\theta^2 \varepsilon^2)^3 + \frac{1}{4} (9g_\theta \varepsilon \alpha^2 - 27g_\theta \varepsilon \alpha^2 \theta^{-1} - 2g_\theta^3 \varepsilon^3)^2. \quad (2.97)$$

Подстановка связи (2.95) в уравнения (2.16), (2.17) дает систему (ср. с (2.76), (2.77))

$$\dot{\varepsilon} = -\varepsilon + \frac{1}{3} (T - 1) (g_\theta \varepsilon + \sigma_+^0 + \sigma_-^0), \quad (2.98)$$

$$\tau \dot{T} = T_e - T - \frac{1}{3} (g_\theta \varepsilon + \sigma_+^0 + \sigma_-^0) \left[\varepsilon - \frac{1}{3} (g_\theta \varepsilon + \sigma_+^0 + \sigma_-^0) \right]. \quad (2.99)$$

Фазовый портрет системы (2.98), (2.99) имеет три особые точки (см. рис. 2.11): $D(T_e, 0)$, $S(T^m, \varepsilon^m)$, $O(T_0, \varepsilon_0)$, где характерные значения T_0^m , ε_0^m определяются соответственно равенствами (2.93), (2.94). Аналогично предыдущему случаю точка D является устойчивым узлом, S — седлом, а O — притягивающим узлом или фокусом. Также нетрудно видеть, что при $\tau_T \ll \tau_\varepsilon$ максимальным образом проявляется универсальность кинетического поведения системы (рис. 2.11а), а в противоположном пределе $\tau_T \gg \tau_\varepsilon$ также наблюдается режим затухающих колебаний, представляющих прерывистое трение (рис. 2.11в). По сравнению с соответствующим портретом для фазового перехода второго рода

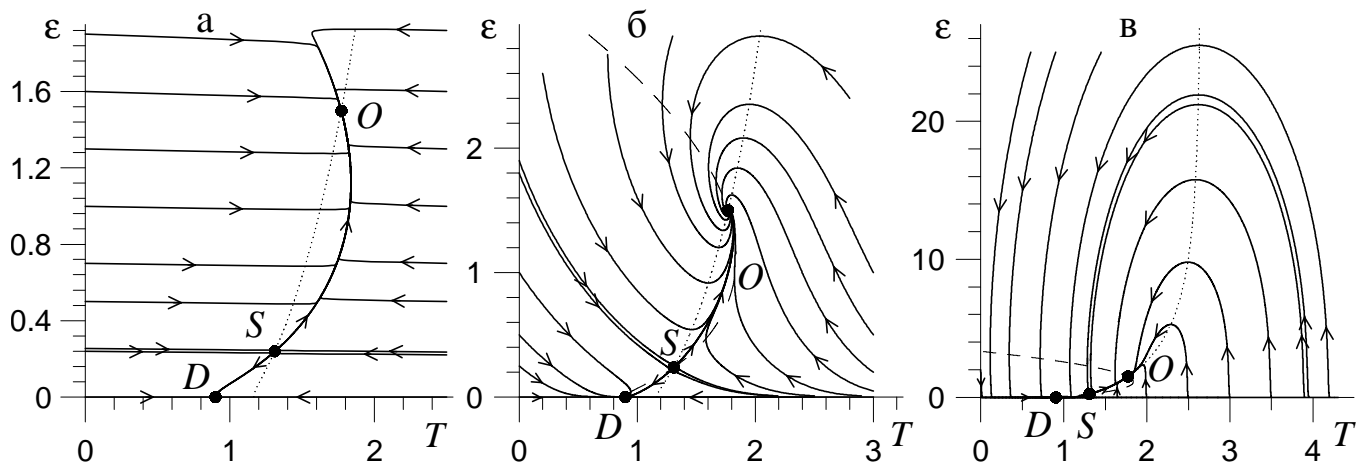


Рис. 2.11. Фазовые портреты для фазового перехода первого рода ($T_e = 0.9$, $g_\theta = 0.6$, $\theta = 0.1$, $\alpha = 0.75$): а — $\tau_\sigma \ll \tau_\varepsilon = 10^2 \tau_T$; б — $\tau_\sigma \ll \tau_\varepsilon = \tau_T$; в — $\tau_\sigma \ll \tau_T = 10^2 \tau_\varepsilon$

(см. рис. 2.8) можно отметить, как и в подпункте 2.4.3.1, появление сепаратрисы в области значений T , ε , отвечающей энергетическому барьеру, разделяющему жидкоподобную и твердоподобную фазы.

2.4.3.3. Случай $\tau_T \ll \tau_\sigma, \tau_\varepsilon$

Полагая в (2.17) $\dot{T} = 0$, получаем связь (2.83) $T = T_e - \sigma\varepsilon + \sigma^2$. Ее подстановка в (2.16) дает уравнение (2.85), а (2.15) принимает вид (ср. с (2.84))

$$\dot{\sigma} = -\sigma + g_\theta \left[1 + (\theta^{-1} - 1) / \left(1 + [\sigma/\alpha]^2 \right) \right] \varepsilon. \quad (2.100)$$

Фазовый портрет системы (2.85), (2.100) имеет три особые точки (см. рис. 2.12): $D(0, 0)$, $S(\varepsilon^m, \sigma^m)$, $O(\varepsilon_0, \sigma_0)$, где характерные значения σ_0^m , ε_0^m определяются равенствами соответственно (2.64), (2.94). Как и в двух предыдущих подпунктах, точка D является устойчивым узлом, S — седлом, а O — притягивающим узлом или фокусом.

Из сравнения с соответствующим портретом для фазового перехода второго рода (см. рис. 2.9) видно, что, как и выше, единственное усложнение состоит в появлении сепаратрисы в области малых значений ε или σ . Аналогично фазовому переходу второго рода универсальность кинетического поведения системы как при

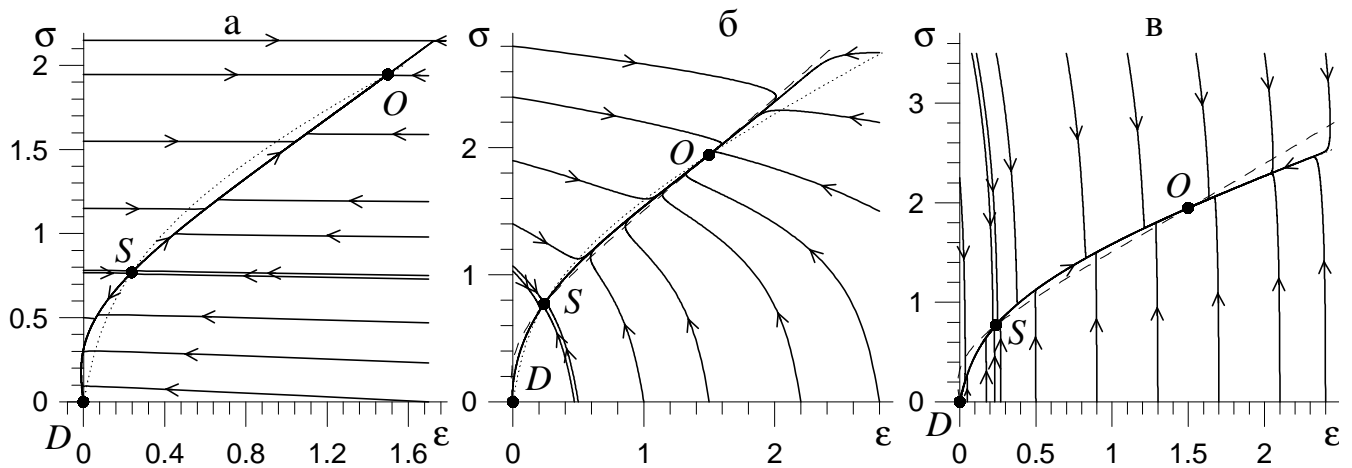


Рис. 2.12. Фазовые портреты для фазового перехода первого рода ($T_e = 0.9$, $g_\theta = 0.6$, $\theta = 0.1$, $\alpha = 0.75$): а — $\tau_T \ll \tau_\sigma = 10^2 \tau_\varepsilon$; б — $\tau_T \ll \tau_\sigma = \tau_\varepsilon$; в — $\tau_T \ll \tau_\sigma = 10^2 \tau_\sigma$

$\tau_\varepsilon \ll \tau_\sigma$, так и при $\tau_\varepsilon \gg \tau_\sigma$ сохраняется для фазового перехода первого рода. Отличительной особенностью данного случая также является то, что в области малых значений деформации $|\varepsilon| \ll 1$ она принимает отрицательные значения. Физически это можно интерпретировать как малое изменение направления перемещения движущегося блока в аппарате поверхностных сил относительно положения равновесия при релаксации системы в стационарное твердоподобное состояние.

Рассмотрен случай, когда $\beta = 1$, т.е., синергетический потенциал является нечетной функцией σ и определяется выражением (2.66). Фазовые портреты для всех соотношений времен релаксации полностью аналогичны портретам для $\beta = 2$.

2.5. Гистерезисные явления при зависимости модуля сдвига от деформации

2.5.1. Фазовый переход второго рода

2.5.1.1. Скачкообразное плавление

Как уже отмечалось, при $g(\sigma) = G/G_0 \equiv \text{const}$ уравнение (2.15) сводится к соотношению типа Максвелла для описания вязкоупругой среды путем замены

ε/τ_σ на $\partial\varepsilon/\partial t$. Уравнение Максвелла предполагает использование идеализированной модели Генки. Известно, что модуль сдвига смазки зависит от величины напряжений [113, 149]. Для учета этой зависимости мы воспользовались в подразделе 2.4 простейшим приближением (2.50), которое описывает переход режима упругой деформации в пластический. Он происходит при характерных значениях сдвиговых напряжений σ_p и деформации ε_p .

Зависимость (2.50) описывает гистерезис при плавлении тонкого слоя смазки только в координатах $T_e - \sigma$ (см. рис. 2.3). При этом кривая деформации $\sigma(\varepsilon)$ является монотонной и позволяет представить лишь непрерывный переход. Однако экспериментальные данные однозначно указывают, что плавление молекулярно-тонкой пленки смазки имеет скачкообразный характер [7, 8], хотя и может происходить по механизму фазового перехода второго рода. Как показано ниже [42–45], описание указанной особенности достигается при помощи замены зависимости $g(\sigma)$ в (2.15) на $g(\varepsilon) \equiv G(\varepsilon)/G_0$, где

$$G(\varepsilon) = \Theta + \frac{G - \Theta}{1 + (\varepsilon/\varepsilon_p)^\beta}. \quad (2.101)$$

При этом величина параметра $\beta > 0$, определяющего характер потенциала, также играет ключевую роль.

Рассмотрим стационарное состояние, при котором производная в (2.15) $\dot{\sigma}=0$, и величина напряжений σ в смазке не изменяется. Этот случай, согласно (2.37), соответствует скольжению с постоянной скоростью. Тогда получаем уравнение подобное закону Гука:

$$\sigma = g(\varepsilon)\varepsilon, \quad g(\varepsilon) = g_\theta \left(1 + \frac{\theta^{-1} - 1}{1 + (\varepsilon/\alpha)^\beta} \right), \quad (2.102)$$

где введены параметр $\theta = \Theta/G < 1$ и коэффициенты $g_\theta = \Theta/G_0 < 1$, $\alpha = \varepsilon_p/\varepsilon_s$. Зависимость (2.102) в координатах $\beta - \varepsilon - \sigma$ при заданных α , g_θ и θ приведена на рис. 2.13. В случае аппарата поверхностных сил [147] он представляет зависимость полного внутреннего сдвигового напряжения в смазке $\sigma = \sigma_{el} + \sigma_v$ от амплитуды отклонения x_{max} , где σ_{el} и $\sigma_v = \eta_{eff}V/h$ — упругая и вязкая компоненты соответственно. Отсюда видно, что могут реализоваться две ситуации: при малых β кривая

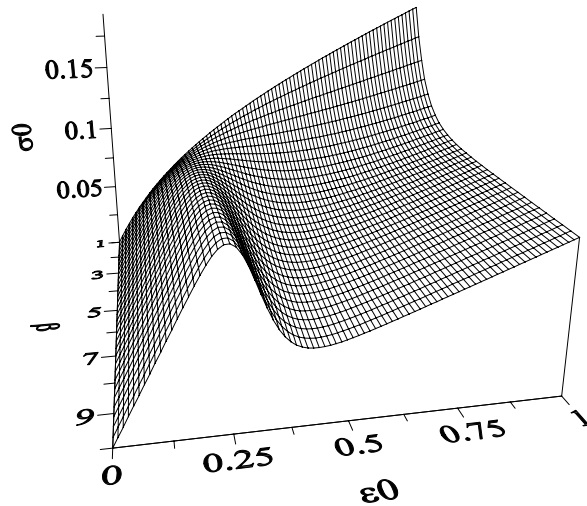


Рис. 2.13. Зависимость стационарного значения сдвиговых напряжений σ_0 от стационарного значения деформации ε_0 и параметра β (2.102) при $\theta = 0.2$, $g_\theta = 0.1$, $\alpha = 0.3$

$\sigma(\varepsilon)$ монотонно возрастает, а при

$$\beta > \frac{1 + \sqrt{\theta}}{1 - \sqrt{\theta}} \quad (2.103)$$

она становится немонотонной. В первом случае происходит непрерывное плавление смазки. Вторым случаем более детально представлен на рис. 2.14, согласно которому смазка при повышении напряжений до точки A скачкообразно плавится, и при этом происходит переход в точку B . При дальнейшем увеличении напряжений деформация монотонно возрастает, и смазка остается жидкоподобной. Если же теперь уменьшать напряжения, то до точки C смазка сохраняет жидкоподобную структуру, а затем она скачкообразно затвердевает при переходе в точку D . При дальнейшем уменьшении напряжений смазка твердоподобна. Подобные переходы представлены как фазовые переходы первого рода [153], но между состояниями, которые не являются истинными термодинамическими фазами. Для объяснения этих превращений вводится понятие сдвигового плавления [76]. Отметим, что такое гистерезисное поведение наблюдалось в экспериментах [89, 147, 148].

Используя (2.102), можно найти абсциссы точек перехода A и C :

$$\varepsilon_{A,C} = 2^{-1/\beta} \alpha \left[b(\beta - 1) - 2 \mp b\sqrt{(1 - \beta)^2 - 4\beta/b} \right]^{1/\beta}, \quad b = \theta^{-1} - 1, \quad (2.104)$$

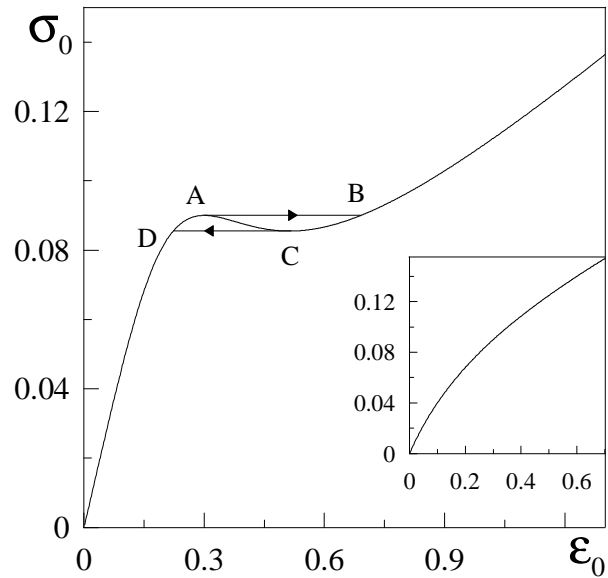


Рис. 2.14. Зависимость стационарного значения сдвиговых напряжений σ_0 от деформации ε_0 (2.102) при $\theta = 0.2$, $g_\theta = 0.1$, $\alpha = 0.3$, $\beta = 3.0$, на которой показано гистерезисное поведение. (Вставка к рисунку при $\beta = 1.0$)

где точке A отвечает знак '-', а точке C — знак '+'. Из (2.104) видно, что величина скачка при плавлении возрастает с ростом α , а с увеличением β разница $\varepsilon_A - \varepsilon_C \rightarrow 0$. Таким образом, при больших β (малых α) плавление и затвердевание осуществляются практически при одном и том же значении деформации ($\varepsilon_A \approx \varepsilon_C$), но при различных величинах напряжений σ . Как и ранее (см. подраздел 2.2), примем в качестве параметра порядка сдвиговое напряжение σ : при $\sigma > \sigma_A$ смазка жидкоподобна, а если $\sigma < \sigma_C$, то она твердоподобна. В промежуточной области $\sigma_C < \sigma < \sigma_A$ состояние смазки является неустойчивым, поскольку она может находиться в обеих фазах.

В рамках адиабатического приближения $\tau_\varepsilon, \tau_T \ll \tau_\sigma$ (2.18) можно положить $\tau_\varepsilon \dot{\varepsilon} \approx 0$, $\tau_T \dot{T} \approx 0$, и уравнения (2.16), (2.17) дают (2.21), (2.22). После подстановки выражения (2.21) в (2.15) получим уравнение Ландау–Халатникова (2.26), где синергетический потенциал

$$V = \frac{\sigma^2}{2} - g_\theta \int_0^\sigma \left[\sigma' - \frac{(2-T_e)\sigma'}{1+\sigma'^2} \right] \left[1 + \frac{\theta^{-1} - 1}{1 + (\sigma'/\alpha - \sigma'(2-T_e)/(\alpha + \alpha\sigma'^2))^\beta} \right] d\sigma'. \quad (2.105)$$

На рис. 2.15 приведена зависимость стационарных сдвиговых напряжений σ_0 от температуры поверхностей трения T_e . Ниже ее критического значения T_{c0} напряжения в смазке отсутствуют ($\sigma = 0$), и она твердоподобна. С дальнейшим возрастанием температуры до точки *A* напряжение увеличивается, но соответствует гукковскому упругому участку зависимости, приведенной на рис. 2.14, и, следовательно, смазка твердоподобна. При последующем росте температуры в интервале

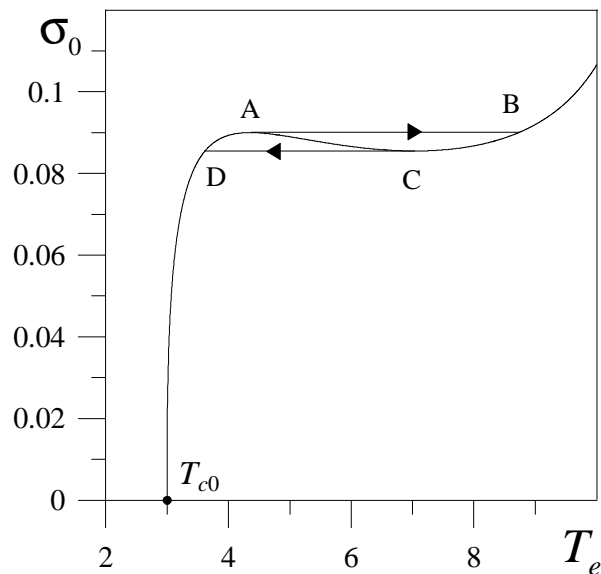


Рис. 2.15. Зависимость стационарного значения сдвиговых напряжений σ_0 от температуры поверхностей трения T_e при параметрах рис. 2.14

$T_{cA} < T_e < T_{cB}$ (T_{cA} , T_{cB} отвечают точкам *A*, *B*) напряжение сохраняется, и смазка не изменяет свою структуру. Выше T_{cB} реализуется пластический участок зависимости, показанной на рис. 2.14, смазка становится жидкоподобной. Если затем понижать температуру поверхностей трения, то до значения T_{cC} смазка жидкоподобна, далее до $T_e = T_{cD}$ напряжение сохраняется, и ниже этого значения она имеет твердоподобную структуру. Выражение для критической температуры T_{c0} получается из условия $\partial V / \partial \sigma = 0$, где V — синергетический потенциал (2.105): $T_{c0} = 1 + \theta / g_\theta \equiv 1 + G_0 / G$ (2.28).

В области температур $T_{cD} < T_e < T_{cB}$ смазка может быть как жидкоподобной, так и твердоподобной в зависимости от предыстории системы. В интервале

$T_{cA} < T_e < T_{cC}$, входящем в эту область, стационарные значения напряжений сохраняются. Очевидно, что равенство $\sigma_0 = \text{const}$ выполняется с увеличением температуры при $T_{cA} < T_e < T_{cB}$, поскольку для плавления смазки необходимо сообщить энергию. Сохранение напряжений в области $T_{cD} < T_e < T_{cC}$ при уменьшении температуры сдвигаемых поверхностей происходит, так как для перехода смазки в твердоподобное состояние она должна отдать энергию. Следует полагать, что твердоподобные структуры смазки ниже и выше точки T_{c0} отличаются, поскольку, согласно рис. 2.15, переход между ними происходит по механизму фазового перехода второго рода.

На рис. 2.16 показана зависимость потенциала (2.105) от величины напряжений при фиксированных температурах поверхностей трения. Первая кривая соответствует значению температуры ниже T_{c0} . Видно, что на ней реализуется единственный нулевой минимум, и в смазке напряжения отсутствуют, т.е. она твердоподобна. Кривая 2 соответствует температуре $T_{c0} < T_e < T_{cD}$, и здесь наблюдается ненулевой минимум потенциала, который отвечает гуковскому участку рис. 2.14. Это означает, что смазка также твердоподобна. Кривая 3 построена при $T_e > T_{cB}$ и характеризуется одним ненулевым минимумом потенциала. Поскольку при таких условиях система находится на участке пластического течения, смазка жидкоподобна.

Переход между первой и второй ситуацией, как видно, осуществляется по механизму фазового перехода второго рода, так как нулевой минимум превращается в ненулевой. Поскольку кривые 2, 3 имеют одинаковую форму, то переход между соответствующими режимами трения следует интерпретировать как кинетическое, а не фазовое превращение [153]. Таким образом, твердоподобная структура смазки при температуре ниже T_{c0} близка к твердому состоянию, твердоподобная же структура выше указанной температуры несет признаки жидкого состояния, но в целом смазка ведет себя как твердоподобная. При дальнейшем переходе к жидкостному режиму трения уменьшается вязкость смазки (2.7), и она течет.

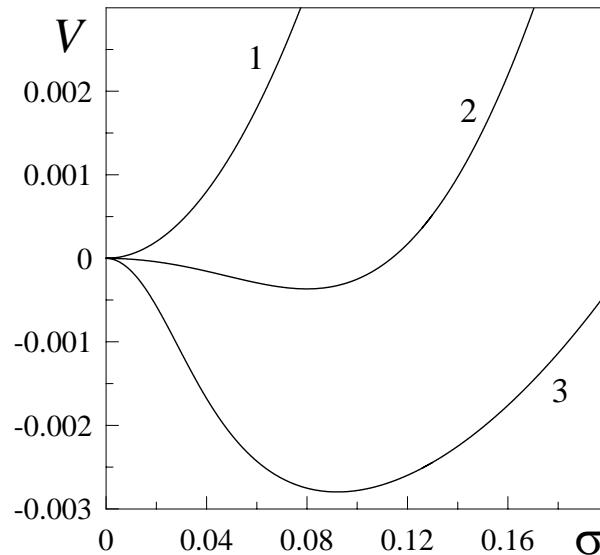


Рис. 2.16. Зависимость синергетического потенциала V (2.105) от величины сдвиговых напряжений σ при параметрах рис. 2.14 и $T_e = 1.0, 3.4, 9.0$ (кривые 1–3)

2.5.1.2. Непрерывное превращение

Рассмотрим теперь более простой случай непрерывного плавления смазки, когда не выполняется условие (2.103). При температуре поверхностей трения ниже значения (2.28) смазка твердоподобна, поскольку сдвиговые напряжения равны нулю. При $T_e > T_{c0}$ она начинает плавиться и становится жидкоподобной. С дальнейшим повышением температуры сдвиговые напряжения растут и, как следствие, наступает скольжение, соответствующее переходу на участок пластической деформации.

На рис. 2.17 приведены стационарные значения сдвиговых напряжений σ_0 при непрерывном превращении. Отсюда видно, что с увеличением коэффициента α при заданном значении температуры T_e реализуется большее значение стационарных напряжений. Соответственно, при больших $\alpha < 1$ смазка плавится быстрее, и такие смазки более предпочтительны для уменьшения трения. Согласно формуле (2.28), для уменьшения температуры плавления нужно уменьшать θ и увеличивать g_θ . Минимальное значение критической температуры сдвигаемых поверхностей ограничено величиной $T_{c0} = 1$ при $\theta \ll g_\theta$.

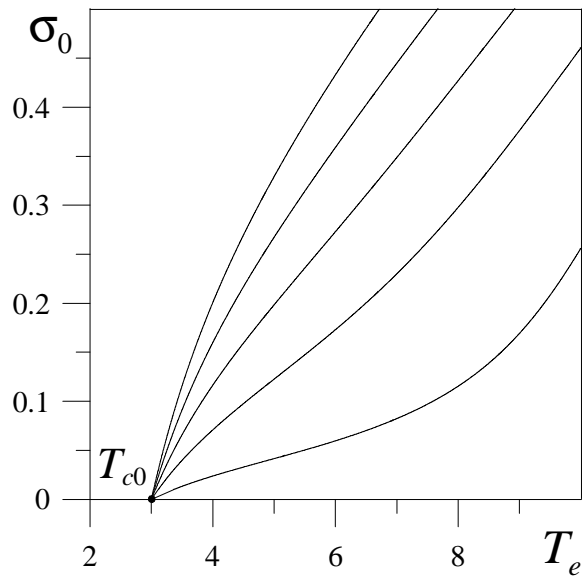


Рис. 2.17. Зависимость стационарного значения сдвиговых напряжений σ_0 от температуры поверхностей трения T_e в случае непрерывного превращения при $\theta = 0.2$, $g_\theta = 0.1$, $\beta = 1.0$ и $\alpha = 0.1, 0.3, 0.5, 0.7, 0.9$ (соответствующие кривые расположены справа налево)

Вид синергетического потенциала в данном случае качественно совпадает с показанным на рис. 2.16, поскольку он дается той же формулой (2.105). Твердоподобному состоянию смазки отвечает нулевой минимум потенциала, жидкоподобному — ненулевой минимум.

2.5.1.3. Фазовая кинетика

Координаты $\sigma - \varepsilon$ Согласно экспериментальным данным [7, 8, 47, 76], для органических смазочных материалов время релаксации напряжений при нормальном давлении составляет $\tau_\sigma \sim 10^{-10}$ с. Поскольку ультратонкая пленка смазки имеет менее четырех молекулярных слоев, температура релаксирует к значению T_e в течение времени, удовлетворяющего условию:

$$\tau_T \ll \tau_\sigma, \tau_\varepsilon. \quad (2.106)$$

Согласно этому, положим в уравнении (2.17) $\tau_T \dot{T} \approx 0$. Также для удобства измерим время в единицах τ_σ . В результате получим двухпараметрическую систему вида:

$$\dot{\sigma} = -\sigma + g(\varepsilon)\varepsilon, \quad (2.107)$$

$$\tau \dot{\varepsilon} = -\varepsilon + (T_e - 1 - \sigma\varepsilon + \sigma^2)\sigma, \quad (2.108)$$

где $\tau \equiv \tau_\varepsilon/\tau_\sigma$. Соответствующие фазовые портреты приведены на рис. 2.18 и 2.19 [44, 45].

На рис. 2.18 показаны фазовые портреты, описывающие поведение смазки в твердоподобном состоянии (при значении температуры поверхностей трения ниже T_{c0}), для различных соотношений времен релаксации τ . В частности, рис. 2.18а соответствует случаю $\tau = 0.01$. Штриховыми линиями 1 и 2 показаны изоклины, получаемые при приравнивании к нулю производных в уравнениях (2.107) и (2.108) соответственно. Таким образом, кривая 1 отвечает параметрам системы, при которых напряжения не изменяются, а линия 2 соответствует случаю сохранения деформации. Эти линии пересекаются в начале координат, образуя единственную стационарную точку D , которая является узлом. Видно, что фазовые траектории сходятся к узлу D , т.е. с течением времени напряжения релаксируют к нулевому значению. Причем при движении по фазовой плоскости при произвольных начальных условиях наблюдается два этапа: на первом происходит мгновенная релаксация системы к линии, близкой к изоклине 2, на втором — медленное движение по указанной кривой. На первом этапе напряжения сохраняются, что напоминает описанный в подпункте 2.5.1.1 переход между режимами трения. Отметим, что линия, по которой движется система на втором этапе, соответствует гуковскому участку зависимости $\sigma(\varepsilon)$. Таким образом, происходит медленный переход смазки из твердоподобной структуры, близкой к жидкости, в твердоподобную структуру, подобную твердому телу.

Фазовый портрет, показанный на рис. 2.18б, построен для случая, когда времена релаксации напряжений и деформации совпадают ($\tau = 1$). Он также характеризуется особой точкой D , представляющей узел. Здесь возможны случаи, когда

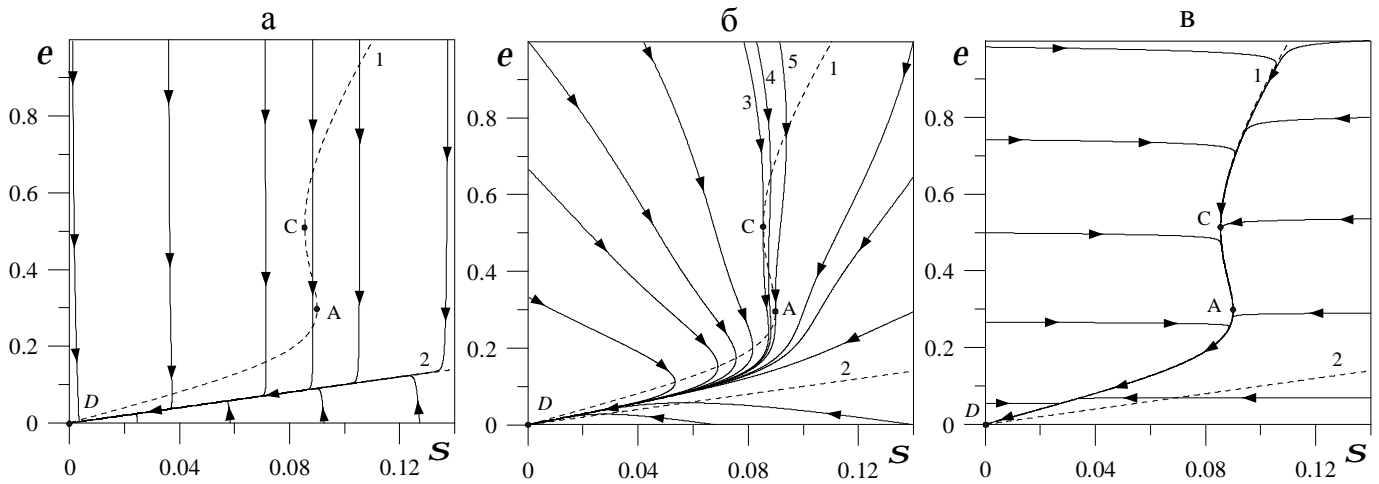


Рис. 2.18. Фазовые портреты при параметрах рис. 2.14 и $T_e = 2$: а — $\tau_T \ll \tau_\varepsilon = 0.01\tau_\sigma$; б — $\tau_T \ll \tau_\varepsilon = \tau_\sigma$; в — $\tau_T \ll \tau_\varepsilon = 100\tau_\sigma$

напряжения σ сначала увеличиваются, а потом уменьшаются, и обратный процесс. Это означает, что до того момента, когда система придет к равновесию (началу координат), представляется возможным прерывистое движение. Например, согласно фазовым траекториям, которые начинаются при $\sigma = 0$, смазка сначала твердоподобна (напряжения равны нулю), потом она начинает плавиться (напряжения возрастают), и затем опять затвердевает. Самый сложный тип прерывистого движения описывается фазовыми траекториями, расположенными между траекториями 3 и 5, которые являются касательными к изоклине 1. Здесь система ведет себя подобно кривой 4, т.е. напряжения сначала увеличиваются, затем уменьшаются (после первого пересечения изоклины 1), потом снова увеличиваются (после второго пересечения), и наконец релаксируют к нулю (после третьего и последнего пересечения).

Рисунок 2.18в отвечает случаю $\tau = 100$. Здесь, как и на рис. 2.18а, выделены два этапа: быстрая релаксация к линии, близкой к изоклине 1, и далее медленное движение по ней. На первом этапе деформация слабо изменяется, а напряжения очень быстро уменьшаются, если начальные их значения σ правее изоклины 1, либо увеличиваются при начальных σ левее нее. На втором этапе в верхней части фазового портрета (выше точки С) конфигуративная точка движется по пластиче-

скому участку, ниже A происходит движение по гуковскому. На последнем участке система находится более длительное время, поскольку он ближе к изоклине, чем первый.

На рис. 2.19 приведены портреты для таких же параметров и соотношений времен релаксации, как и на рис. 2.18, но при температуре, соответствующей участку пластической деформации ($T_e > T_B$). Здесь реализуется жидкостное трение, и с течением времени устанавливается ненулевое стационарное значение сдвиговых напряжений $\sigma_0 \neq 0$, отвечающее минимуму потенциала. Как и ранее, линии 1 и 2 являются изоклинами фазовых траекторий. Фазовые портреты характеризуются двумя особыми точками — седлом D в начале координат и узлом O при ненулевых значениях напряжений и деформации, которые даются пересечением изоклин.

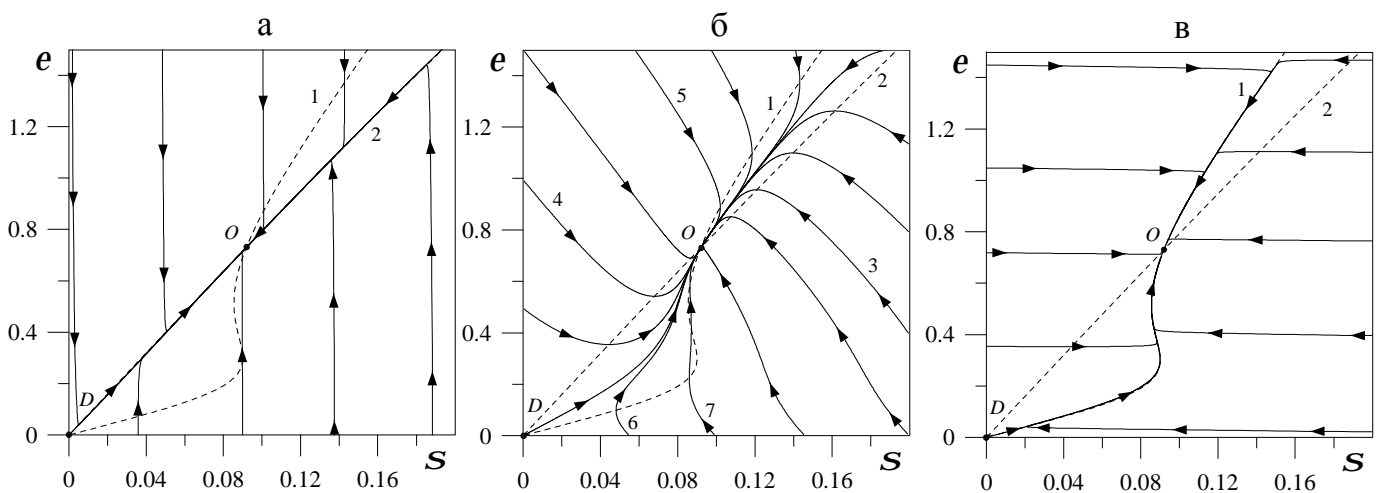


Рис. 2.19. Фазовые портреты при параметрах рис. 2.14 и $T_e = 9$: а — $\tau_T \ll \tau_\varepsilon = 0.01\tau_\sigma$; б — $\tau_T \ll \tau_\varepsilon = \tau_\sigma$; в — $\tau_T \ll \tau_\varepsilon = 100\tau_\sigma$

При $\tau = 0.01$ наблюдается картина, показанная на рис. 2.19а. Здесь, как и на рис. 2.18а, фазовые траектории быстро сбегаются к линии, близкой к изоклине 2 из любой точки фазовой плоскости при сохранении напряжений. Далее система релаксирует к ненулевому значению $\sigma_0 \neq 0$, и устанавливается стационарное жидкостное трение. Однако прямая, по которой осуществляется движение на втором этапе, отвечает пластическому участку зависимости $\sigma(\varepsilon)$, т.е. система всегда жидкоподобна, за исключением только тех случаев, когда начальное значение напря-

жений находится вблизи нуля (происходит плавление). Отметим, что с течением времени смазка становится более жидкой, если $\sigma_i < \sigma_0$, и, наоборот, более вязкой при $\sigma_i > \sigma_0$, где σ_i и σ_0 — начальное и стационарное значения напряжений.

Как видно из рис. 2.19б, для $\tau = 1$ при установлении равновесного значения напряжений и деформации возможны следующие случаи: смазка становится более вязкой со временем (кривая 3), она плавится (кривая 4), и реализуются различные прерывистые режимы трения (кривые 5, 6, 7).

На рис. 2.19в приведен фазовый портрет для $\tau = 100$, где, как и на рис. 2.18в, видны два этапа. Основное отличие этих рисунков состоит в том, что на первом пластический участок ближе к изоклине, и при эволюции система находится на нем более продолжительное время, чем на гуковском. Стационарная точка O расположена на пластическом участке.

Координаты $\dot{\sigma} - \sigma$ Исследуем кинетику системы, проследив эволюцию напряжений и скорости их изменения [44]. Для этого из двух дифференциальных уравнений первого порядка (2.107), (2.108), зависящих от напряжения σ и деформации ε , получим уравнение второго порядка для σ . С этой целью из (2.107) необходимо выразить ε через σ и записать производную по времени от этого выражения. Далее, подставив полученные зависимости $\varepsilon(\sigma, \dot{\sigma})$, $\dot{\varepsilon}(\sigma, \dot{\sigma})$ в (2.108), найдем искомое уравнение. Однако аналитически выразить ε из (2.107) не представляется возможным. Поэтому воспользуемся выражением (2.50), описывающим непрерывное плавление, и получим искомое уравнение в виде:

$$A\ddot{\sigma} + B\dot{\sigma}^2 + C\dot{\sigma} + D = 0, \quad (2.109)$$

$$A \equiv \frac{\tau}{g\theta} \left[\frac{1 + (\sigma/\alpha)^\beta}{\theta^{-1} + (\sigma/\alpha)^\beta} \right], \quad B \equiv \frac{\tau\beta}{g\theta\alpha^\beta} \left[\frac{(\theta^{-1} - 1)\sigma^{\beta-1}}{(\theta^{-1} + (\sigma/\alpha)^\beta)^2} \right],$$

$$C \equiv A\tau^{-1} [\tau + 1 + \sigma^2] + \sigma B, \quad D \equiv A\tau^{-1}\sigma [1 + \sigma^2] - \sigma(T_e - 1 + \sigma^2).$$

Оно описывает реактивно—диссипативный режим поскольку имеет первую и вторую производные по времени. Соответствующие фазовые портреты представлены на рис. 2.20. Здесь штриховая кривая 1 является изоклиной, на которой скорость

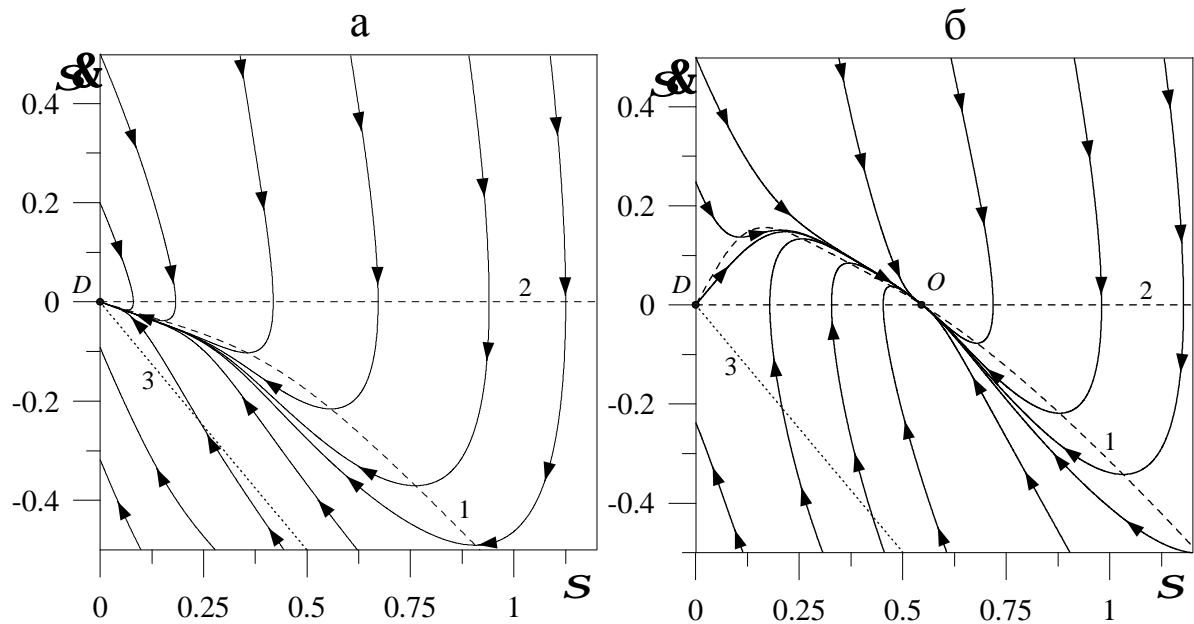


Рис. 2.20. Фазовые портреты при параметрах рис. 2.14 и использовании зависимости (2.50) для $\tau_\varepsilon = \tau_\sigma$: а — $T_e = 2$; б — $T_e = 9$

изменения напряжений остается постоянной ($\ddot{\sigma} = 0$). Штриховая прямая 2 отвечает изоклине, где напряжения не изменяются ($\dot{\sigma} = 0$). Поскольку в уравнении (2.109) деформация в явном виде отсутствует, то ее начальные значения задаются с помощью σ , $\dot{\sigma}$. Оказывается, что области ниже пунктирной прямой 3, определяемой равенством $\dot{\sigma} = -\sigma$, соответствуют отрицательные значения деформации. Поэтому некоторые фазовые траектории, начинающиеся ниже указанной линии выходят в отрицательную область напряжений. Как видно из рис. 2.20, хотя и не все траектории ведут себя таким образом, все же начальные условия следует выбирать не ниже указанной прямой. Это связано с тем, что в предлагаемом в данном подразделе подходе рассматриваются только положительные значения напряжений и деформации.

На рис. 2.20а представлен фазовый портрет, отвечающий температуре ниже критической T_{c0} (2.28). Здесь смазка твердоподобна, и наблюдается релаксация σ к узлу D в начале координат. Согласно фазовым траекториям, при этом также возможно прерывистое движение.

Случаю, когда температура T_e выше T_{c0} , и смазка жидкоподобна, соответ-

ствуется фазовый портрет, показанный на рис. 2.20б. Он характеризуется двумя особыми точками — седлом D и устойчивым узлом O . Система со временем при произвольных начальных условиях (выше прямой 3) приходит к стационарному состоянию, соответствующему точке O , и далее напряжения не изменяются ($\dot{\sigma} = 0$). Видно, что релаксация напряжений может происходить при наличии прерывистых режимов трения смазки.

2.5.2. Фазовый переход первого рода

Рисунок 2.15 отвечает случаю фазового перехода второго рода, потому как в точке T_{c0} происходит непрерывный переход, и напряжения при этом становятся ненулевыми. В случае фазового перехода первого рода зависимость стационарных значений сдвиговых напряжений σ_0 от деформации ε_0 (2.102) качественно совпадает с показанной на рис. 2.13, 2.14 [43]. На рис. 2.3 приведена зависимость стационарных сдвиговых напряжений σ_0, σ^m от температуры поверхностей трения T_e . Отметим, что $\sigma^m(T_e)$ соответствует гуковскому участку функции $\sigma_0(\varepsilon_0)$. Отличительной особенностью такого поведения является то, что гуковский участок зависимости весь является неустойчивым, так как отвечает максимуму потенциала, и существует только один тип твердоподобного состояния смазки с нулевым значением напряжений. Как и ранее, система описывается потенциалом (2.105). Зависимость потенциала (2.105) от величины напряжений при фиксированных температурах поверхностей трения качественно совпадает с приведенной на рис. 2.2.

Для исследования поведения системы до установления стационарного состояния проведем анализ уравнений (2.107) и (2.108) методом фазовой плоскости для различных T_e [43].

При этом фазовые портреты в области температур $T_e < T_c^0$ оказываются аналогичными приведенным на рис. 2.18. Кинетика системы в температурной области $T_e > T_{c0}$ рисунка 2.3, соответствующей устойчивому жидкостному трению, качественно совпадает с показанной на рис. 2.19. Наблюдается жидкостное трение, и

с течением времени устанавливается ненулевое стационарное значение сдвиговых напряжений $\sigma_0 \neq 0$, отвечающее минимуму синергетического потенциала $V(\sigma)$.

Рисунок 2.21 отвечает температуре, соответствующей участку $T_c^0 < T_e < T_{c0}$ рис. 2.3, на котором реализуются устойчивые и неустойчивые значения стационарных сдвиговых напряжений. Потенциал системы в этом случае имеет вид, показан-

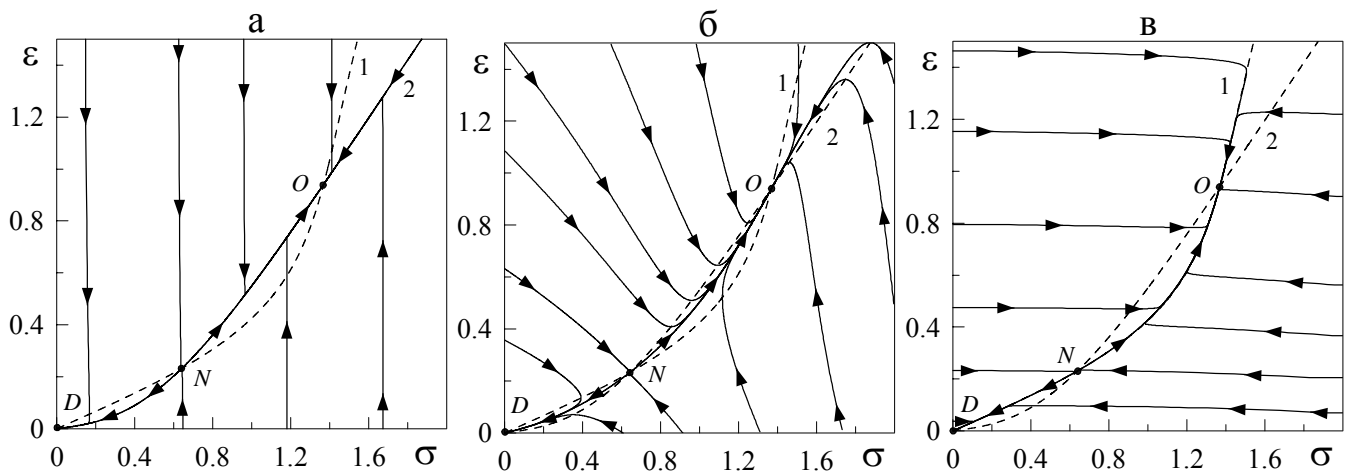


Рис. 2.21. Фазовые портреты при параметрах $\theta = 0.2$, $g_\theta = 0.6$, $\alpha = 0.7$, $\beta = 2.0$ и $T_e = 1.1$: а — $\tau_T \ll \tau_\epsilon = 0.01\tau_\sigma$; б — $\tau_T \ll \tau_\epsilon = \tau_\sigma$; в — $\tau_T \ll \tau_\epsilon = 100\tau_\sigma$

ной кривой 3 на рис. 2.2. Как и ранее, линии 1 и 2 являются изоклинами. Фазовые портреты характеризуются тремя особыми точками: узлом D в начале координат, который описывает сухое трение; седлом N , соответствующим максимуму зависимости $V(\sigma)$ (неустойчивая стационарная точка); узлом O , отвечающим ненулевым стационарным напряжениям, которые соответствуют участку пластического течения зависимости $\sigma_0(T_e)$, приведенной на рис. 2.3. Эти точки даются пересечением изоклин. В зависимости от начальных условий система в результате релаксации может прийти как к режиму устойчивого сухого трения (узел D), так и к режиму жидкостного трения (точка O).

При $\tau = 0.01$ наблюдается картина, показанная на рис. 2.21а. Здесь, как и на рис. 2.19а, фазовые траектории быстро сбегаются к линии, близкой к изоклине 2 из любой точки фазовой плоскости при сохранении напряжений. Далее система релаксирует к узлам D или O , и устанавливается определяемый этими то-

чками стационарный режим трения. Наклон кривой, по которой осуществляется движение на втором этапе зависит от начальных условий. Так, к точке O система релаксирует по пластическому участку изоклины 2, к точке D — по ее гуковскому участку. Отметим, что с течением времени смазка становится более жидкой, если $\sigma_N < \sigma_i < \sigma_O$, и наоборот более вязкой при $\sigma_i > \sigma_O$, где σ_i и σ_O — начальное и стационарное значения напряжений. В этих случаях система приходит к особой точке O . При $\sigma_i < \sigma_N$ смазка со временем затвердевает, и реализуется сухое трение (точка D).

Как видно из рис. 2.21б, для $\tau = 1$ при установлении равновесного значения напряжений и деформации возможно прерывистое движение.

На рис. 2.21в приведен фазовый портрет для $\tau = 100$, где, как и ранее, видны два этапа. Сначала напряжения быстро релаксируют к изоклине 1, а затем осуществляется медленное движение до установления стационарного состояния. Так как изоклины 1 и 2 не имеют качественных отличий (на обоих реализуется пластический и гуковский участок зависимости $\sigma_0(\varepsilon_0)$), поведение системы на этом рисунке качественно совпадает с описанным для $\tau = 0.01$ (рис. 2.21а). Отличие состоит в том, что на первом этапе здесь постоянна деформация, а не напряжения.

На вид фазовых портретов существенное влияние оказывает величина параметра β . На рисунке 2.22 приведен фазовый портрет при $\beta = 100$. По виду изоклины 1 можно заключить, что гуковский и пластический участки на соответствующей диаграмме нагружения становятся при этом более выраженными. Однако основное отличие этого случая от приведенного на рисунке 2.21б состоит в том, что точка O представляет не узел, а фокус, описывающий релаксационные колебания вплоть до установления равновесия. Такие колебания соответствуют stick—slip режиму трения. При увеличении параметра β фазовые траектории вокруг фокуса растягиваются вдоль оси напряжений, при этом амплитуда stick—slip переходов возрастает. Релаксационные временные зависимости напряжений для параметров рисунка 2.22 приведены на рис. 2.23, согласно которому с увеличением β колебания характеризуются большей частотой. На рисунке 2.23г зависимость $\sigma(t)$ ста-

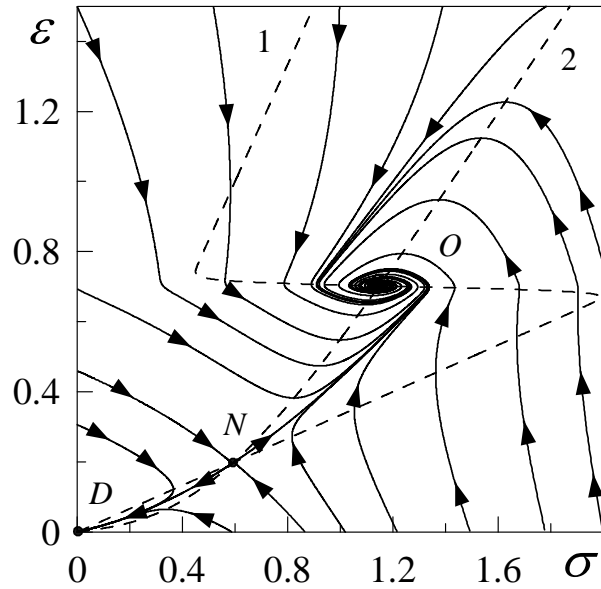


Рис. 2.22. Фазовый портрет при параметрах рис. 2.21б и $\beta = 100$

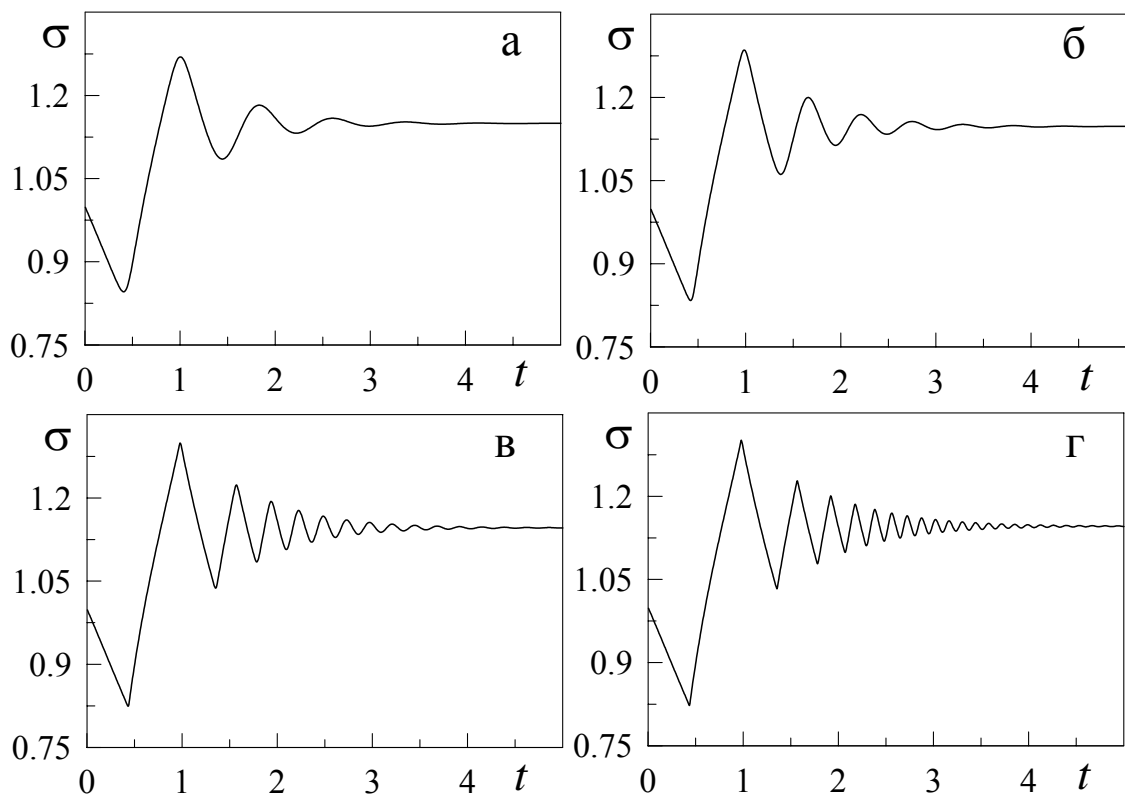


Рис. 2.23. Релаксационные зависимости $\sigma(t)$, полученные при совместном решении уравнений (2.107) и (2.108) для параметров рис. 2.22. Рисунки а, б, в, г соответствуют значениям параметра $\beta = 50, 100, 500, 1500$ соответственно

новится пилообразной, что наблюдается в экспериментах. Режим, в котором при постоянных скоростях сдвига прерывистое трение со временем сменяется скольжением, обнаружен экспериментально [6].

2.6. Влияние температурной зависимости вязкости

2.6.1. Соотношение Фогеля–Фулчера

При выводе системы (2.15) – (2.17) использовалась простейшая температурная зависимость для вязкости η в размерных величинах (2.7) [116]. В этом подразделе процесс плавления смазки описан при различных зависимостях $\eta(T)$, которые проявляются в реальных системах [46]. Согласно экспериментальным данным, функция $\eta(T)$ определяется либо степенным выражением

$$\eta(T) = \frac{\eta_0}{(T/T_c - 1)^\gamma}, \quad (2.110)$$

которое обобщает ранее использованную формулу (2.7), либо соотношением Фогеля–Фулчера

$$\eta(T) = \eta'_0 \exp \frac{B'}{(T - T_c)^\alpha}, \quad (2.111)$$

где $\gamma, \eta'_0, B', \alpha$ — положительные постоянные [9, 115–117]. Причем физический смысл имеет только соотношение Фогеля–Фулчера, которое является эмпирическим, но объясняется в рамках теорий свободного объема и избыточной конфигурационной энтропии [115, 117]. Однако степенное выражение часто используется, поскольку хорошо описывает поведение вязкости вблизи точки перехода T_c . Оно более простое математически, что облегчает дальнейшие вычисления и позволяет аналитически получить менее громоздкие выражения для температуры плавления и других параметров, которые близки к истинным.

При использовании соотношения (2.111) и введении безразмерных постоянных $A \equiv \tau_\varepsilon G_0 / \eta'_0$, $B \equiv B' T_c^{-\alpha}$ уравнения (2.15), (2.17) не изменятся, а (2.16)

принимает вид:

$$\tau_e \dot{\varepsilon} = -\varepsilon + A\sigma \exp \left[-\frac{B}{(T-1)^\alpha} \right]. \quad (2.112)$$

Для анализа модифицированной системы используем адиабатическое приближение (2.18). Тогда левые части уравнений (2.112), (2.17) можно приравнять к нулю. В результате зависимость температуры T от напряжений σ задается выражением:

$$\sigma = \sqrt{\frac{T_e - T}{A \exp \left[-\frac{B}{(T-1)^\alpha} \right] - 1}}. \quad (2.113)$$

Анализ выражения (2.113) показывает, что при определенном соотношении параметров α , A и B существует характерная температура T_e :

$$T^0 = 1 + \sqrt[\alpha]{\frac{B}{\ln A}}. \quad (2.114)$$

Выше этого значения с ростом σ происходит уменьшение температуры T , ниже его — увеличение T . В случае, когда параметры таковы, что величина T^0 отрицательная или комплексная, при увеличении напряжений σ температура смазки T монотонно растет, причем всегда $T > T_e$.

Положим $\alpha = 2$, тогда, согласно (2.114), для существования T^0 необходимо выполнение условия $A > 1$. При $A = 2$ и $B = 1$ формула (2.113) принимает графический вид, показанный на рисунке 2.24, где кривая 1 отвечает значению $T_e < T^0$, а кривая 2 — $T_e > T^0$. Штриховая прямая на рисунке $T_e = T^0$ является асимптотой для указанных зависимостей, так как с увеличением σ температура смазки T приближается к значению T^0 .

Зависимость деформации от напряжений $\varepsilon(\sigma)$ задается равенством

$$\varepsilon(\sigma) = \sigma + \frac{T_e - T(\sigma)}{\sigma}, \quad (2.115)$$

где связь $T(\sigma)$ определяется из соотношения (2.113). При малых значениях температуры сдвигаемых поверхностей $T_e < T^0$ в области $\sigma \ll 1$ наблюдается закон Гука $\varepsilon \sim \sigma$, при дальнейшем увеличении σ деформация уменьшается до нуля⁶, и далее

⁶Спадающий участок зависимости $\varepsilon(\sigma)$ не имеет физического смысла.

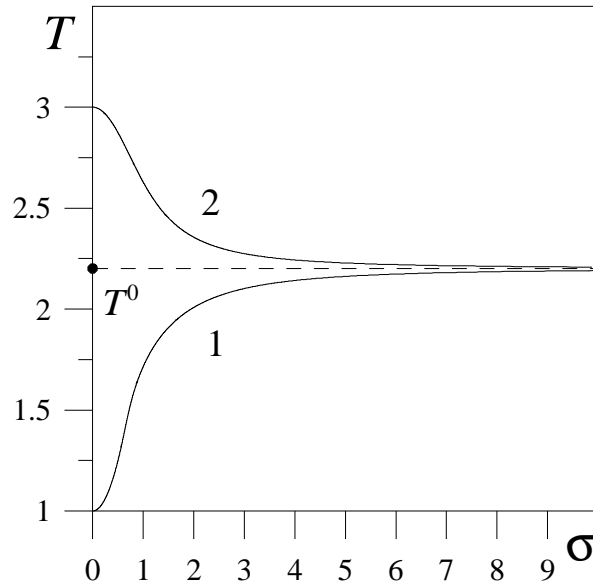


Рис. 2.24. Зависимость температуры смазки от сдвиговых напряжений (2.113) при $\alpha = A = 2$, $B=1$. Кривые 1, 2 отвечают температурам $T_e = 1, 3$ соответственно; штриховая прямая представляет характерное значение температуры $T_e = T^0 = 1 + (\ln 2)^{-1/2}$

снова имеем линейно возрастающий участок. При $T_e \geq T^0$ зависимость $\varepsilon(\sigma)$ имеет монотонно возрастающий характер, принимающий при малых и больших значениях напряжений линейный вид.

После подстановки (2.115) в (2.15) получаем уравнение типа Ландау–Халатникова (2.26), где синергетический потенциал имеет вид (ср. с (2.27))

$$V = \frac{1}{2}(1 - g)\sigma^2 + g \int_0^\sigma \frac{T(\sigma') - T_e}{\sigma'} d\sigma', \quad (2.116)$$

в котором зависимость $T(\sigma)$ определяется соотношением (2.113). В стационарном состоянии выполняется условие $\dot{\sigma} = 0$, и потенциал (2.116) принимает минимальное значение. При температуре T_e меньше, определяемой равенством

$$T_{c0} = 1 + \frac{1}{\sqrt{\ln 2g}}, \quad (2.117)$$

этот минимум соответствует напряжениям $\sigma = 0$, при этом плавление не происходит, и реализуется твердоподобное состояние смазки. В противном случае $T_e > T_{c0}$

стационарное значение напряжений отлично от нуля

$$\sigma_0 = \left(\frac{g(T_e - T_0)}{1 - g} \right)^{1/2}, \quad g < 1, \quad (2.118)$$

и возрастает с T_e согласно корневой зависимости. Это приводит к плавлению смазки и ее переходу в жидкоподобное состояние. Стационарное значение температуры T_0 совпадает с критическим значением T_{c0} , но отличается от ранее найденного характерного значения температуры T^0 (2.114). Соответствующая деформации составляет:

$$\varepsilon_0 = \left(\frac{T_e - T_0}{g(1 - g)} \right)^{1/2}. \quad (2.119)$$

Согласно (2.117), если константа $g \leq 0.5$, то плавление смазки не происходит, так как температура T_{c0} становится комплексной величиной. Зависимости стационарных сдвиговых напряжений от температуры поверхностей трения для различных значений параметра g качественно совпадают с показанными на рис. 2.1б. Эти зависимости отвечают фазовому переходу второго рода. Следует отметить, что в подразделе 2.2 значение T_{c0} задавалось условием $T_{c0} = 1 + g^{-1}$ (2.28), которое существенно отличается от полученного здесь.

Зависимость синергетического потенциала V от напряжений σ (2.116) аналогична показанной на рис. 2.1а. Кривая 1 отвечает значению температуры $T_e < T_{c0}$, и соответствует твердоподобному состоянию смазки, так как минимум потенциала реализуется при $\sigma = 0$. Это видно из рис. 2.1б, на котором при $T_e < T_{c0}$ стационарные напряжения принимают только нулевое значение. Кривая 2 на рис. 2.1а построена при $T_e > T_{c0}$ и соответствует жидкоподобному состоянию смазки, поскольку на ней реализуется ненулевой минимум потенциала.

При рассмотрении общего случая, не задаваясь конкретными значениями α, A, B , во всех предыдущих выражениях $T(\sigma)$ определяется зависимостью (2.113), и критическая температура $T_{c0} = T_0$ принимает вид:

$$T_{c0} = 1 + \sqrt[\alpha]{\frac{B}{\ln g A}}. \quad (2.120)$$

Отсюда видно, что для существования температуры T_{c0} необходимо выполнение

условия $gA \equiv \tau_\varepsilon G/\eta'_0 > 1$. При этом значение T_{c0} тем меньше, чем больше произведение gA . Следовательно, уменьшения трения следует ожидать в системах с большим значением gA . Однако поскольку радикал вносит положительный вклад в выражение (2.120), критическая температура ограничена минимальным значением $T_{c0} = 1$.

2.6.2. Степенная зависимость

В предыдущем пункте была рассмотрена температурная зависимость вязкости $\eta(T)$, которая задается соотношением Фогеля–Фулчера (2.111). Используем теперь степенную зависимость для аппроксимации $\eta(T)$ (2.110). При этом в исходной системе (2.15) – (2.17) второе уравнение принимает вид

$$\tau_\varepsilon \dot{\varepsilon} = -\varepsilon + (T - 1)^\gamma \sigma. \quad (2.121)$$

Тогда в рамках адиабатического приближения (2.18) получим зависимость $T(\sigma)$, подобную (2.113),

$$\sigma = \sqrt{\frac{T_e - T}{(T - 1)^\gamma - 1}}. \quad (2.122)$$

Эта функция при любых γ по характеру поведения качественно повторяет (2.113), приведенную на рис. 2.24, с той лишь разницей, что характерное значение температуры T^0 задается равенством $T^0 = 2$. Зависимость $\varepsilon(\sigma)$ находится из условия (2.115), где $T(\sigma)$ дается выражением (2.122), и имеет характер, описанный в предыдущем пункте.

Как и ранее, получим уравнение Ландау–Халатникова (2.26), где синергетический потенциал имеет вид (2.116). Зависимость $T(\sigma)$ определяется соотношением (2.122). Критическая температура

$$T_{c0} = 1 + g^{-1/\gamma}, \quad (2.123)$$

как и при использовании формулы Фогеля—Фулчера, совпадает со стационарным значением T_0 . Стационарные значения напряжений и деформации даются соотношениями (2.118), (2.119). Таким образом, при степенной зависимости $\eta(T)$ наблюдается аналогичный характер поведения системы с отличием в значениях критической T_{c0} , стационарной T_0 и характерной T^0 температур. На рис. 2.25 приведены зависимости критической температуры T_{c0} от параметра γ для различных значений $g < 1$. Видно, что T_{c0} уменьшается с ростом γ и g . Причем при больших значе-

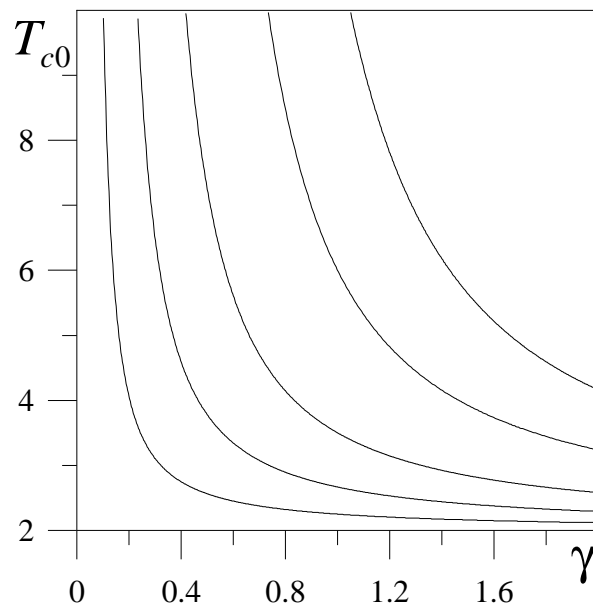


Рис. 2.25. Зависимость критической температуры T_{c0} от параметра γ (2.123). Кривые, расположенные справа налево, соответствуют значениям $g=0.1, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8$

ниях γ температура T_{c0} асимптотически приближается к минимально возможному значению $T_{c0} = T^0 = 2$. Поскольку выше температуры T_{c0} происходит плавление смазки, уменьшение трения следует ожидать в системах с большими значениями $g < 1$ и $\gamma > 0$. При малых величинах γ критическая температура T_{c0} расходится, и смазка представляет собой твердоподобную структуру при любых реальных температурах T_e поверхностей трения.

В данном подразделе проанализированы наиболее часто используемые температурные зависимости вязкости $\eta(T)$ (2.110) и (2.111), и найдены соответствую-

ющие температуры плавления T_{c0} . Показано, что поведение системы в обоих случаях не имеет существенных качественных отличий. Поскольку целью диссертации является качественное описание явлений, происходящих в ультратонких пленках смазки (эффекты памяти, прерывистый режим движения, различие температур плавления по сравнению с объемными смазками и т.п.), то будем далее пользоваться простейшей зависимостью (2.7), которая приводит к уравнению (2.16), и считать, что для качественного уровня описания этого достаточно.

2.7. Выводы

1. Показано, что процесс плавления смазки, заключенной между атомарно-гладкими кристаллическими поверхностями, обусловлен самоорганизацией сдвиговых компонент полей напряжений σ и деформации ε , с одной стороны, и температуры T смазки, с другой. Таким образом, сдвиговые напряжения играют роль параметра порядка, сопряженное поле сводится к сдвиговым деформациям, а температура является управляющим параметром. Исходной причиной самоорганизации является положительная обратная связь T и σ с ε (см. (2.16)). Согласно соотношениям (2.6) и (2.7), она обусловлена температурной зависимостью сдвиговой вязкости, которая приводит к расходимости последней. Плавление рассматривается как фазовые переходы первого и второго родов, представляющие плавление кристаллической и аморфной смазки. В рамках модели Лоренца вязкоупругой среды фазовый переход второго рода описывается, если принять постоянным модуль сдвига смазки. Показано, что в этом случае, в соответствии с экспериментом, жидкоподобное состояние смазки, соответствующее стационарному (но не равновесному) упорядоченному состоянию, реализуется при температурах поверхностей трения, превышающих критическое значение T_{c0} (2.28).

2. Описаны пространственные зависимости сдвиговых напряжений и деформации, а также температуры в пленке смазки. Используемый подход основан на уравнении Гинзбурга—Ландау—Халатникова (2.42), определяемом синергетиче-

ским потенциалом (2.43).

3. Учитывая зависимость модуля сдвига от напряжений (деформационный дефект модуля сдвига), описан фазовый переход первого рода, представляющий плавление кристаллической смазки. Он реализуется в интервале температур трущихся поверхностей между T_c^0 (2.55), (2.62) и T_{c0} (2.28). При этом стационарные жидкоподобное и твердоподобное состояния разделены потенциальным барьером. Действительная термодинамическая температура плавления находится в диапазоне (T_c^0, T_{c0}) и может быть найдена из условия равенства потенциалов твердоподобного и жидкоподобного состояний $V(0) = V(\sigma_0)$. Как видно из выражения (2.28), системы, предрасположенные к плавлению, имеют большие значения модуля сдвига G и малые значения характерной сдвиговой вязкости η_0 .

4. Кинетика рассматриваемого перехода определяется уравнением типа Ландау–Халатникова (2.26), где синергетический потенциал имеет вид (2.27) для фазового перехода второго рода и (2.54), (2.61), (2.66) для фазового перехода первого рода. В переохлажденной жидкости с $\eta_\sigma = \infty$ замораживание системы может происходить ($\dot{\sigma} \rightarrow 0$) даже в нестационарном состоянии $\partial V / \partial \sigma \neq 0$.

5. Проведено исследование фазовых портретов системы в различных кинетических режимах плавления смазки. Показано, что для фазового перехода первого и второго родов релаксационное прерывистое движение реализуется, если время релаксации температуры смазки превышает его значение для сдвиговых напряжений и деформации. В противоположном случае система быстро релаксирует к универсальному участку.

6. Показано, что гистерезис при плавлении тонкой пленки смазки по механизму фазовых переходов первого и второго родов может быть описан при учете зависимости модуля сдвига от деформации. Основная особенность такого поведения состоит в том, что смазка плавится и затвердевает при различных значениях сдвигового напряжения, которое является параметром порядка. Показано, что может реализоваться как скачкообразное плавление смазки, когда внутреннее сдвиговое напряжение превышает определенное критическое значение, так и

непрерывное плавление.

7. Согласно зависимости стационарного напряжения от температуры поверхностей трения, существуют два режима поведения смазки — твердоподобный и жидкоподобный. Первый отвечает гуковскому участку диаграммы нагружения, и второй — участку пластического течения. Скачкообразное плавление характеризуется гистерезисом зависимостей стационарного напряжения от деформации и температуры поверхностей трения, который наблюдается в экспериментах. Найдены параметры системы, при которых реализуется гистерезисное поведение.

8. При различных отношениях времен релаксации сдвиговых напряжений и деформации, которые задаются толщиной пленки, построены фазовые портреты системы, позволяющие проследить эволюцию напряжений и деформации, а также скорости изменения напряжений. Устойчивые стационарные состояния смазки, которые представляются фокусами фазовой плоскости, достигаются в результате релаксационных периодических изменений напряжений и деформации, описывающих прерывистое трение. Определены упругие и тепловые параметры, при которых в результате прерывистого движения устанавливается жидкостное или сухое трение. К твердоподобному состоянию система медленно релаксирует по гуковскому участку, к жидкоподобному — по пластическому.

9. Рассмотрены температурные зависимости вязкости в виде закона Фогеля—Фулчера и степенного выражения. Определены выражения для критической температуры поверхностей трения, выше которого смазка плавится, и она переходит из твердоподобного в жидкоподобное состояние. Найдены параметры, при которых происходит уменьшение трения.

Результаты, представленные в данном разделе, опубликованы в работах [33–46]. Личный вклад соискателя в соответствующих работах состоит в следующем: [33] — принимал участие в подготовке и систематизации материала к разделу 1 "Теория самоорганизующихся систем", подразделу 2.8 "Взрывная кристаллизация ультрадисперсных аморфных пленок"; [34] — провел аналитическое и численное исследование фазовых портретов, которые представляют кинетику фазо-

вого перехода; [35] — использованы основные уравнения для описания плавления ультратонкой пленки смазки, проведено исследование условий плавления; [36] — выполнил анализ основных уравнений эволюции упругого и теплового полей при плавлении ультратонкой пленки смазки, провел исследование влияния деформационного дефекта модуля сдвига смазки на плавление; [39] — принимал участие в получении основных и расчетных уравнений; [40] — проведено аналитическое исследование фазовых портретов, которые представляют кинетику фазового перехода; [41] — проведено исследование зависимостей стационарных значений основных параметров в случае фазового перехода первого рода; [42] — исследовано гистерезисное поведение на основе полученных зависимостей стационарных напряжений от деформации; [43] — исследовал фазовую кинетику смазки; [44] — исследованы гистерезисное поведение на основе полученной зависимости стационарных напряжений от температуры поверхностей трения и непрерывное превращение; [46] — исследовано влияние температурной зависимости вязкости в виде соотношения Фогеля—Фулчера.

РАЗДЕЛ 3

ВЛИЯНИЕ ФЛУКТУАЦИЙ НА ПЛАВЛЕНИЕ УЛЬТРАТОНКОЙ ПЛЕНКИ СМАЗКИ

3.1. Влияние аддитивного некоррелированного шума

3.1.1. Уравнения Ланжевена и Фоккера–Планка

В данном разделе при помощи учета случайного характера изменения сдвиговых компонент напряжений σ и деформации ε и температуры T объяснена прерывистая динамика смазки, привлекающая в последнее время повышенное внимание как на атомарном [8, 154, 155], так и на макроскопическом [75, 76] уровне, а также для гранулированных сред [156–158]. В соответствии с [76] полное среднеквадратичное смещение представляет сумму выражений (2.24) и (2.25) при условии, что тепловые флуктуации и напряжения независимы. Таким образом, флуктуации деформаций, связанные с колебаниями напряжений, и тепловые флуктуации следует рассматривать независимо.

Stick–slip режим, при котором сила трения F изменяется со временем периодически показан нижней панелью рисунка 1.3. Случайное изменение F обнаружено методом молекулярной динамики [81] (рис. 3.1). Подобный нерегулярный режим наблюдался в экспериментах [6], в которых в качестве смазки использовалась пленка тетрадекана толщиной 0.8 нм, что соответствует двум монослоям вещества, и скорость сдвига близка к критическому значению. Очевидно, данный режим вызван флуктуациями, которые оказываются существенными за счет малости системы. Причем флуктуации испытывает также температура смазки T , которая представляет среднюю величину. Выясним причину таких флуктуаций.

В молекулярной динамике понятие температуры системы вводится через удельное среднее значение кинетической энергии. Запишем выражение для сре-

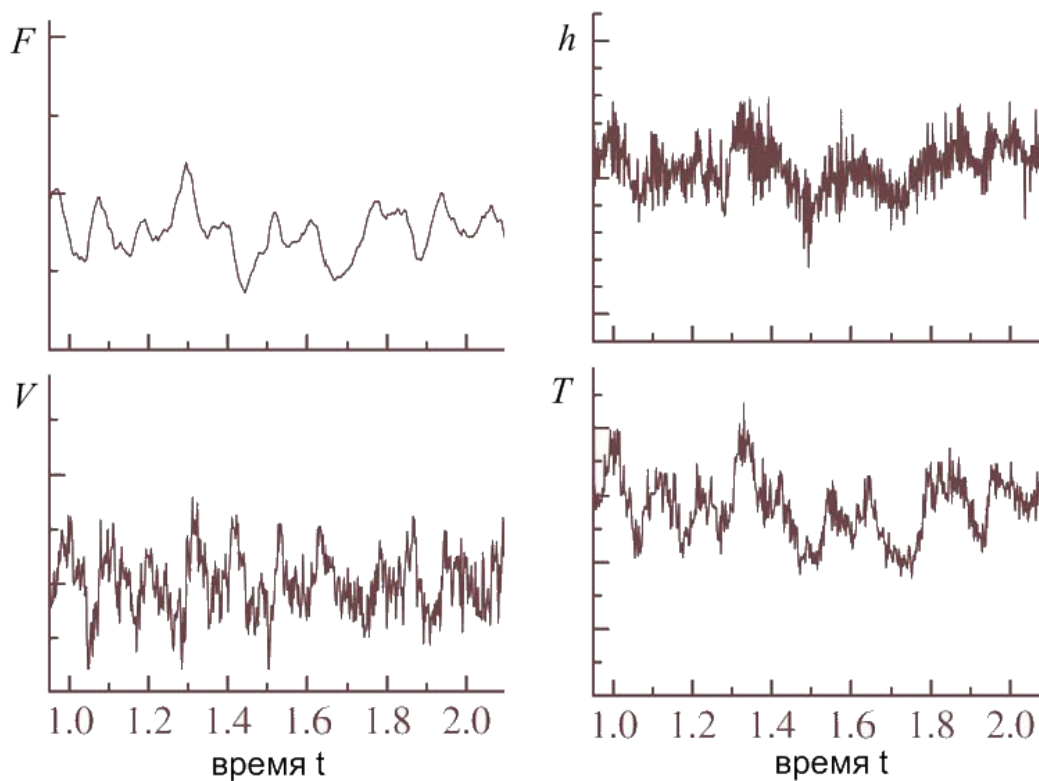


Рис. 3.1. Временные зависимости силы трения F , скорости верхней сдвигаемой поверхности V , толщины h и температуры смазки T [81]

дней ее величины:

$$E = \frac{\sum_{n=1}^N m_n v_n^2}{2N}, \quad (3.1)$$

где m — молекулярная масса атома;

v — его скорость;

N — полное число атомов [159].

Выражение (3.1) представляет среднее значение, возле которого происходят флуктуации энергии частиц, составляющих систему. При большом количестве частиц система со временем приходит к состоянию термодинамического равновесия, при котором значение (3.1) не изменяется. Однако пленка смазки имеет толщину в несколько атомных слоев, количество частиц в которых ограничено. Поэтому значение (3.1) изменяется со временем случайным образом за счет флуктуаций скорости ограниченного числа частиц, и его уже нельзя считать постоянным средним

значением. Таким образом, энергия будет флуктуировать. При изменениях кинетической энергии (3.1) потенциальная энергия изменяется таким образом, что полная энергия системы остается постоянной.

Кинетическая энергия системы и ее температура связаны следующим соотношением:

$$E = \frac{i}{2}kT, \quad (3.2)$$

где i — число степеней свободы (в данном случае $i = 3$);

k — постоянная Больцмана.

Сравнивая (3.1) и (3.2), получаем мгновенное значение температуры:

$$T = \frac{\sum_{n=1}^N m_n v_n^2}{3kN}. \quad (3.3)$$

Для вычисления температуры рассматриваемой системы необходимо в (3.3) дополнительно проводить усреднение по времени. Однако, как показано выше, данное значение для ультратонких пленок не является постоянным. Например, когда сдвиговые напряжения превышают критическое значение, наступает плавление, при котором скорости частиц смазки возрастают, поскольку происходит разупорядочение. Увеличению флуктуаций также способствует неоднородность системы — дефекты кристаллического состояния смазки, неровности поверхностей трения, примеси в используемой смазке, неоднородное распределение температуры термостата и т.п. Для учета указанных особенностей и вводятся в рассмотрение флуктуации энергии.

Согласно (3.1), если флуктуирует скорость, то испытывает флуктуации и кинетическая энергия. Поскольку система имеет малые размеры, влияние флуктуаций энергии (3.1) может оказаться существенным. Используя линейную связь между температурой и энергией (3.2), в данном и последующих разделах флуктуации последней учитываются путем введения флуктуаций температуры, которая явно входит в эволюционные уравнения.

Уравнения Лоренца (2.15) — (2.17) имеют макроскопический характер, бла-

годаря чему напряжения σ и деформация ε , а также температура T представляют величины, усредненные по физически малому объему. На расстояниях порядка длины теплопроводности проявляются флуктуации, для учета которых, следуя методу, изложенному в работах [37, 38, 47–49, 160, 161], введем в правые части (2.15)–(2.17) стохастические слагаемые в виде аддитивных некоррелированных шумов $I_\sigma^{1/2}\xi_1, I_\varepsilon^{1/2}\xi_2, I_T^{1/2}\xi_3$ (здесь интенсивности $I_\sigma, I_\varepsilon, I_T$ измерены в единицах $\sigma_s^2, \varepsilon_s^2\tau_\varepsilon^{-2}, (T_c\kappa/l)^2$ соответственно). Функция $\xi(t)$ представляет δ -коррелированный стохастический источник (белый шум) [162].

Моменты белого шума определяются следующим образом⁷:

$$\langle \xi_i(t) \rangle = 0, \quad \langle \xi_i(t)\xi_j(t') \rangle = 2\delta_{ij}\delta(t-t'). \quad (3.4)$$

Распределение значений $\xi(t)$ по их величине ξ является гауссовым [163]:

$$P(\xi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\mu}} \exp\left\{-\frac{\xi^2}{2\mu^2}\right\}. \quad (3.5)$$

Здесь μ^2 представляет второй момент источника:

$$\mu^2 \equiv \langle \xi^2(t) \rangle = 2\delta(0), \quad (3.6)$$

расходящийся как $1/\tau$, где $\tau \rightarrow 0$ — ширина δ -функции, которая в реальных физических системах всегда принимает ненулевое значение.

Тогда в рамках адиабатического приближения $\tau_\sigma \gg \tau_\varepsilon, \tau_T$ уравнения (2.16), (2.17) приводят к временным зависимостям:

$$\varepsilon(t) = \bar{\varepsilon} + \tilde{\varepsilon}\xi(t), \quad T(t) = \bar{T} + \tilde{T}\xi(t); \quad (3.7)$$

$$\bar{\varepsilon} \equiv \sigma (T_e - 1 + \sigma^2) d(\sigma), \quad \tilde{\varepsilon} \equiv \sqrt{I_\varepsilon + I_T\sigma^2} d(\sigma),$$

$$\bar{T} \equiv (T_e + 2\sigma^2) d(\sigma), \quad \tilde{T} \equiv \sqrt{I_T + I_\varepsilon\sigma^2} d(\sigma), \quad d(\sigma) \equiv (1 + \sigma^2)^{-1}. \quad (3.8)$$

В этих уравнениях детерминистические составляющие сводятся к равенствам (2.21) и (2.22), а флуктуационные следуют из известного свойства аддитивности дисперсий гауссовых случайных величин [162]. Таким образом, синергетический

⁷Здесь множитель 2 выбран для того, чтобы величина $I(\sigma)$ играла в соответствующем уравнении Фоккера–Планка роль коэффициента диффузии.

принцип соподчинения [1, 33] преобразует аддитивные шумы деформации ε и температуры T в мультипликативные. В результате выражения (2.15), (3.7) и (3.8) приводят к уравнению Ланжевена

$$\tau_\sigma \dot{\sigma} = f(\sigma) + \sqrt{I(\sigma)} \xi(t), \quad f \equiv -\frac{\partial V}{\partial \sigma}, \quad (3.9)$$

где обобщенная сила

$$f(\sigma) \equiv -\sigma + g\sigma [1 - (2 - T_e) d(\sigma)] \quad (3.10)$$

задается синергетическим потенциалом (2.27), а эффективная интенсивность шума выражается равенством

$$I(\sigma) \equiv I_\sigma + (I_\varepsilon + I_T \sigma^2) g^2 d^2(\sigma), \quad (3.11)$$

следующим из указанного свойства аддитивности интенсивностей шумов. Во избежание недоразумений следует отметить, что подстановка равенств (3.7) и (3.8) в (2.15) приводит к стохастической добавке

$$\left[I_\sigma^{1/2} + \left(I_\varepsilon^{1/2} + I_T^{1/2} \sigma \right) g d(\sigma) \right] \xi(t), \quad (3.12)$$

квадрат амплитуды которой отличается от эффективной интенсивности шума (3.11). Более того, непосредственное использование адиабатического приближения в уравнениях (2.16), (2.17) дает флуктуационные добавки зависимостей (3.7) в виде $\tilde{\varepsilon} \equiv (I_\varepsilon^{1/2} + I_T^{1/2} \sigma) d(\sigma)$, $\tilde{T} = (I_T^{1/2} - I_\varepsilon^{1/2} \sigma) d(\sigma)$, отличающемся от выражений (3.8). Последняя из этих добавок явно нефизическая, поскольку дает полную компенсацию флуктуаций температуры \tilde{T} при напряжении $\sigma = \sqrt{I_T/I_\varepsilon}$. Формальной причиной указанного противоречия является неприменимость обычных методов анализа к уравнению Ланжевена (см. [162]).

В общем случае уравнению Ланжевена (3.9) может отвечать бесконечное множество форм уравнений Фоккера–Планка. При решении физических задач возникает вопрос об использовании конкретного вида записи. Две наиболее часто используемые формы — Ито и Стратоновича. Поскольку наша цель состоит в

качественном описании, используем простейший подход Ито⁸, в рамках которого уравнение Фоккера–Планка принимает вид [2, 162, 164]:

$$\tau_\sigma \frac{\partial P(\sigma, t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial \sigma} (f(\sigma)P(\sigma, t)) + \frac{\partial^2}{\partial \sigma^2} (I(\sigma)P(\sigma, t)). \quad (3.13)$$

С течением времени распределение решений (3.9) становится стационарным, и его явный вид может быть найден из (3.13) при $\partial P(\sigma, t)/\partial t = 0$:

$$P(\sigma) = \mathcal{Z}^{-1} \exp\{-U(\sigma)\}. \quad (3.14)$$

Полученное распределение определяется нормировочной постоянной

$$\mathcal{Z} = \int_0^\infty d\sigma \exp\{-U(\sigma)\} \quad (3.15)$$

и эффективным потенциалом

$$U(\sigma) = \ln I(\sigma) - \int_0^\sigma \frac{f(\sigma')}{I(\sigma')} d\sigma'. \quad (3.16)$$

Представляется возможным найти явный вид зависимости $U(\sigma)$, однако она весьма громоздка, чтобы приводить ее здесь. Уравнение, определяющее положение экстремумов этой зависимости и задаваемого ею распределения $P(\sigma)$, имеет вид

$$(1-g)x^3 + g(2-T_e)x^2 - 2g^2 I_T x + 4g^2(I_T - I_\varepsilon) = 0, \quad x \equiv 1 + \sigma^2. \quad (3.17)$$

Таким образом, абсциссы максимумов распределения $P(\sigma)$ не зависят от интенсивности шума I_σ напряжений σ и определяются величиной температуры поверхностей трения T_e и интенсивностями шумов I_ε , I_T деформации ε и температуры пленки смазки T , а также параметром g . Поэтому без потери общности можно положить $I_\sigma = 0$, и равенства (3.10), (3.11) и (3.16) приводят к выражению для эффективного потенциала:

$$U(\sigma) = \frac{1}{2g^2 I_T} \left\{ i [i(1-g) - g(2-T_e)] \ln |1 + \sigma/i| + (1-g) \frac{\sigma^2}{2} + [g(2-T_e) - i(1-g)] \sigma \right\} + \ln [g^2 d^2(\sigma) (I_\varepsilon + \sigma^2 I_T)], \quad i \equiv \frac{I_\varepsilon}{I_T} - 1. \quad (3.18)$$

⁸При использовании исчисления Стратоновича все полученные далее результаты качественно не изменяются.

3.1.2. Фазовые диаграммы

Согласно (3.17), эффективный потенциал (3.18) имеет минимальное значение в точке $\sigma = 0$, если температура T_e не превышает критическое значение

$$T^c = 1 + g^{-1} + 2g(I_T - 2I_\varepsilon), \quad (3.19)$$

которое возрастает при увеличении характерного значения сдвиговой вязкости η_0 и интенсивности флуктуаций температуры и уменьшается с ростом модуля сдвига смазки G и интенсивности шума деформации. При этом пленка смазки не плавится. Решения уравнения (3.17)

$$\sigma_\pm^2 = \frac{1}{2} \left[\frac{g(T_e - 2)}{1 - g} - 3 \pm \sqrt{\left(\frac{g(T_e - 2)}{1 - g} + 7 \right) \left(\frac{g(T_e - 2)}{1 - g} - 1 \right)} \right] \quad (3.20)$$

получаются на прямой, определенной выражением (3.19), в случае $I_\varepsilon = 0$ после исключения корня $\sigma^2 = 0$. При $T_e < T^{00} = 2(1 + 2g^{-1})/3$ корни σ_\pm являются комплексными, в точке $T_e = T^{00}$ они становятся нулевыми, и при $T_e > T^{00}$ имеем действительные значения $\sigma_+ = -\sigma_- \neq 0$, что означает плавление слоя смазки. При выполнении условия (3.19) корень $\sigma = 0$ соответствует минимуму эффективного потенциала (3.18) для $T_e < T^{00}$, тогда как при $T_e > T^{00}$ он отвечает максимуму, а корни σ_\pm — симметричным минимумам.

Найдем условия существования корней σ_\pm в простом случае $I_\varepsilon = 0$. Полагая дискриминант уравнения (3.17) равным нулю, получаем выражения:

$$I_T = 0, \quad I_T^2 - I_T \left\{ \frac{27}{2g} \left[\frac{1-g}{g} + \frac{2-T_e}{3} \right] - \frac{(2-T_e)^2}{8(1-g)} \right\} - \frac{(2-T_e)^3}{2g(1-g)} = 0, \quad (3.21)$$

последнее из которых дает зависимости

$$2I_T = \frac{27}{2g} \left[\frac{1-g}{g} + \frac{2-T_e}{3} \right] - \frac{(2-T_e)^2}{8(1-g)} \pm \left\{ \left[\frac{27}{2g} \left(\frac{1-g}{g} + \frac{2-T_e}{3} \right) - \frac{(2-T_e)^2}{8(1-g)} \right]^2 + \frac{2(2-T_e)^3}{g(1-g)} \right\}^{1/2}. \quad (3.22)$$

Они определяют колоколообразную кривую $T_e(I_T)$, которая пересекает горизонтальную ось при

$$I_T = \frac{9(3-4g) + 8g^2}{2g^2(1-g)} + \left\{ \left[\frac{9(3-4g) + 8g^2}{2g^2(1-g)} \right]^2 + \frac{16}{g(1-g)} \right\}^{1/2} \quad (3.23)$$

и вертикальную ось в точке $T_e = 2$. Эта функция имеет максимальное значение $T_e = 2g^{-1}$ при

$$I_T = \frac{2(1-g)}{g^2}. \quad (3.24)$$

Прямая (3.19) касается кривой (3.22) в трикритической точке с координатами

$$T_e = T^{00} = \frac{2}{3}(1 + 2g^{-1}), \quad I_T = \frac{1-g}{6g^2}. \quad (3.25)$$

Таким образом, эта точка соответствует появлению действительных корней $\sigma_{\pm} \neq 0$ (3.20) уравнения (3.17), что означает плавление пленки смазки.

Рассмотрим теперь общий случай, когда существенными оказываются оба мультипликативных шума $I_{\varepsilon}, I_T \neq 0$. Условие экстремума эффективного потенциала (3.18) приводит к равенству $\sigma = 0$ и уравнению (3.17). Анализ последнего показывает, что при фиксированной интенсивности I_{ε} фазовые диаграммы имеют вид, приведенный на рис. 3.2, где линии 1, 2 отвечают пределам потери устойчивости системы. Выше прямой 1, определяемой равенством (3.19), наиболее вероятное значение напряжений $\sigma \neq 0$, и смазка находится в жидкоподобной фазе, обеспечивая устойчивое жидкостное трение и, как следствие, скольжение (SF). Ниже кривой 2, касающейся прямой 1 в трикритической точке T с координатами

$$T_e^c = \frac{2}{3}(1 + 2g^{-1} - 2gI_{\varepsilon}), \quad I_T^c = \frac{1}{6g}(g^{-1} - 1 + 8gI_{\varepsilon}), \quad (3.26)$$

имеется максимум функции $P(\sigma)$ только в точке $\sigma = 0$, и реализуется сухое трение (DF), характерное для твердоподобной пленки смазки. Между этими линиями максимумы $P(\sigma)$ отвечают нулевому и ненулевому значениям напряжений, т.е. расположена область прерывистого (stick-slip) трения (SS), при котором происходят переходы между указанными динамическими режимами трения. Это характерно для режима, где имеет место смесь твердоподобного и жидкоподобного состояний при плавлении смазки. Для $I_{\varepsilon} < (1 + g^{-1})/4g$ ситуация полностью такая же как

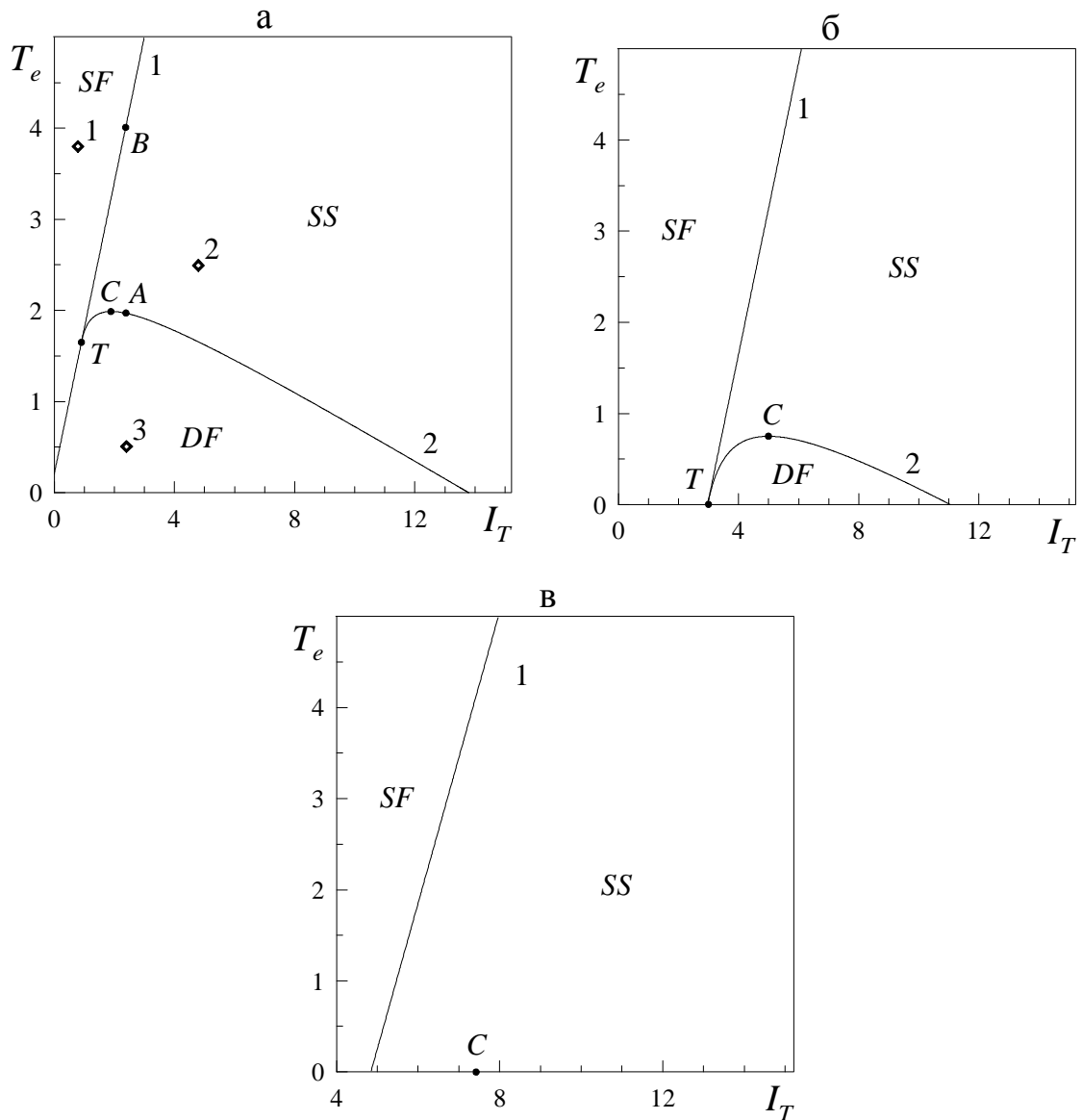


Рис. 3.2. Фазовая диаграмма при $g = 0.8$ и различных значениях I_ϵ : а — $I_\epsilon = 0.64$; б — $I_\epsilon = 2.1875$; в — $I_\epsilon = 3.125$. Линии 1 и 2 определяют границу областей устойчивости жидкостного (SF), сухого (DF) и прерывистого (SS) трения (T — трикритическая точка, C — критическая точка)

и в случае $I_\varepsilon = 0$ (см. рис. 3.2а). При $I_\varepsilon > (1+g^{-1})/4g$ жидкостное трение возможно даже при малых значениях температуры T_e поверхностей трения и интенсивности шума I_T температуры пленки смазки (рис. 3.2б). Согласно (3.26), трикритическая точка попадает на ось I_T при интенсивности $I_\varepsilon = (1 + 2g^{-1})/2g$. Следовательно, режим, при котором сосуществуют твердоподобное и жидкоподобное состояния смазки, может реализоваться даже при нулевой температуре поверхностей трения T_e , если интенсивность флуктуаций деформации превышает указанное критическое значение I_ε . С превышением критического значения $I_\varepsilon = 2g^{-2}$ устойчивая область сухого трения пропадает (см. рис. 3.2в). Следует отметить, что эта область уменьшается с увеличением значения модуля сдвига смазки G и уменьшением характерного значения сдвиговой вязкости η_0 .

Рассмотрение совокупности шумов σ , ε и T показывает, что стохастическое влияние несущественно для сдвиговой компоненты тензора напряжений и является критическим для соответствующей компоненты деформации и температуры слоя смазки. Для безразмерных интенсивностей шумов граница области жидкостного трения задается равенством

$$I_T = 2I_\varepsilon - (1 + g)/2g^2, \quad (3.27)$$

следующим из (3.17) при $x = 1$ ($\sigma = 0$) и $T_e = 0$. Согласно (3.27), при отсутствии флуктуаций температуры происходит плавление смазки, если интенсивность шума сдвиговых компонент деформации превышает значение

$$I_{\varepsilon 0} = (1 + g)/4g^2, \quad (3.28)$$

отвечающее точке O на рис. 3.3. Увеличение флуктуаций сдвиговых деформаций и температуры приводит к плавлению смазки, если их интенсивность ограничена условием (3.27). Область прерывистого трения возникает при достижении значений

$$I_{\varepsilon 1} = \frac{(2 + g)}{2g^2}, \quad I_{T1} = \frac{3 + g}{2g^2}, \quad (3.29)$$

отвечающих трикритической точке T на рис. 3.3. Такое промежуточное поведение происходит в пределах области, расположенной выше прямой (3.27) и вне кривой,

которая определяется выражением

$$I_\varepsilon = I_T \left[1 + \frac{g}{3(1-g)} \right] + \frac{4g}{27(1-g)^2} - \left\{ \frac{2g^2}{27(1-g)} \times \right. \\ \left. \times \left[\frac{4}{3(1-g)^2} \left(\frac{2}{9(1-g)} + I_T \right) + \frac{2I_T^2}{1-g} + I_T^3 \right] \right\}^{1/2}. \quad (3.30)$$

Если же интенсивность шума сдвиговой деформации превышает еще большее

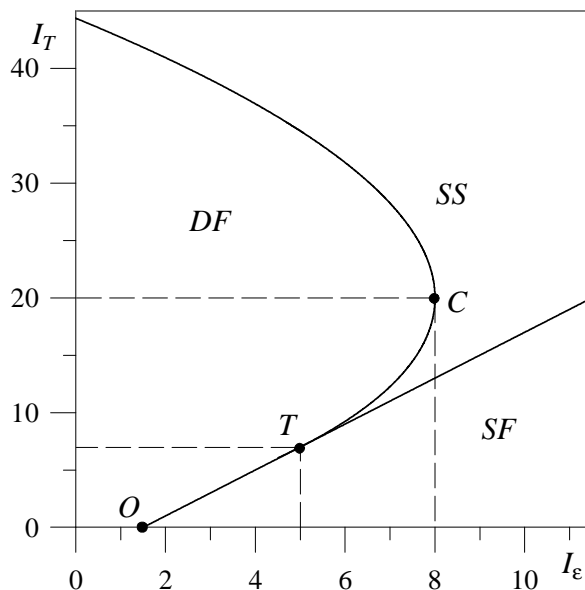


Рис. 3.3. Фазовая диаграмма системы при $T_e = 0, g = 0.5$ и $I_\varepsilon, I_T \neq 0$

значение $I_{\varepsilon 2}$, определяемое (3.30) с шумом температуры $I_{T2} = 2(3 - g)/g^2$ (точка C на рис. 3.3), область сухого трения исчезает вообще. Кривая (3.30) пересекает вертикальную ось в точке

$$I_{T3} = \frac{1}{2} \left\{ \frac{27(1-g)}{2g^2} + \frac{9}{g} - \frac{1}{2(1-g)} + \right. \\ \left. + \left[\left(\frac{27(1-g)}{2g^2} + \frac{9}{g} - \frac{1}{2(1-g)} \right)^2 + \frac{16}{g(1-g)} \right]^{1/2} \right\}, \quad (3.31)$$

выше которой сухое трение не существует. Соответствующая фазовая диаграмма, показанная на рис. 3.3, имеет нетривиальный вид (особенно в области $I_{\varepsilon 1} \leq I_\varepsilon \leq I_{\varepsilon 2}$).

При учете аддитивного некоррелированного шума величин σ, ε, T и деформационного дефекта модуля сдвига (2.50), (2.51) система (2.15) – (2.17) сводится

к уравнению Ланжевена (3.9) с τ_p вместо τ_σ и синергетическим потенциалом (2.54) (см. подраздел 2.4). Уравнение, определяющее положения максимумов стационарной функции распределения $P(\sigma)$, принимает вид (ср. с (3.17)) [37]

$$\left[(1-g_\Theta) + \frac{\theta^{-1}-1}{1+\alpha^{-1}\sqrt{x-1}} \right] x^3 + g_\Theta(2-T_e)x^2 - 2g_\Theta^2 I_T x + 4g_\Theta^2 (I_T - I_\varepsilon) = 0, \quad x \equiv 1 + \sigma^2. \quad (3.32)$$

Согласно (3.32), распределение вероятности $P(\sigma)$ не имеет максимум в точке $\sigma = 0$, т.е. происходит скольжение, если температура T_e превышает критическое значение (3.19). Хотя построить фазовые диаграммы аналитически не представляется возможным, их численное исследование приводит к ситуации, показанной на рис. 3.2 и 3.3. Таким образом, поведение системы качественно совпадает с описанным в случае отсутствия деформационного дефекта модуля сдвига.

3.1.3. Плавление ультратонкой пленки смазки за счет диссипативного разогрева поверхностей трения

Фазовая диаграмма состояний системы (см. рис. 3.2) построена согласно аналитически найденному распределению $P(\sigma)$. Теперь проделаем аналогичную процедуру, анализируя уравнение (3.9) численно [50]. Это обусловлено тем, что в эксперименте обычно измеряются временные зависимости исследуемых физических величин. Кроме того, данная процедура позволит еще раз показать, что между уравнением Фоккера–Планка в форме Ито и уравнением Ланжевена (3.9) существует однозначное соответствие.

Умножив (3.9) на dt , получим дифференциальное соотношение Ланжевена:

$$\tau_\sigma d\sigma = f(\sigma)dt + \sqrt{I(\sigma)}dW(t), \quad (3.33)$$

где $dW(t)$ представляет винеровский процесс, определенный как

$$dW(t) = W(t + dt) - W(t) \equiv \xi(t)dt \quad (3.34)$$

и обладающий следующими свойствами [165]:

$$\langle dW(t) \rangle = 0; \quad \langle (dW(t))^2 \rangle = 2dt. \quad (3.35)$$

В рамках подхода Ито полагается, что стохастические процессы $\sigma(t)$ и $dW(t)$, входящие в последний член уравнения (3.33), статистически некоррелированы [2]. Для численного решения уравнения (3.33) воспользуемся методом Эйлера. Изменяя время в единицах τ_σ , с учетом определения дискретного аналога дифференциала случайной силы $dW(t) \equiv \sqrt{\Delta t} W_n$ получим итерационную процедуру расчета временной зависимости напряжений:

$$\sigma_{n+1} = \sigma_n + f(\sigma_n)\Delta t + \sqrt{I(\sigma_n)\Delta t} W_n. \quad (3.36)$$

Решение уравнения производится на временном интервале $t \in [0, T]$. При заданном количестве итераций N (числе точек временного ряда) приращение времени определяется как $\Delta t = T/N$. Сила W_n обладает следующими свойствами:

$$\langle W_n \rangle = 0, \quad \langle W_n W_{n'} \rangle = 0, \quad \langle W_n^2 \rangle \rightarrow 2. \quad (3.37)$$

Адекватно представить случайную силу, обладающую свойствами белого шума, позволяет модель Бокса–Мюллера [166]:

$$W_n = \mu \sqrt{-2 \ln r_1} \cos(2\pi r_2), \quad r_i \in (0, 1], \quad (3.38)$$

где $\mu = \sqrt{2}$, а W_n — абсолютно случайное число со свойствами (3.37), (3.5). Псевдослучайные числа r_1 и r_2 имеют равномерное распределение и повторяются через определенный интервал.

Эффективный потенциал (3.16) имеет минимумы при положительном и отрицательном значениях напряжений σ . Поэтому при численном решении уравнения (3.9) за счет флуктуаций осуществляются переходы системы между указанными минимумами. Поскольку представляет интерес движение сдвигаемой поверхности в одну сторону, далее отрицательная область $\sigma < 0$ полагается нефизичной, что позволяет анализировать поведение абсолютного значения $|\sigma|$.

Траектории $|\sigma|(t)$ для различных областей фазовой диаграммы показаны на рис. 3.4. Верхняя панель рисунка соответствует точке 1 на рис. 3.2а (SF). Здесь видны изменения вблизи ненулевого устойчивого значения напряжений. Данный режим соответствует жидкоподобной структуре смазки. Средняя панель отвечает

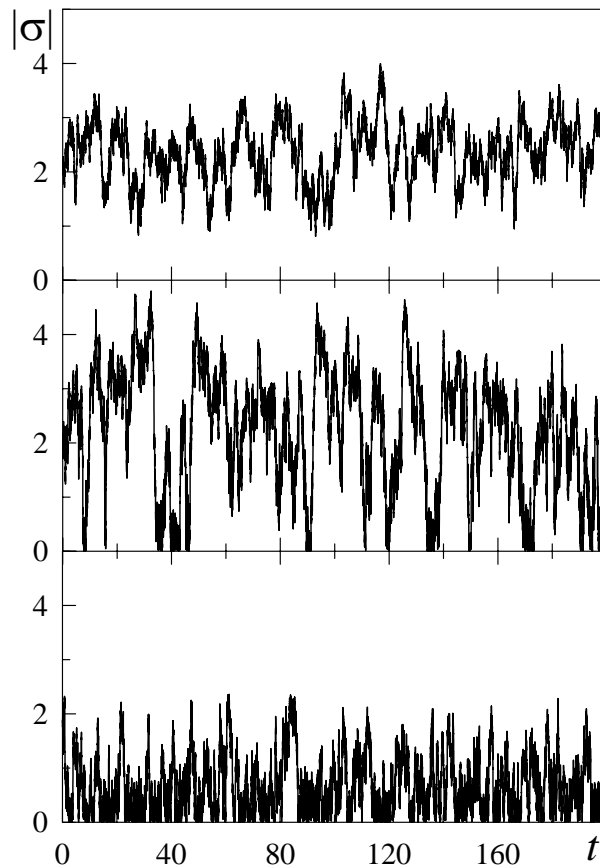


Рис. 3.4. Временные зависимости напряжений $|\sigma|(t)$, соответствующие режимам, показанным точками на рис. 3.2а при $I_\sigma = 0.08$: верхняя панель — точка 1 — $I_T = 0.8, T_e = 3.8$ (SF); средняя панель — точка 2 — $I_T = 4.8, T_e = 2.5$ (SS); нижняя панель — точка 3 — $I_T = 2.4, T_e = 0.5$ (DF)

точке 2 рис. 3.2а (SS). Здесь реализуются частые переходы между нулевым и ненулевым значениями напряжений, что соответствует режиму прерывистого трения. Нижняя панель рисунка отвечает точке 3 рис. 3.2а (DF). Здесь осуществляются изменения вблизи $\sigma = 0$, что соответствует твердоподобной структуре смазки.

На рис. 3.5а приведено распределение вероятности (3.14) для точек, указанных на фазовой диаграмме. На рис. 3.5б представлены аналогичные распре-

деления, полученные численно при решении уравнения Ланжевена и отвечающие траекториям на рис. 3.4. Видно, что соответствующие зависимости $P(\sigma)$ в обоих случаях идеально совпадают, что подтверждает соответствие уравнения Фоккера–Планка в форме Ито (3.13) и полученной итерационной процедуры (3.36). Кривая

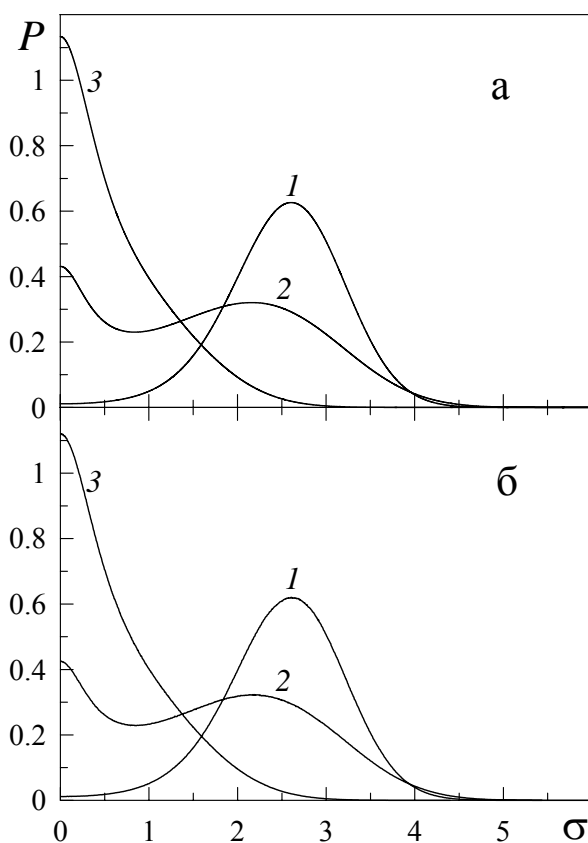


Рис. 3.5. Распределения вероятностей: а — определяемые выражением (3.14) и отвечающие точкам на рис. 3.2а; б — найденные при численном анализе уравнения (3.36) с параметрами $N = 1.5 \cdot 10^8$, $T = 10^6$, $\Delta t \approx 0.0067$ и соответствующие траекториям на рис. 3.4

1 соответствует области жидкостного трения на фазовой диаграмме, где реализуется только ненулевой максимум $P(\sigma)$; кривая 2 — области прерывистого трения, здесь сосуществуют нулевой и ненулевой максимумы; области сухого трения отвечает кривая 3 с одним нулевым максимумом $P(\sigma)$.

В работе [6] приведены экспериментальные зависимости силы трения от скорости слюдяных сдвигаемых поверхностей, между которыми помещались ги-

дрокарбоновые и силиконовая жидкости: циклогексан, ОМЦТС, n -октан, n -тетрадекан и разветвленный изопарафин-2-метилоктадекан. Согласно им сила трения сначала линейно увеличивается, а затем устанавливается stick-slip режим, при котором ее значение изменяется, обеспечивая прерывистое движение. В рамках предлагаемого подхода такое поведение может быть объяснено следующим образом: вначале движения преобладает упругая компонента напряжений σ_{el} , и смазка твердоподобна (нижняя панель рис. 3.4). Здесь выполняется закон Гука, а полная сила трения при этом увеличивается. При некотором критическом значении скорости происходят переходы между твердоподобной и жидкоподобной (где преобладает вязкая компонента напряжений σ_v) структурами смазки за счет эффекта "сдвигового плавления" [76] (средняя панель рис. 3.4). Согласно [8], при повышении температуры поверхностей трения stick-slip режим исчезает, и устанавливается жидкостное трение. Этот факт может быть интерпретирован как переход между режимами, показанными на средней и верхней панелях рис. 3.4. Согласно фазовой диаграмме на рис. 3.2а, такой переход происходит с повышением температуры поверхностей T_e .

Кроме того, экспериментально измеряются временные зависимости силы трения, на которых плавление смазки показано при постоянных скоростях сдвига, например [6, 8]. Следует отметить, что в процессе трения всегда происходит диссипация энергии поступательного движения трущихся поверхностей, что приводит к их разогреву. Причем при твердоподобном состоянии смазки поверхности будут нагреваться быстрее, чем при жидкоподобном. Со временем изменение температуры поверхностей будет все более и более слабым за счет роста количества энергии, отдаваемой во внешнюю среду, пока не установится равновесное значение T_e . Для аппроксимации роста температуры поверхностей трения с течением времени воспользуемся экспоненциальной зависимостью, которая позволяет учесть указанные особенности:

$$T_e(t) = T_e^0(1 - \exp(-Ct)), \quad (3.39)$$

где T_e^0 — устанавливающееся значение T_e ;

C — константа, которая задает скорость роста температуры на начальном этапе.

На рис. 3.6 приведено решение уравнения Ланжевена $|\sigma|(t)$ с учетом (3.39). На верхней панели представлена зависимость (3.39). Согласно фазовой диаграмме

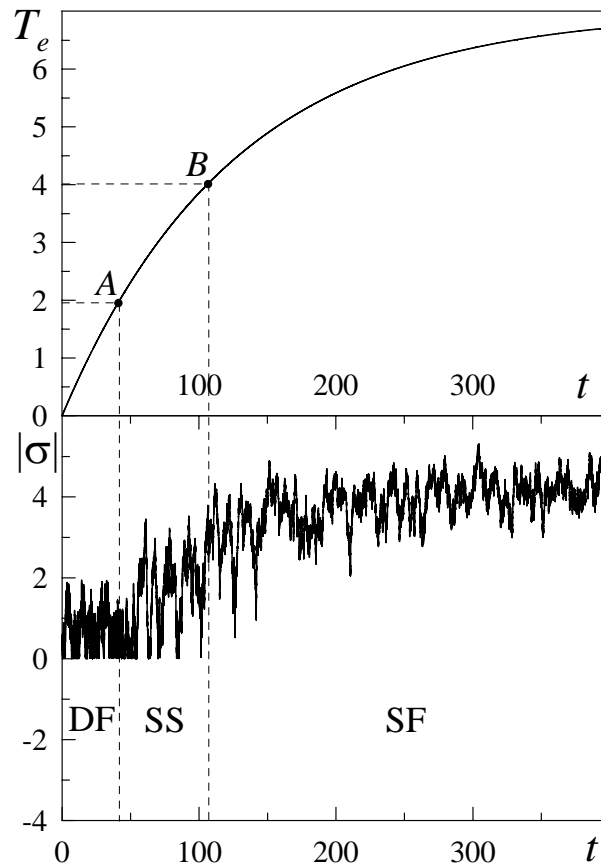


Рис. 3.6. Верхняя панель — зависимость температуры сдвигаемых поверхностей от времени (3.39) при $T_e^0 = 7.0$, $C = 0.008$. Точки A и B отвечают точкам на рис. 3.2а. Нижняя панель — временная зависимость $|\sigma|(t)$, соответствующая параметрам рис. 3.2а при $I_\sigma = 0.01$, $I_T = 2.4$ и изменяющейся температуре T_e , представленной зависимостью (3.39)

(рис. 3.2а), точка A отвечает температуре перехода от сухого трения (DF) к прерывистому (SS). При температуре, показанной точкой B , происходит дальнейший переход к жидкостному режиму трения (SF). Нижняя панель показывает эволюцию напряжений $|\sigma|(t)$, где выделены три временные области: DF , SS , SF . В первой области смазка твердоподобна, во второй — происходит прерывистое движе-

ние, и в третьей — она плавится. Этот рисунок согласуется с экспериментальными данными [8, 81].

3.1.4. Периодический прерывистый режим трения

В пунктах 3.1.2, 3.1.3 исследован режим спонтанного плавления/затвердевания смазки, при этом сила трения изменяется случайным образом. Однако, как показывают эксперименты, часто происходит периодическое изменение силы трения (см. рис. 1.3). В пункте 2.5.2 в рамках исследуемой модели получены зависимости, на которых напряжения изменяются со временем периодически (см. рис. 2.23). Однако происходит быстрое затухание колебаний, и в системе устанавливается стационарный жидкостный режим трения, в котором $\sigma = \text{const}$. Указанные зависимости получены при решении уравнений (2.107) и (2.108). Введем в эти уравнения стохастические слагаемые, представляющие аддитивные некоррелированные шумы с моментами (3.4) и интенсивностями I_σ и I_ε :

$$\dot{\sigma} = -\sigma + g(\varepsilon)\varepsilon + \sqrt{I_\sigma}\xi_1(t), \quad (3.40)$$

$$\tau\dot{\varepsilon} = -\varepsilon + (T_e - 1 - \sigma\varepsilon + \sigma^2)\sigma + \sqrt{I_\varepsilon}\xi_2(t), \quad (3.41)$$

где $g(\varepsilon)$, как и ранее, определяется выражением (2.102). Результат численного решения системы уравнений показан на рисунке 3.7. Здесь начальные значения напряжений и деформации выбраны вблизи фокуса на рисунке 2.22. При этом найденная зависимость $\sigma(t)$ представляет установившийся режим, параметры которого со временем не изменяются. Зависимость визуально является периодической. Чтобы подтвердить этот факт, дополнительно проведем Фурье—анализ. На рисунке 3.8 в двойном логарифмическом масштабе показана спектральная плотность мощности $S(\nu)$, соответствующая зависимости, приведенной на рис. 3.7. С ростом

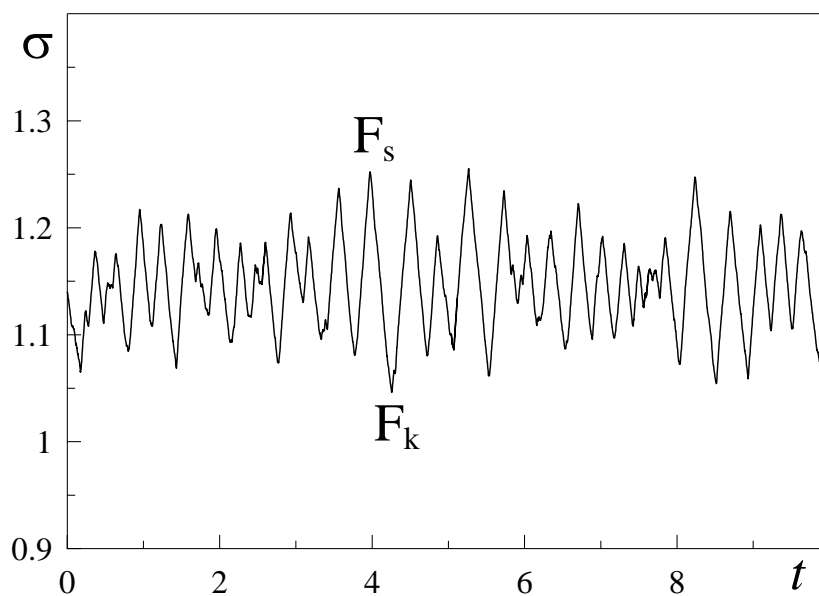


Рис. 3.7. Временные зависимости напряжений $\sigma(t)$, полученные при совместном решении уравнений (3.40), (3.41) при параметрах $\theta = 0.2, g_{\Theta} = 0.6, \alpha = 0.7, \beta = 1000, \tau = 1, T_e = 1.1, I_{\sigma} = I_{\varepsilon} = 10^{-4}$.

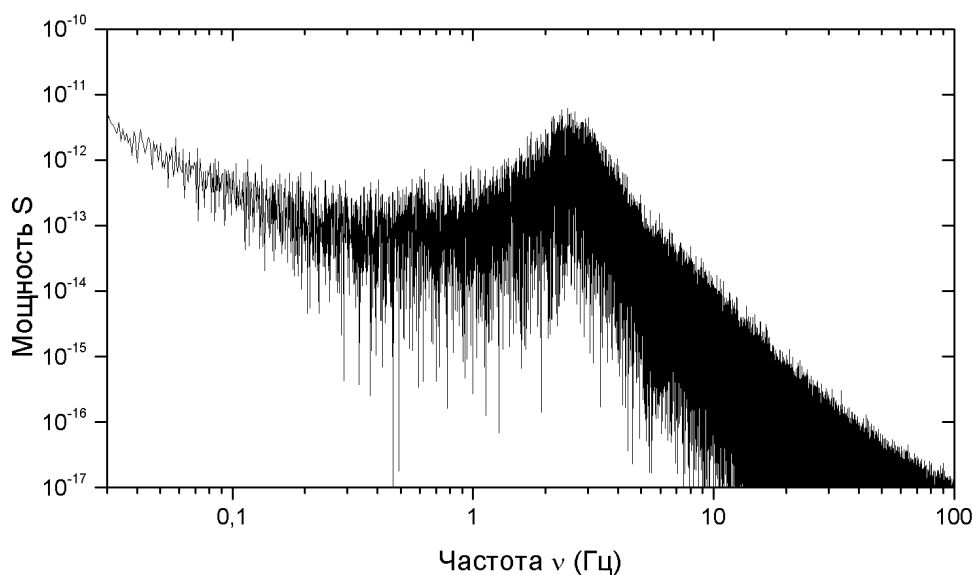


Рис. 3.8. Спектральная плотность мощности для зависимости, показанной на рисунке 3.7

частоты составляющей сигнала ее мощность спадает, однако при $\nu \approx 2.5$ Гц наблюдается пик зависимости, что свидетельствует о наличии периодической составляющей $\sigma(t)$.

Таким образом, на рис. 3.7 реализуются периодические пилообразные изменения напряжений, что соответствует колебательному процессу в системе [14–16]. При этом происходят переходы между жидкоподобной структурой смазки с кинетической силой трения F_k и твердоподобной со статической силой трения F_s , что соответствует stick–slip режиму. Ранее полагалось, что твердоподобной структуре соответствуют нулевые напряжения, а когда они становятся ненулевыми при повышении температуры T_e выше критического значения, смазка плавится. Здесь же реализуется следующая ситуация. Пусть вначале напряжения минимальны, что, как и ранее, соответствует твердоподобной смазке. Если привести поверхности в движение, σ растут (любой восходящий участок рассматриваемой зависимости). При превышении напряжениями критического значения происходит плавление, затем упругая компонента σ_{el} релаксирует, суммарные напряжения также уменьшаются (убывающий участок зависимости). Когда напряжения в результате релаксации приобретают значение, недостаточное для поддержания смазки в жидкоподобном состоянии, она затвердевает, и процесс повторяется. Таким образом, как и ранее, плавление происходит при больших напряжениях. Отметим, что описанный режим отличается от показанного на верхней панели рисунка 3.4. В рассматриваемом случае осуществляются периодические переходы между твердоподобной и жидкоподобной структурами смазки, а верхняя панель рисунка 3.4 соответствует жидкоподобной структуре, и случайные изменения напряжений на ней представляют флуктуации, не приводящие к плавлению/затвердеванию. Поскольку зависимость на рисунке 3.7 не является строго периодической, такой режим отвечает экспериментам с цепными молекулами, которым сложно образовывать упорядоченные структуры, за счет чего на колебания накладываются флуктуации (см. верхнюю панель на рис. 1.3). При этом амплитуда stick–slip переходов не постоянна.

3.1.5. Самоподобный режим

Рассмотрение, проведенное в разделе 2, показывает, что внешнее воздействие может приводить к самоорганизации, в результате которой неравновесная система (смазка) переходит в "упорядоченное" состояние (плавится). Как известно из теории фазовых переходов, такое состояние образуется критическим образом — упорядоченная фаза развивается как самоподобная структура, в которой отсутствует характерный масштаб [167]. Формально свойство самоподобия выражается однородностью функции распределения $P(x)$ по амплитуде x гидродинамической моды, ответственной за упорядочение:

$$P(x/x_c) = x_c^\alpha P(x). \quad (3.42)$$

Согласно (3.42), 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 (3.42) в виде

$$P(x) = x^{-\alpha} \mathcal{P}(y), \quad (3.43)$$

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.

Для дальнейшего исследования системы [49, 51] следует найти распределение вероятности (3.14), вид которого определяется эффективным потенциалом (3.16). В случае $I_\sigma, I_T \ll I_\varepsilon$ получаем выражение

$$P(\sigma) \approx I_\varepsilon^{-1} [gd(\sigma)]^{-2} \exp \left\{ I_\varepsilon^{-1} g^{-2} \int f(\sigma) d(\sigma)^{-2} d\sigma \right\}, \quad (3.44)$$

$$f(\sigma) = -\sigma(1-g) + g(T_e - 2)\sigma d(\sigma), \quad d(\sigma) \equiv (1 + \sigma^2)^{-1},$$

существенно отличное от однородной функции типа (3.43)

$$P(y) = y^{-2a} \mathcal{P}(\sigma), \quad y = \sigma \sigma_s, \quad (3.45)$$

отвечающей самоподобной системе, для которой отсутствует характерный масштаб напряжений ($a < 1$ — показатель распределения) [167]. Флуктуации температуры $I_T \gg I_\varepsilon, I_\sigma$ приводят к выражению:

$$P(\sigma) \approx I_T^{-1} [g\sigma d(\sigma)]^{-2} \exp \left\{ I_T^{-1} g^{-2} \int f(\sigma) [\sigma d(\sigma)]^{-2} d\sigma \right\}. \quad (3.46)$$

Поскольку на границе $\sigma \rightarrow 0$ интеграл в (3.46) стремится к константе, а $d(\sigma) \rightarrow 1$, полученное распределение характеризуется степенной асимптотикой $P(\sigma) \sim \sigma^{-2}$. Таким образом, рост интенсивности флуктуаций температуры приводит к установлению самоподобного режима плавления, которому отвечает однородная функция (3.45), характеризуемая целым показателем $2a = 2$.

Однако в общем случае этот показатель может быть не целым, а дробным, в частности, режиму СОК отвечает значение $2a = 1.5$. Во избежание такого ограничения, заменим параметр порядка σ во всех слагаемых уравнений (2.15) – (2.17) степенным выражением σ^a с показателем $0 < a < 1$. Тогда с учетом стохастических добавок основные уравнения принимают вид:

$$\tau_\sigma \dot{\sigma} = -\sigma^a + g\varepsilon + \sqrt{I_\sigma} \xi_1(t), \quad (3.47)$$

$$\tau_\varepsilon \dot{\varepsilon} = -\varepsilon + (T - 1)\sigma^a + \sqrt{I_\varepsilon} \xi_2(t), \quad (3.48)$$

$$\tau_T \dot{T} = (T_e - T) - \sigma^a \varepsilon + \sigma^{2a} + \sqrt{I_T} \xi_3(t), \quad (3.49)$$

где использованы безразмерные переменные. Физический смысл проведенной замены состоит в том, что требование самоподобия достигается в рамках предположений о нелинейной релаксации напряжений, а также о дробном характере положительной и отрицательной обратных связей. Условие адиабатичности $\tau_\varepsilon, \tau_T \ll \tau_\sigma$ при измерении времени в единицах τ_σ немедленно приводит к уравнению Ланжевена (ср. с (3.9))

$$\dot{\sigma} = f_a(\sigma) + \sqrt{I_a(\sigma)} \xi(t), \quad (3.50)$$

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

$$\begin{aligned} f_a(\sigma) &\equiv -\sigma^a + g\sigma^a [1 - (2 - T_e) d_a(\sigma)], \\ I_a(\sigma) &\equiv I_\sigma + g^2 (I_\varepsilon + I_T \sigma^{2a}) d_a^2(\sigma), \quad d_a(\sigma) \equiv (1 + \sigma^{2a})^{-1}. \end{aligned} \quad (3.51)$$

Ему отвечает уравнение Фоккера–Планка (ср. с (3.13))

$$\frac{\partial P}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial \sigma} (f_a(\sigma)P) + \frac{\partial^2}{\partial \sigma^2} (I_a(\sigma)P). \quad (3.52)$$

Соответствующее распределение (ср. с (3.14))

$$P_a(\sigma) = \frac{\mathcal{Z}^{-1}}{I_a(\sigma)} \exp(-V_a(\sigma)) \quad (3.53)$$

задается статистической суммой (3.15) и эффективным потенциалом

$$V_a(\sigma) \equiv -\int_0^\sigma \frac{f_a(\sigma')}{I_a(\sigma')} d\sigma'. \quad (3.54)$$

Распределение сдвиговых напряжений можно записать также в виде аналогичном (3.14)

$$P_a(\sigma) = \mathcal{Z}^{-1} \exp\{-U(\sigma)\}, \quad (3.55)$$

задаваемом эффективным потенциалом

$$U(\sigma) \equiv \ln I_a(\sigma) - \int_0^\sigma \frac{f_a(\sigma')}{I_a(\sigma')} d\sigma' \quad (3.56)$$

и статистической суммой (3.15).

Точки экстремума этого распределения определяются уравнением:

$$\frac{T_e - 2}{1 + \sigma^{2a}} + \frac{2ag\sigma^{a-1}}{(1 + \sigma^{2a})^3} [2I_\varepsilon - I_T(1 - \sigma^{2a})] = \frac{1 - g}{g}, \quad (3.57)$$

согласно которому граница области жидкостного трения

$$I_T = 2I_\varepsilon \quad (3.58)$$

отвечает условию $\sigma = 0$. Критические значения параметров состояния задаются условием $\left| \frac{d\sigma}{dT_e} \right| = \infty$, приводящим к уравнению:

$$6a(g-1)g^{-1}(1+\sigma^{2a})^2\sigma^{a+1} - 4a(2-T_e)(1+\sigma^{2a})\sigma^{a+1} + 4agI_\varepsilon(a-1) - I_T(a-1)(1-\sigma^{2a}) + 2aI_T\sigma^{2a} = 0. \quad (3.59)$$

Выражения (3.57), (3.58) обобщают равенства (3.17), (3.19). Анализ приведенных уравнений показывает, что результаты, полученные при $a = 1$, мало изменяются

при переходе к общему случаю $0 < a < 1$. В частности, влияние случайного распределения напряжений по-прежнему является не существенным, тогда как флуктуации деформации и температуры сказываются критическим образом. Наиболее существенное изменение наблюдается для зависимости стационарных сдвиговых напряжений σ_0 от температуры T_e . В стационарном детерминистическом случае система (3.47) – (3.49) приводит к решению

$$\sigma_0 = \left[g(1-g)^{-1}(T_e - 2) - 1 \right]^{1/2a}, \quad g < 1, \quad (3.60)$$

которое обобщает стандартную корневую зависимость, соответствующую $a = 1$ (см. рис. 3.9). Увеличение интенсивности шума деформации I_ε приводит к моно-

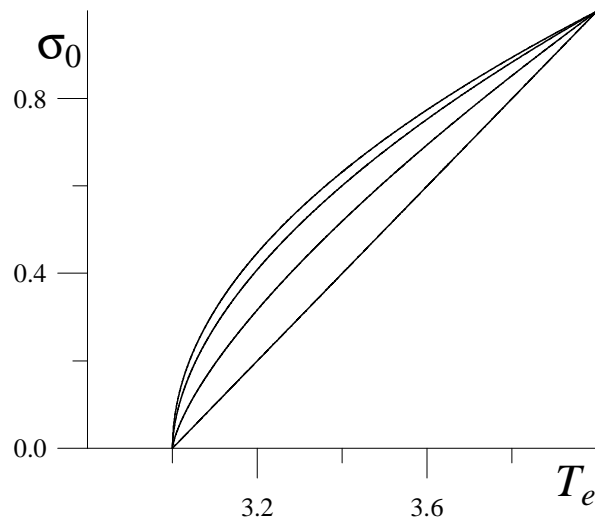


Рис. 3.9. Зависимость стационарного значения сдвиговых напряжений σ_0 от температуры T_e при $g = 0.5$ и $a = 0.5; 0.7; 0.9; 1.0$ (соответствующие кривые расположены справа налево)

тонному росту σ_0 , тогда как при возрастании I_T образуется барьер вблизи точки $\sigma_0 = 0$. При этом зависимость $\sigma_0(T_e)$ теряет монотонный вид при значениях I_T , отвечающих области выше прямой (3.58) (см. рис. 3.10). Штриховые ветви кривых отвечают неустойчивым значениям напряжений σ^m , сплошные — устойчивым σ_0 . Из рис. 3.10 видно, что σ^m может принимать нулевое значение только при $a = 1$ или $I_T = 2I_\varepsilon$, иначе кривые зависимостей $\sigma^m(T_e)$ асимптотически приближаются

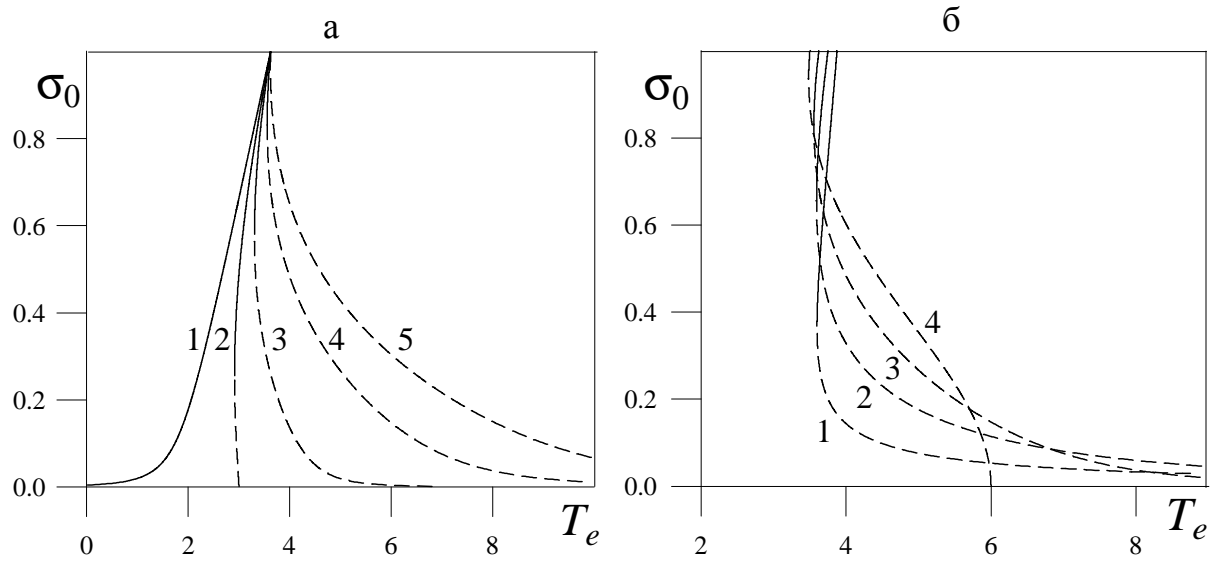


Рис. 3.10. Зависимость стационарного значения сдвиговых напряжений σ_0 от температуры T_e при $g = 0.5$: а — $a = 0.75, I_\varepsilon = 1$ (кривые 1–5 соответствуют $I_T = 1, 2, 3, 5, 7$); б — $I_\varepsilon = 1, I_T = 5$ (кривые 1–4 отвечают $a = 0.25; 0.5; 0.75; 1.0$)

к нулю. Это означает, что в случае $I_T > 2I_\varepsilon$ и $a \neq 1$ всегда существует барьер эффективного потенциала (3.54) вблизи точки $\sigma_0 = 0$, т.е. в системе либо происходит фазовый переход первого рода между жидкоподобным и твердоподобным состояниями смазки, либо устанавливается режим сухого трения. При $I_T < 2I_\varepsilon$ и $a \neq 1$ реализуется жидкостный режим трения, отвечающий минимуму потенциала с $\sigma_0 \neq 0$, поскольку максимум барьера находится в нефизической области $\sigma^m < 0$.

Фазовая диаграмма, определяющая состояние системы в зависимости от интенсивностей шумов I_ε, I_T , имеет вид, подобный случаю $a = 1$, и приведена на рис. 3.11. Видно, что рост a приводит к увеличению двухфазной области (SS) прерывистого трения, которая ограничена прямой (3.58) и колоколообразной кривой. В отличие от случая $a \neq 1$ при $a = 1$ жидкостный режим трения в области малых значений I_ε не реализуется. Поскольку на практике, как правило, интенсивности шумов малы, уменьшение трения следует ожидать в системах с дробным показателем a .

На рис. 3.12 показано распределение вероятности (3.53), соответствующее точкам на рис. 3.11. Оно обладает максимумами, положения которых определяют

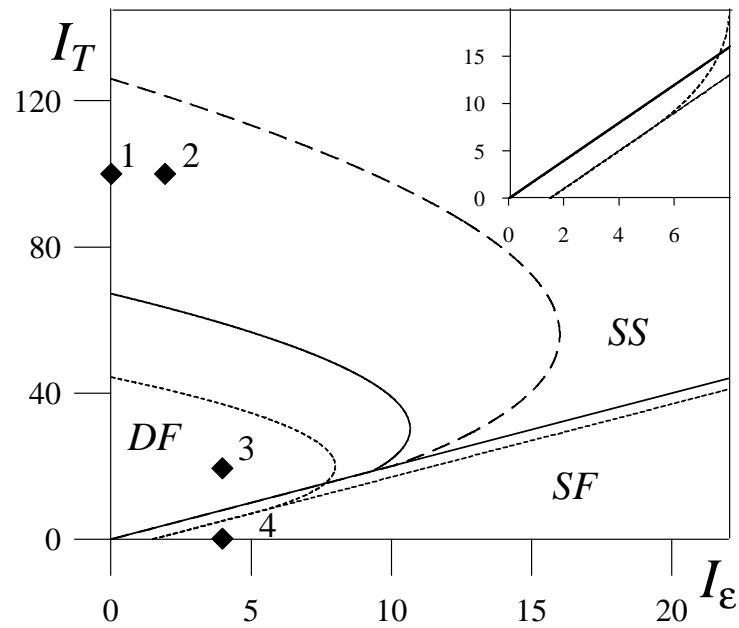


Рис. 3.11. Фазовая диаграмма системы при $T_e = 0; g = 0.5; I_T, I_\varepsilon \neq 0; a = 0.5$ (штриховая кривая), 0.75 (сплошная), 1.0 (пунктирная)

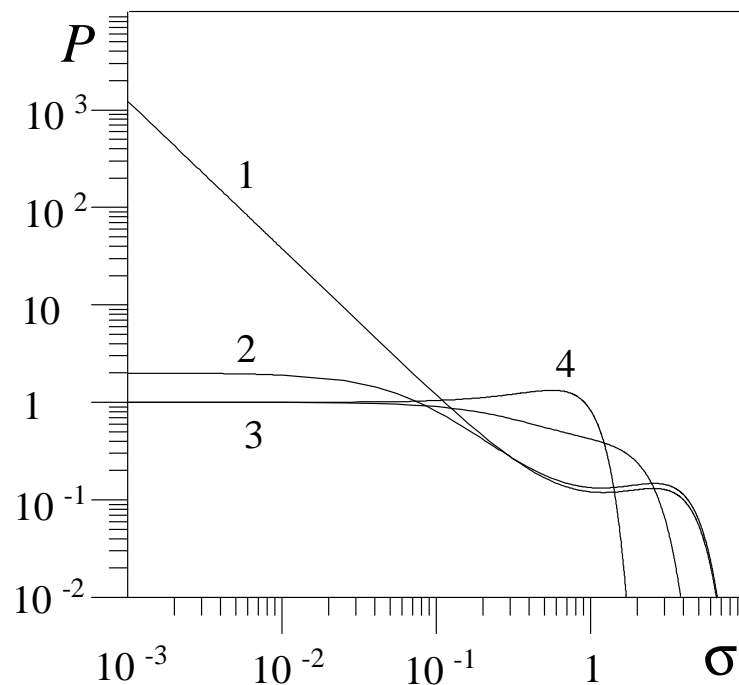


Рис. 3.12. Функция распределения (3.53) при $a = 0.75, g = 0.5, T_e = 0, I_\sigma = 0$ и режимах, показанных точками на рис. 3.11: 1 — $I_\varepsilon = 0, I_T = 100$ (SS); 2 — $I_\varepsilon = 2, I_T = 100$ (SS); 3 — $I_\varepsilon = 4, I_T = 20$ (DF); 4 — $I_\varepsilon = 4, I_T = 0$ (SF)

тся набором величин $I_\varepsilon, I_T, I_\sigma, a, g, T_e$. Для точки 1, находящейся в двухфазной области (SS), распределение принимает степенной вид, присущий самоподобному режиму. Такой режим отвечает значениям $\sigma \ll 1$ и $I_\sigma, I_\varepsilon \ll I_T$, при которых (3.53) сводится к каноническому виду (3.45) в области малых напряжений, где функция $\mathcal{P}(\sigma)$ определяется выражением:

$$\mathcal{P}(\sigma) = Z^{-1} g^{-2} I_T^{-1} d_a^{-2}(\sigma) \exp \left\{ -I_T^{-1} g^{-2} \int_0^\sigma \frac{1 - g [1 - 2d_a(\sigma')]}{d_a^2(\sigma') (\sigma')^a} d\sigma' \right\}. \quad (3.61)$$

Для точки 2 характерно сосуществование максимумов распределения $P_a(\sigma)$ при нулевом и ненулевом значениях напряжений, что соответствует области прерывистого (stick–slip) трения. Точка 3 отвечает режиму сухого трения (DF), при котором $P_a(\sigma)$ имеет единственный максимум, соответствующий $\sigma_0 = 0$. Точка 4 лежит в области, где имеется один максимум распределения вероятности при $\sigma_0 \neq 0$, отвечающий режиму жидкостного трения или скольжению.

На рис. 3.13 показана фазовая диаграмма, которая получена в результате численного анализа уравнений (3.57), (3.58), (3.17), (3.19) [52]. Подобная диаграмма приведена на рис. 3.2б для $a = 1$ и обобщена здесь на случай $a \neq 1$. Прямые 1 и 2 отвечают границе области жидкостного трения при $a \neq 1$ и $a = 1$ соответственно. Из диаграммы видно, что увеличение параметра a приводит к уменьшению области сухого трения, при этом двухфазная область SS увеличивается. Однако при малых a область сухого трения отодвигается к большим значениям I_T , а поскольку в действительности, как правило, шумы малы, то уменьшения трения следует ожидать в системах с малым показателем a . Также следует отметить, что изменение a в интервале $(0,1)$ не влияет на область жидкостного трения (SF). Представляется возможным подобрать такие флуктуационные параметры, при которых область сухого трения (DF) исчезает полностью (см. пункт 3.1.2).

Для учета деформационного дефекта модуля сдвига вместо τ_σ воспользуемся зависимостью $\tau_\sigma(\sigma)$ (2.51). В результате уравнение (3.47) принимает вид [52]:

$$\tau_p \dot{\sigma} = -\sigma^a \left(1 + \frac{\theta^{-1} - 1}{1 + \sigma/\alpha} \right) + g_\Theta \varepsilon + \sqrt{I_\sigma} \xi_1(t). \quad (3.62)$$

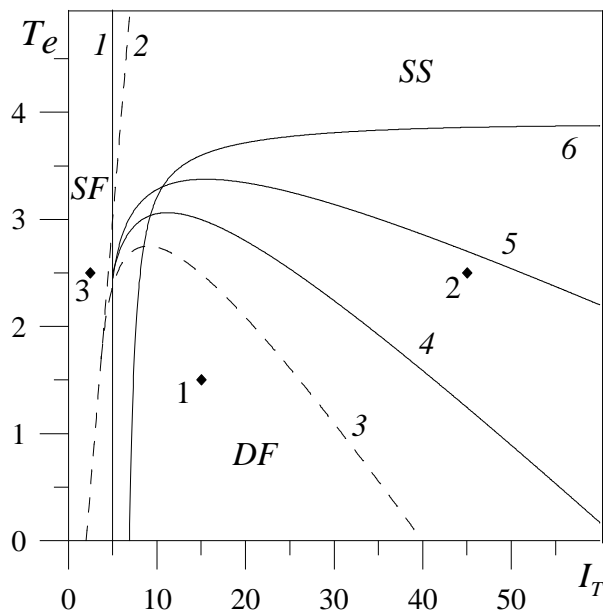


Рис. 3.13. Фазовая диаграмма системы при $g = 0.5, I_\sigma = 1, I_\varepsilon = 2.5$ с режимами сухого (DF), жидкостного (SF) и прерывистого (SS) трения. Кривые 3, 4, 5, 6 отвечают значениям $a = 1, 0.75, 0.5, 0.1$. Прямые 1 и 2 являются решениями уравнений (3.58) и (3.19)

Тогда в рамках адиабатического приближения ($\tau_\sigma \gg \tau_\varepsilon, \tau_T$) уравнения (3.48) и (3.49) приводят к зависимостям

$$\varepsilon(t) = \bar{\varepsilon} + \tilde{\varepsilon}\xi(t), \quad T(t) = \bar{T} + \tilde{T}\xi(t); \quad (3.63)$$

$$\bar{\varepsilon} \equiv \sigma^a (T_e - 1 + \sigma^{2a}) d_a(\sigma), \quad \tilde{\varepsilon} \equiv \sqrt{I_\varepsilon + I_T \sigma^{2a}} d_a(\sigma),$$

$$\bar{T} \equiv (T_e + 2\sigma^{2a}) d_a(\sigma), \quad \tilde{T} \equiv \sqrt{I_T + I_\varepsilon \sigma^{2a}} d_a(\sigma), \quad d_a(\sigma) \equiv (1 + \sigma^{2a})^{-1}. \quad (3.64)$$

Комбинирование равенств (3.62), (3.63) и (3.64) приводит к уравнению Ланжевена в виде (3.50), где τ_σ заменено на τ_p , сила $f_a(\sigma)$ задается соотношением

$$f_a(\sigma) \equiv -\sigma^a \left(1 + \frac{\theta^{-1} - 1}{1 + \sigma/\alpha} \right) + g_\theta \sigma^a [1 - (2 - T_e) d_a(\sigma)], \quad (3.65)$$

а эффективная интенсивность шума $I_a(\sigma)$ совпадает с выражением (3.51) при замене g на g_θ . Следует отметить, что синергетический потенциал определяется равенством

$$V = - \int_0^\sigma f_a(\sigma') d\sigma'. \quad (3.66)$$

Как и ранее, получим распределение вероятности (3.55), характеризующееся эффективным потенциалом (3.56) и нормировочной постоянной (3.15). Точки экстремума распределения определяются выражением

$$\frac{T_e - 2}{1 + \sigma^{2a}} + \frac{2ag\theta\sigma^{a-1}}{(1 + \sigma^{2a})^3} [2I_\varepsilon - I_T (1 - \sigma^{2a})] - \frac{1}{g\theta} \left(\frac{\theta^{-1} - 1}{1 + \sigma/\alpha} \right) = \frac{1 - g\theta}{g\theta}, \quad (3.67)$$

которое отличается от ранее полученного уравнения (3.57) только последним членом в левой части. Согласно (3.67), граница области существования жидкостного трения дается (3.58). Исследование уравнения (3.67) показывает, что соответствующая фазовая диаграмма качественно совпадает с показанной на рис. 3.13.

Для параметров кривых 2–4 на рисунке 3.12 (режимы *SS*, *DF* и *SF* соответственно) зависимости $|\sigma|(t)$ будут иметь вид, подобный приведенным на рис. 3.4. Однако при параметрах кривой 1 реализуется степенной вид распределения в области $\sigma \ll 1$, отвечающий самоподобному поведению твердоподобной смазки. Соответственно зависимость $|\sigma|(t)$ будет качественно отличаться от приведенных ранее. Рассмотрим более подробно указанный случай. Используя полученную ранее итерационную процедуру (3.36), рассчитаем соответствующую временную зависимость напряжений. При этом в выражении (3.36) обобщенная сила $f(\sigma)$ и эффективная интенсивность шума $I(\sigma)$ заменяются выражениями (3.51). Полученная зависимость приведена на рисунке 3.14. Рисунки 3.14а–г отличаются только масштабом и представляют одну и ту же реализацию решения уравнения Ланжевена $|\sigma|(t)$. Отметим, что на всех рисунках видны реализующиеся спонтанно узкие пики напряжений различной высоты. Данные пики соответствуют частичному плавлению смазки, однако в расплавленном состоянии она пребывает ограниченное время. Видно, что все панели рисунка (а–г) имеют подобный вид и качественно неотличимы друг от друга. Это означает, что в рассматриваемом случае нельзя выделить какие-либо характерные масштабы. Такая особенность отвечает самоподобному поведению системы. Так как распределение вероятности, соответствующее рассматриваемому решению уравнения Ланжевена, имеет также ненулевой максимум, с течением времени возможен переход в состояние, определяемое этим

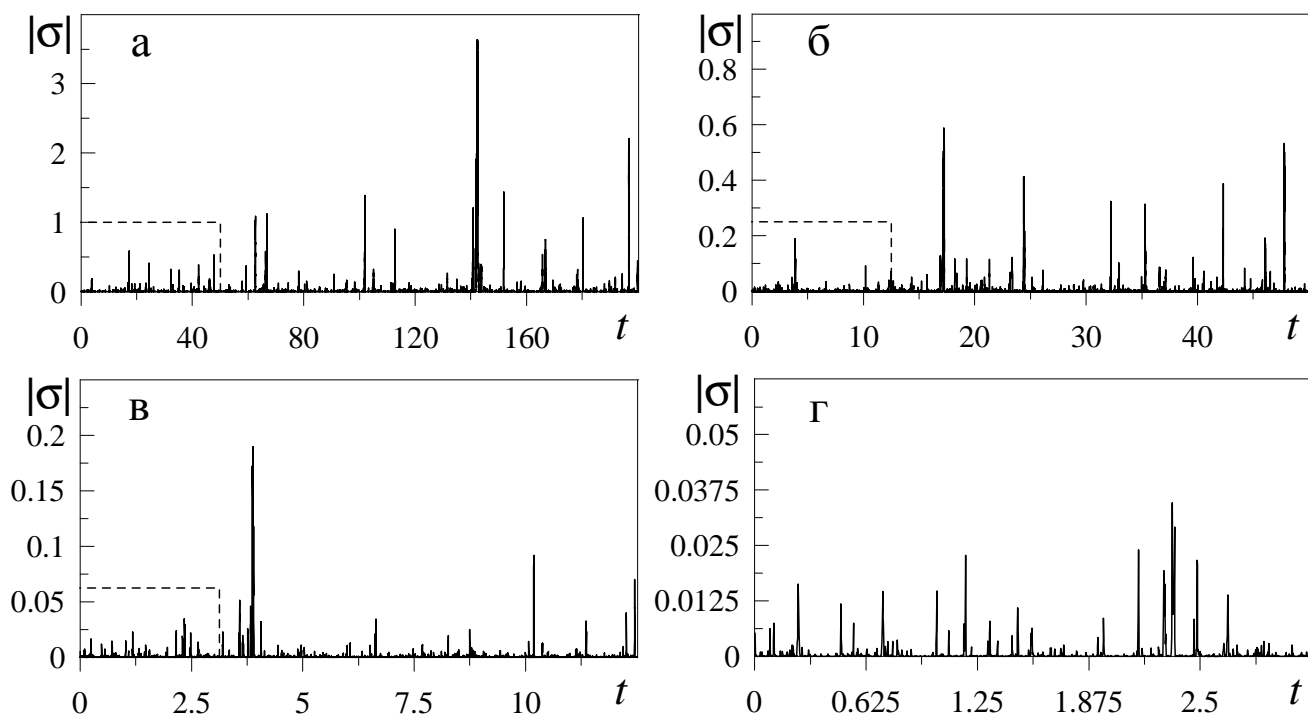


Рис. 3.14. Временная зависимость напряжений $|\sigma|(t)$, соответствующая параметрам кривой 1 на рисунке 3.12, при различных масштабах. Каждый последующий рисунок получается увеличением предыдущего в 4 раза, штриховой прямоугольник на каждом рисунке отвечает координатной области, показанной на следующем рисунке

максимумом, что отвечает плавлению смазки. При таком переходе система теряет свойства самоподобия, и устанавливается стационарный режим жидкостного трения. Однако поскольку наличие двух максимумов $P_a(\sigma)$ соответствует режиму stick–slip, с течением времени происходит обратный переход к твердopodobной структуре, и поведение системы снова становится самоподобным. Приведенная на рисунке 3.14 реализация $|\sigma|(t)$ выбрана таким образом, чтобы за рассматриваемое время переход в состояние, определяемое вторым максимумом $P_a(\sigma)$, не осуществился, поскольку целью данного пункта диссертации является выяснение особенностей самоподобного поведения.

3.2. Влияние коррелированных флуктуаций температуры на динамическую фазовую диаграмму

3.2.1. Основные уравнения

Данный подраздел посвящен описанию влияния коррелированных флуктуаций температуры на фазовую динамику граничного трения. Корреляцию флуктуаций можно представить как цветной шум [110]. Рассматриваемые корреляции температуры представляют процесс Орнштейна–Уленбека, описывающий броуновское движение (красный или коричневый шум). Важно, что учет такого вида шумов описывает так называемые эффекты памяти — каждое последующее значение шумящего сигнала зависит от предыдущего, шум является коррелированным. Данные эффекты имеют место при плавлении тонкой пленки смазки. Кроме того, введение корреляций температуры позволяет показать, что при плавлении смазки возможно существование нескольких стационарных режимов, переходы между которыми обеспечивают различные режимы прерывистого трения, которые были найдены экспериментально.

Учтем влияние флуктуаций температуры смазки путем введения в уравнение (2.17) стохастического источника $\lambda(t)$ [53–59, 168]

$$\tau_T \dot{T} = (T_e - T) - \sigma \varepsilon + \sigma^2 + \lambda(t). \quad (3.68)$$

Этот источник представляет процесс Орнштейна–Уленбека [165]:

$$\langle \lambda(t) \rangle = 0, \quad \langle \lambda(t) \lambda(t') \rangle = \frac{I}{\tau_\lambda} \exp\left(-\frac{|t - t'|}{\tau_\lambda}\right), \quad (3.69)$$

где I — интенсивность флуктуаций;

τ_λ — время корреляции.

Здесь λ и I измерены в единицах

$$\lambda_s = T_c, \quad I_s = T_c^2. \quad (3.70)$$

Процесс Орнштейна–Уленбека $\lambda(t)$ представляет реализацию коррелированных случайных блужданий. Подразумевается, что с увеличением скорости частицы

увеличивается вероятность ее столкновения с другой частицей. При этом все частицы возвращаются к нулевой скорости тем быстрее, чем больше их скорость. Процесс является цветным гауссовым шумом и может быть получен при решении уравнения Орнштейна—Уленбека:

$$\frac{d\lambda(t)}{dt} = -\frac{1}{\tau_\lambda}\lambda(t) - \frac{1}{\tau_\lambda}\xi(t), \quad (3.71)$$

где $\xi(t)$ представляет гауссов белый шум с нулевым средним значением и интенсивностью I (ср. с (3.4))

$$\langle \xi(t) \rangle = 0, \quad \langle \xi(t)\xi(t') \rangle = 2I\delta(t-t'). \quad (3.72)$$

При этом источник $\lambda(t)$ на больших временных интервалах подобен белому шуму $\xi(t)$, а на малых — броуновскому движению, и в стационарном пределе ($t, t' \gg \tau_\lambda$) имеет моменты (3.69).

Умножив (3.71) на dt получим стохастическое дифференциальное уравнение:

$$d\lambda(t) = -\frac{1}{\tau_\lambda}\lambda(t)dt - \frac{1}{\tau_\lambda}dW(t), \quad (3.73)$$

где винеровский процесс (3.34) обладает свойствами (ср. с (3.35)) [165]

$$\langle dW(t) \rangle = 0; \quad \langle (dW(t))^2 \rangle = 2I dt. \quad (3.74)$$

Для численной реализации $\lambda(t)$ решим уравнение (3.73), воспользовавшись при этом методом Эйлера. С учетом определения дискретного аналога дифференциала случайной силы $dW(t) \equiv \sqrt{\Delta t}W_n$ получим следующую итерационную процедуру:

$$\lambda_{n+1} = \lambda_n \left(1 - \frac{\Delta t}{\tau_\lambda} \right) - \frac{\sqrt{\Delta t}}{\tau_\lambda} W_n. \quad (3.75)$$

Решение производится на интервале $t \in [0, T]$, и при заданном количестве итераций N приращение времени определяется как $\Delta t = T/N$. Случайная сила W_n обладает свойствами (ср. с (3.37))

$$\langle W_n \rangle = 0, \quad \langle W_n W_{n'} \rangle = 0, \quad \langle W_n^2 \rangle \rightarrow 2I. \quad (3.76)$$

Ее адекватной математической моделью является модель Бокса—Мюллера (3.38) [166], где $\mu^2 = 2I$ — дисперсия.

На рис. 3.15 представлена реализация (3.38) для различных временных масштабов. Характер поведения для обоих масштабов подобен, шум является некоррелированным.

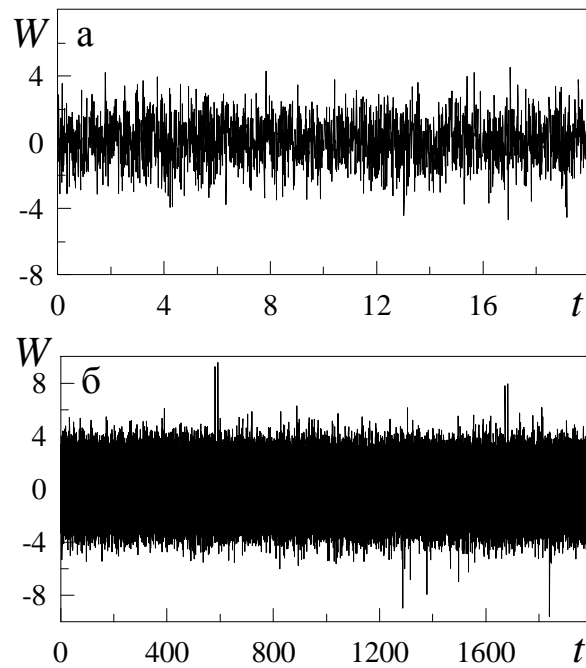


Рис. 3.15. Реализация белого шума (3.38) при $I = 1$ ($\mu^2 = 2I$): а — $N = 2 \cdot 10^3$, $T = 20$, $\Delta t = 0.01$; б — $N = 2 \cdot 10^5$, $T = 2 \cdot 10^3$, $\Delta t = 0.01$

Процесс Орнштейна—Уленбека $\lambda(t)$ для аналогичных интервалов времени представлен на рис. 3.16. Видно, что на коротких интервалах (рис. 3.16а) он подобен броуновскому движению, и здесь каждое последующее значение зависит от предыдущего, т.е. шум является коррелированным. На длинных же интервалах (рис. 3.16б) корреляция теряется, процесс становится подобным белому шуму, реализация которого показана на рис. 3.15. Поскольку в отличие от белого шума стационарный процесс Орнштейна—Уленбека имеет конечную дисперсию, его часто используют как модель реального шумового сигнала.

Следуя [110], выясним физический смысл величины I . Временная корреляция размерной температуры смазки T_D определяется средним значением произве-

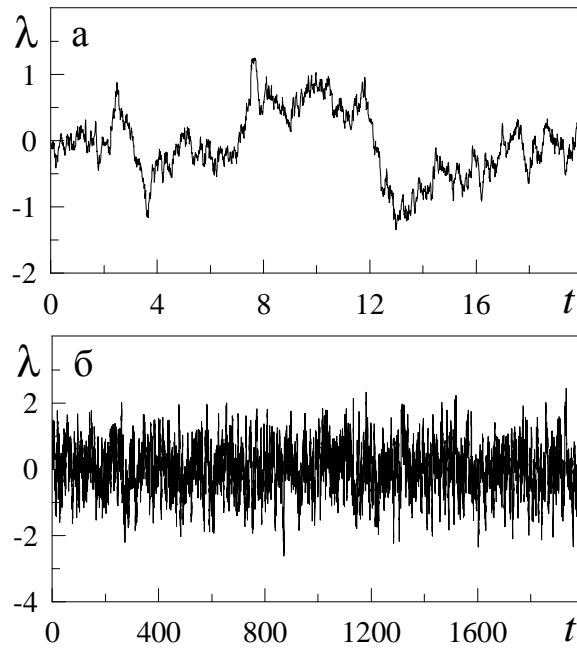


Рис. 3.16. Реализация цветного шума (3.75) при $I = 1$ ($\mu^2 = 2I$), $\tau_\lambda = 2.0$: а — $N = 2 \cdot 10^3$, $T = 20$, $\Delta t = 0.01$; б — $N = 2 \cdot 10^5$, $T = 2 \cdot 10^3$, $\Delta t = 0.01$

дения

$$\varphi(\tau) = \langle \Delta T_D(t) \Delta T_D(t + \tau) \rangle, \quad (3.77)$$

где $\Delta T_D(t)$ — разность между текущей и средней температурой. В рамках предположения о квазистационарности флуктуаций ΔT_D функция $\varphi(\tau)$ принимает вид:

$$\varphi(\tau) = \langle (\Delta T_D)^2 \rangle \exp(-\zeta|\tau|). \quad (3.78)$$

Здесь $1/\zeta$ задает время релаксации для установления равновесия. Полагая, что в формулах (3.77) и (3.78) моменты времени связаны равенством $t + \tau = t'$, получаем:

$$\varphi(t' - t) = \langle \Delta T_D(t) \Delta T_D(t') \rangle = \langle (\Delta T_D)^2 \rangle \exp(-\zeta|t' - t|). \quad (3.79)$$

Тогда подстановка среднего квадрата флуктуаций температуры $\langle (\Delta T_D)^2 \rangle = T_D^2/c_v$ в выражение (3.79) дает

$$\langle \Delta T_D(t) \Delta T_D(t') \rangle = \frac{T^2}{c_v} \exp(-\zeta|t' - t|). \quad (3.80)$$

Сравнивая данную формулу со вторым равенством (3.69) и учитывая единицы измерения (3.70) и последнюю в (2.14), для безразмерных величин λ , T и I получа-

ем:

$$\lambda(t) = \Delta T(t), \quad \tau_\lambda = \frac{1}{\zeta}, \quad I = \frac{T^2}{c_v \zeta}. \quad (3.81)$$

Следовательно, величина интенсивности шума I однозначно определяется температурой и теплоемкостью смазки c_v . На первый взгляд может показаться, что на приведенных далее фазовых диаграммах $T_e(I)$, каждому значению I отвечает единственное T_e , и вместо областей должна существовать кривая в указанных координатах, движение по которой и описывает эволюцию системы. Однако это не имеет место, поскольку параметр T_e представляет температуру термостата, которая, изменяясь произвольным образом, не определяет однозначно температуру T . Следует лишь полагать, что в результате самоорганизации системы определенному значению T_e может отвечать множество значений T , и, согласно (3.81), интенсивностей I , в различные моменты времени. Кроме того, к изменению I приводит вариация c_v с течением времени. Таким образом, уместно говорить о существовании фазовой диаграммы. Интенсивность I можно также изменять за счет произвольного выбора параметра ζ , характеризующего конкретную систему. Последнее означает, что в одних системах шум не оказывает существенного влияния на их поведение с течением времени, в других же — влияет критическим образом.

Однако здесь, не ограничиваясь таким подходом, флуктуации температуры понимаются в более широком смысле. Это связано с тем, что, как правило, термическое влияние оказывают различные внешние стохастические источники. Кроме того, шум можно равноправным образом интерпретировать как при помощи флуктуаций T , так и T_e . Данное представление шума часто используется при моделировании его в реальных физических системах [165].

Данная работа посвящена исследованию влияния стохастического источника $\lambda(t)$ на эволюцию напряжений $\sigma(t)$. Согласно экспериментальным данным для органических смазочных материалов [7, 8, 76], время релаксации напряжений при нормальном давлении составляет $\tau_\sigma \sim 10^{-10}$ с. Поскольку ультратонкая пленка смазки имеет менее четырех молекулярных слоев, температура релаксирует к значению T_e в течение времени, удовлетворяющего неравенству $\tau_T \ll \tau_\sigma$. Поэтому

предположим, что выполняются условия

$$\tau_\sigma, \tau_\varepsilon \gg \tau_T, \quad (3.82)$$

при которых температура смазки T следует за изменением сдвиговых компонент напряжений σ и деформации ε . Тогда в уравнении (3.68) можно выделить малый параметр, и положить $\tau_T \dot{T} \simeq 0$. В результате получаем выражение для температуры:

$$T = T_e - \sigma\varepsilon + \sigma^2 + \lambda(t). \quad (3.83)$$

Придадим системе (2.15), (2.16), (3.83) более простой вид, сведя ее к единственному уравнению для сдвиговых напряжений $\sigma(t)$. Для этого следует выразить ε и T через σ . Дифференцируя по времени уравнение для деформации ε , полученное из (2.15), имеем уравнение для $\dot{\varepsilon}$. Подставляя эти выражения для ε , $\dot{\varepsilon}$ и равенство (3.83) в (2.16), получим эволюционное уравнение в каноническом виде уравнения нелинейного стохастического осциллятора типа генератора Ван-дер-Поля:

$$m\ddot{\sigma} + \gamma(\sigma)\dot{\sigma} = f(\sigma) + \phi(\sigma)\lambda(t), \quad (3.84)$$

где коэффициент трения γ , сила f , амплитуда шума ϕ и параметр m , сводящийся к массе системы, определяются выражениями

$$\gamma(\sigma) \equiv \frac{1}{g} [\tau_\varepsilon + \tau_\sigma(1 + \sigma^2)], \quad f(\sigma) \equiv \sigma (T_e - 1 - g^{-1}) - \sigma^3 (g^{-1} - 1), \quad \phi(\sigma) \equiv \sigma, \quad m \equiv \frac{\tau_\sigma \tau_\varepsilon}{g}. \quad (3.85)$$

3.2.2. Метод эффективного потенциала

Найдем распределение системы в фазовом пространстве, параметризуемом обобщенными "координатой" σ и "импульсом" $p \equiv m\dot{\sigma}$ в зависимости от времени t . С этой целью воспользуемся методом эффективного потенциала, описанным в этом пункте на основе работ [168–173]. Уравнение Эйлера (3.84) представляется

в гамильтоновой форме

$$\dot{\sigma} = m^{-1}p, \quad (3.86)$$

$$\dot{p} = -m^{-1}\gamma(\sigma)p + f(\sigma) + \phi(\sigma)\lambda(t). \quad (3.87)$$

Статистическое исследование сводится к определению функции $\Pi(\sigma, p, t)$, представляющей плотность вероятности наличия значения напряжений σ и скорости его изменения $\dot{\sigma}$ в заданный момент времени t . Она является усредненной по шуму λ функцией распределения $\rho(\sigma, p, t)$ решений системы (3.86), (3.87):

$$\Pi(\sigma, p, t) = \langle \rho(\sigma, p, t) \rangle. \quad (3.88)$$

Будем предполагать, что функция $\rho = \rho(\sigma, p, t)$ удовлетворяет уравнению непрерывности

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \left[\frac{\partial}{\partial \sigma}(\dot{\sigma}\rho) + \frac{\partial}{\partial p}(\dot{p}\rho) \right] = 0. \quad (3.89)$$

Подставляя сюда равенства (3.86), (3.87), приходим к уравнению Лиувилля

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \left(\hat{L} + \hat{N}\lambda \right) \rho, \quad (3.90)$$

где введены операторы

$$\hat{L} \equiv -\frac{p}{m} \frac{\partial}{\partial \sigma} - \frac{\partial}{\partial p} \left(f - \frac{\gamma}{m} p \right), \quad (3.91)$$

$$\hat{N} \equiv -\phi \frac{\partial}{\partial p}. \quad (3.92)$$

В рамках представления взаимодействия микроскопическая функция распределения определяется выражением

$$\varpi = e^{-\hat{L}t} \rho, \quad (3.93)$$

и уравнение (3.90) принимает вид

$$\frac{\partial \varpi}{\partial t} = \hat{\mathcal{R}}\varpi, \quad \hat{\mathcal{R}} \equiv \lambda \left(e^{-\hat{L}t} \hat{N} e^{\hat{L}t} \right). \quad (3.94)$$

Метод кумулянтного разложения [173] с точностью до слагаемых порядка $O(\hat{\mathcal{R}}^2)$ приводит к линейному дифференциальному кинетическому уравнению

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle \varpi \rangle(t) = \left[\int_0^t \langle \hat{\mathcal{R}}(t) \hat{\mathcal{R}}(t') \rangle dt' \right] \langle \varpi \rangle(t). \quad (3.95)$$

Переход от представления взаимодействия к исходному дает уравнение для функции распределения (3.88)

$$\frac{\partial}{\partial t} \Pi(t) = \left\{ \hat{L} + \int_0^t \langle \lambda(\tau) \lambda(0) \rangle \left[\hat{N} \left(e^{\hat{L}\tau} \hat{N} e^{-\hat{L}\tau} \right) \right] d\tau \right\} \Pi(t). \quad (3.96)$$

Учитывая, что физическое время t намного превышает время корреляции шума τ_λ , верхний предел интегрирования можно положить равным ∞ . Тогда разложение экспонент в (3.96) приводит к выражению

$$\frac{\partial \Pi}{\partial t} = \left(\hat{L} + \hat{\Lambda} \right) \Pi, \quad (3.97)$$

где оператор рассеяния

$$\hat{\Lambda} \equiv \sum_{n=0}^{\infty} \hat{\Lambda}^{(n)}, \quad \hat{\Lambda}^{(n)} \equiv C^{(n)} \left(\hat{N} \hat{L}^{(n)} \right) \quad (3.98)$$

определяется коммутаторами по рекуррентной формуле

$$\hat{L}^{(n+1)} = [\hat{L}, \hat{L}^{(n)}], \quad \hat{L}^{(0)} \equiv \hat{N} \quad (3.99)$$

($[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$) и моментами корреляционной функции (3.69)

$$C^{(n)} = \frac{1}{n!} \int_0^{\infty} \tau^n \langle \lambda(\tau) \lambda(0) \rangle d\tau. \quad (3.100)$$

Первые из них равны

$$C^{(0)} = I, \quad C^{(1)} = I\tau_\lambda. \quad (3.101)$$

В общем случае дальнейшее рассмотрение не представляется возможным, поэтому воспользуемся упрощающим предположением, которое заключается в выделении малого параметра $\epsilon \ll 1$, совпадающего с числом Кубо [173]. Полагая в уравнении (3.84) коэффициент $m = \epsilon^2$ и измеряя обобщенный "импульс" в единицах ϵ , исследуем случай передемпфированного осциллятора, в котором сила жидкого трения превосходит остальные составляющие в $\epsilon^{-1} \gg 1$ раз. Тогда уравнения (3.86), (3.87) принимают вид

$$\frac{\partial \sigma}{\partial t} = \epsilon^{-1} p, \quad \frac{\partial p}{\partial t} = -\epsilon^{-2} \gamma(\sigma) p + \epsilon^{-1} [f(\sigma) + \phi(\sigma) \lambda(t)]. \quad (3.102)$$

Соответственно уравнение Фоккера–Планка (3.97) записывается в форме

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} - \widehat{L}\right) \Pi = \epsilon^{-2} \widehat{\Lambda} \Pi, \quad (3.103)$$

где оператор

$$\widehat{L} \equiv \epsilon^{-1} \widehat{L}_1 + \epsilon^{-2} \widehat{L}_2 \quad (3.104)$$

состоит из компонент

$$\widehat{L}_1 \equiv -p \frac{\partial}{\partial \sigma} - f \frac{\partial}{\partial p}, \quad \widehat{L}_2 \equiv \gamma \frac{\partial}{\partial p} p. \quad (3.105)$$

Оператор рассеяния $\widehat{\Lambda}$ определяется выражениями (3.92), (3.98) – (3.100) и с точностью до слагаемых второго порядка малости имеет вид

$$\widehat{\Lambda} = \left(C^{(0)} + \gamma C^{(1)}\right) \phi^2 \frac{\partial^2}{\partial p^2} + \epsilon C^{(1)} \phi^2 \left[-\frac{1}{\phi} \left(\frac{\partial \phi}{\partial \sigma}\right) \left(\frac{\partial}{\partial p} + p \frac{\partial^2}{\partial p^2}\right) + \frac{\partial^2}{\partial \sigma \partial p} \right] + O(\epsilon^2). \quad (3.106)$$

Поскольку плавление смазки характеризуется напряжением σ и временем t , то рассмотрим проекцию функции распределения на полупространство (σ, t) . Для этого перейдем к уравнению Фоккера–Планка относительно функции $P(\sigma, t)$, используя моменты исходного распределения

$$P_n(\sigma, t) \equiv \int p^n \Pi(\sigma, p, t) dp, \quad (3.107)$$

нулевой из которых дает требуемый результат. Умножая уравнение (3.103) на p^n и интегрируя по всем импульсам, приходим к рекуррентному соотношению

$$\begin{aligned} \epsilon^2 \frac{\partial P_n}{\partial t} - n\gamma P_n + \epsilon \left(\frac{\partial P_{n+1}}{\partial \sigma} + n f P_{n-1} \right) &= n(n-1) \left(C^{(0)} + \gamma C^{(1)} \right) \phi^2 P_{n-2} + \\ &+ \epsilon n C^{(1)} \left[\phi^2 \frac{\partial P_{n-1}}{\partial \sigma} - n \phi \left(\frac{\partial \phi}{\partial \sigma} \right) P_{n-1} \right] + O(\epsilon^2). \end{aligned} \quad (3.108)$$

Далее на основе иерархического подхода к (3.108) запишем уравнение Фоккера–Планка. При $n = 0$ получаем уравнение для искомой функции $P = P_0(\sigma, t)$:

$$\frac{\partial P}{\partial t} = -\epsilon^{-1} \frac{\partial P_1}{\partial \sigma}. \quad (3.109)$$

Момент первого порядка P_1 задается равенством

$$P_1 = \frac{\epsilon}{\gamma} \left\{ f P + \frac{\partial P_2}{\partial \sigma} - C^{(1)} \left[\phi^2 \frac{\partial P}{\partial \sigma} - \phi \left(\frac{\partial \phi}{\partial \sigma} \right) P \right] \right\}, \quad (3.110)$$

следующим из (3.108), где положено $n = 1$ и учитываются члены первого порядка по $\epsilon \ll 1$. Учет членов нулевого порядка по ϵ при $n = 2$ позволяет записать выражение для момента второго порядка P_2 :

$$P_2 = - \left(\frac{C^{(0)}}{\gamma} + C^{(1)} \right) \phi^2 P. \quad (3.111)$$

В результате уравнение Фоккера–Планка

$$\frac{\partial P}{\partial t} = - \frac{\partial}{\partial \sigma} \left(D^{(1)} P \right) + \frac{\partial}{\partial \sigma} \left(D^{(2)} \frac{\partial P}{\partial \sigma} \right) \quad (3.112)$$

выражается через коэффициенты дрейфа и диффузии

$$D^{(1)} = \frac{1}{\gamma} \left\{ f - I \phi^2 \frac{\partial \gamma^{-1}}{\partial \sigma} - \phi \frac{\partial \phi}{\partial \sigma} \left(\frac{2I}{\gamma} + I \tau_\lambda \right) \right\}, \quad (3.113)$$

$$D^{(2)} = \frac{\phi^2}{\gamma} \left(\frac{I}{\gamma} + 2I \tau_\lambda \right). \quad (3.114)$$

Стационарное решение уравнения (3.112) приводит к распределению

$$P(\sigma) = \mathcal{Z}^{-1} \exp \{ -U(\sigma) \}, \quad (3.115)$$

которое задается эффективным потенциалом

$$U(\sigma) = - \int_0^\sigma \frac{D^{(1)}(x)}{D^{(2)}(x)} dx \quad (3.116)$$

и нормировочной константой

$$\mathcal{Z} = \int_0^\infty d\sigma \exp \{ -U(\sigma) \}. \quad (3.117)$$

Согласно выражениям (3.113), (3.114), $D^{(1)}$ и $D^{(2)}$ имеют вид:

$$D^{(1)} = \frac{g}{\tau_\epsilon + \tau_\sigma(1 + \sigma^2)} \left\{ \sigma^3 \left[\frac{2I g \tau_\sigma}{[\tau_\epsilon + \tau_\sigma(1 + \sigma^2)]^2} + \frac{g - 1}{g} \right] + \sigma \left[T_e - \frac{1 + g}{g} - \frac{2I g}{\tau_\epsilon + \tau_\sigma(1 + \sigma^2)} - I \tau_\lambda \right] \right\}, \quad (3.118)$$

$$D^{(2)} = \frac{I g \sigma^2}{\tau_\epsilon + \tau_\sigma(1 + \sigma^2)} \left[\frac{g}{\tau_\epsilon + \tau_\sigma(1 + \sigma^2)} + 2\tau_\lambda \right]. \quad (3.119)$$

3.2.3. Непрерывное превращение

Распределение (3.115), показанное на рис. 3.17, обладает максимумами, положения которых определяются набором величин T_e , g , I , τ_λ , τ_ε и τ_σ . При малых значениях температуры трущихся поверхностей T_e реализуется единственный максимум в точке $\sigma_0 = 0$, соответствующий твердоподобному состоянию смазки и режиму сухого трения. С ростом T_e появляется максимум в точке $\sigma_0 \neq 0$, отвечающий стационарному состоянию, в котором происходит спонтанное появление сдвиговых напряжений, приводящее к плавлению смазки, переходу к режиму жидкостного трения и, как следствие, скольжению. С дальнейшим увеличением T_e максимум при нулевом значении напряжения исчезает. Это происходит при критическом значении температуры T_e , которое задается интенсивностью I , временем корреляции τ_λ в случайном изменении температуры смазки T , параметром $g = G/G_0$, а также временами релаксации напряжений и деформации.

Стационарное состояние сдвиговых напряжений определяется условием эк-

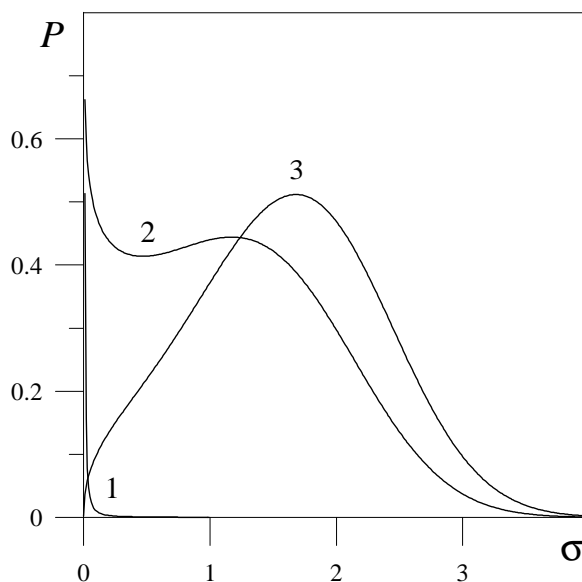


Рис. 3.17. Функция распределения сдвиговых напряжений для перехода второго рода при $g=0.2$, $\tau_\sigma=\tau_\varepsilon=0.1$, $\tau_\lambda=0.2$ и $I = 5$. Кривые 1, 2, 3 отвечают температурам $T_e = 5, 16, 20$ соответственно

стремума распределения (3.115)

$$\frac{D^{(1)}(\sigma)}{D^{(2)}(\sigma)} = 0. \quad (3.120)$$

Подставляя сюда выражения (3.118), (3.119), приходим к уравнению

$$\left\{ T_e - \frac{1+g}{g} - \sigma^2 \left(\frac{1-g}{g} \right) - I\tau_\lambda \right\} [\tau_\varepsilon + \tau_\sigma(1 + \sigma^2)]^2 - 2Ig(\tau_\varepsilon + \tau_\sigma) = 0. \quad (3.121)$$

Его решение показано на рис. 3.18, согласно которому рост интенсивности шума I приводит к появлению на монотонной зависимости $\sigma_0(T_e)$ двузначного участка, присущего переходам первого рода. Полагая в (3.121) $\sigma = 0$, находим предельное

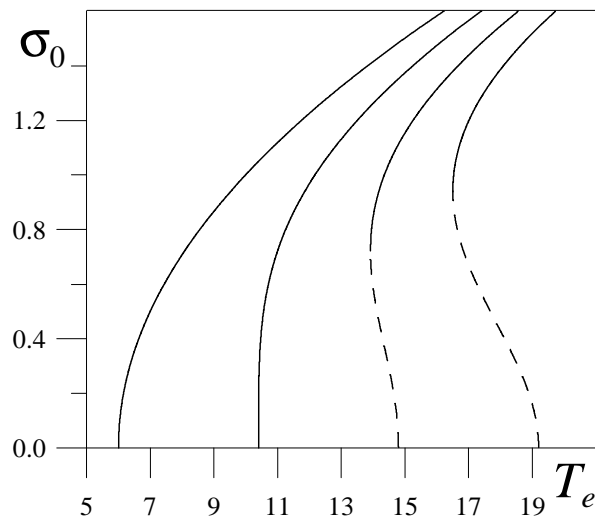


Рис. 3.18. Зависимость стационарного значения сдвиговых напряжений σ_0 от температуры T_e при параметрах рис. 3.17 и $I = 0, 2, 4, 6$ (соответствующие кривые расположены слева направо)

значение температуры поверхностей трения

$$T_{e0} = \frac{1+g}{g} + \left(\tau_\lambda + \frac{2g}{\tau_\varepsilon + \tau_\sigma} \right) I, \quad (3.122)$$

которое обеспечивает переход системы к жидкостному режиму трения. Видно, что T_{e0} растет при увеличении интенсивности шума I и времени корреляции τ_λ . Обратным образом влияют величины времен релаксации сдвиговых напряжений и деформации. На фазовой диаграмме, приведенной на рис. 3.19, реализуются области сухого (DF), жидкостного (SF) и прерывистого (SS) режимов трения. Рост вре-

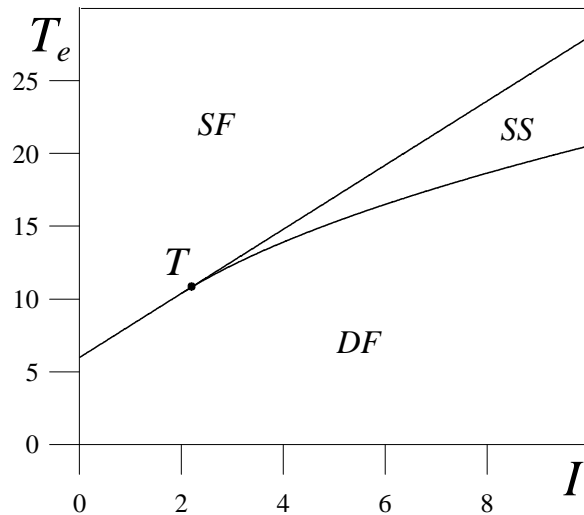


Рис. 3.19. Фазовая диаграмма, соответствующая параметрам рис. 3.17, с областями жидкостного (SF), сухого (DF) и прерывистого (SS) трения (T — трикритическая точка)

мени корреляции τ_λ приводит к увеличению значения T_e , отвечающего трикритической точке T при определенной интенсивности I . Очевидно, что при этом область сухого трения расширяется, а жидкостное и прерывистое трение становится все более трудно реализуемым, поскольку наступает при большем значении T_e .

Как видно, увеличение температуры сдвигаемых поверхностей переводит смазку в жидкостный режим трения. Это можно понять при помощи рассмотрения уравнения (3.84), описывающего затухающие колебания. Здесь температура поверхностей входит только в выражение для вынуждающей силы f , которая увеличивается с ростом T_e . При увеличении значения эффективной силы в (3.84) амплитуда колебаний возрастает, и реализуется более продолжительный колебательный процесс до момента установления в системе определенного режима трения.

3.2.4. Учет деформационного дефекта модуля сдвига

Для учета дефекта модуля (см. подраздел 2.4) в уравнении (2.15) вместо τ_σ необходимо использовать зависимость $\tau_\sigma(\sigma)$ (2.51). В результате оно принимает

вид:

$$\tau_p \dot{\sigma} = -\sigma \left(1 + \frac{\theta^{-1} - 1}{1 + \sigma/\alpha} \right) + g_{\Theta} \varepsilon, \quad (3.123)$$

где введены постоянные $g_{\Theta} = G^2/\Theta G_0$ и $\alpha = \sigma_p/\sigma_s$. Тогда в рамках приближения (3.82) система (3.123), (2.16) и (2.17), как и ранее, сводится к уравнению (3.84), где коэффициент трения γ , сила f , амплитуда шума ϕ и параметр m определяются выражениями

$$\begin{aligned} \gamma(\sigma) &\equiv \frac{1}{g_{\Theta}} \left[\tau_{\varepsilon} \left(1 + \frac{\theta^{-1} - 1}{(1 + \sigma/\alpha)^2} \right) + \tau_p (1 + \sigma^2) \right], \\ f(\sigma) &\equiv \sigma \left[T_e - 1 - \frac{1}{g_{\Theta}} \left(\frac{\theta^{-1} + \sigma/\alpha}{1 + \sigma/\alpha} \right) \right] - \sigma^3 \left[\frac{1}{g_{\Theta}} \left(\frac{\theta^{-1} + \sigma/\alpha}{1 + \sigma/\alpha} \right) - 1 \right], \\ \phi(\sigma) &\equiv \sigma, \quad m \equiv \frac{\tau_p \tau_{\varepsilon}}{g_{\Theta}}. \end{aligned} \quad (3.124)$$

Согласно методу, описанному в пункте 3.2.2, получим уравнение Фоккера–Планка (3.112) с коэффициентами дрейфа $D^{(1)}$ и диффузии $D^{(2)}$:

$$\begin{aligned} D^{(1)} &= \frac{1}{\gamma} \left\{ \sigma \left[T_e - 1 - \frac{1}{g_{\Theta}} \left(\frac{\theta^{-1} + \sigma/\alpha}{1 + \sigma/\alpha} \right) \right] + \sigma^3 \left[1 - \frac{1}{g_{\Theta}} \left(\frac{\theta^{-1} + \sigma/\alpha}{1 + \sigma/\alpha} \right) \right] - \right. \\ &\quad \left. - I\sigma\tau_{\lambda} - \frac{2I\sigma}{\gamma^2} \left[\gamma - \frac{\sigma}{g_{\Theta}} \left(\frac{\tau_{\varepsilon}(1 - \theta^{-1})}{(1 + \sigma/\alpha)^3 \alpha} + \sigma\tau_p \right) \right] \right\}, \end{aligned} \quad (3.125)$$

$$D^{(2)} = \frac{I\sigma^2}{\gamma} [\gamma^{-1} + 2\tau_{\lambda}]. \quad (3.126)$$

Стационарное состояние сдвиговых напряжений определяется условием (3.120), которое с учетом выражений (3.125), (3.126) принимает вид:

$$\begin{aligned} &\left\{ T_e - 1 - \frac{1}{g_{\Theta}} \left(\frac{\theta^{-1} + \sigma/\alpha}{1 + \sigma/\alpha} \right) - \sigma^2 \left[\frac{1}{g_{\Theta}} \left(\frac{\theta^{-1} + \sigma/\alpha}{1 + \sigma/\alpha} \right) - 1 \right] - I\tau_{\lambda} \right\} \gamma^2 - \\ &- 2I\gamma + \frac{2I\sigma}{g_{\Theta}} \left\{ \tau_p \sigma - \tau_{\varepsilon} \frac{\theta^{-1} - 1}{\alpha(1 + \sigma/\alpha)^3} \right\} = 0. \end{aligned} \quad (3.127)$$

Полагая в (3.127) $\sigma = 0$, находим равенство, аналогичное по смыслу (3.122), которое дает границу существования максимума распределения (3.115) при нулевом значении напряжения, соответствующего твердоподобному состоянию смазки

$$T_{e0} = \frac{\theta^{-1} + g_{\Theta}}{g_{\Theta}} + \left(\tau_{\lambda} + \frac{2g_{\Theta}}{\theta^{-1}\tau_{\varepsilon} + \tau_p} \right) I. \quad (3.128)$$

Зависимость стационарных значений сдвиговых напряжений от температуры поверхностей трения $\sigma_0(T_e)$ является решением уравнения (3.127) и показана

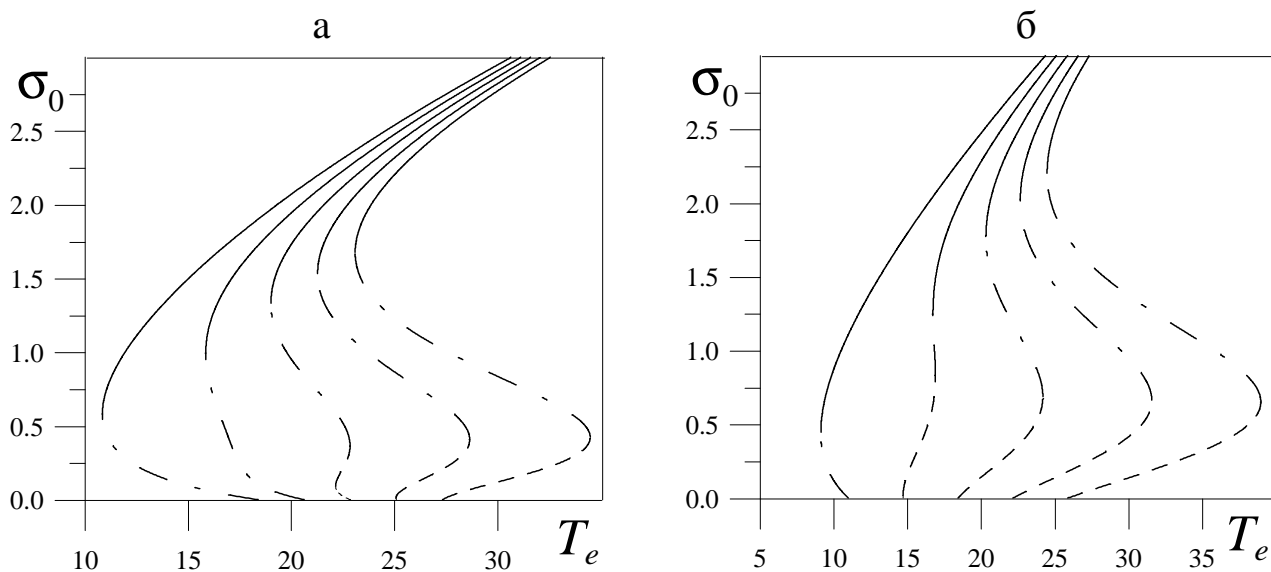


Рис. 3.20. Зависимость стационарного значения сдвиговых напряжений σ_0 от температуры T_e для перехода первого рода при $\tau_p = \tau_\varepsilon = \tau_\lambda = 0.1$, $\theta^{-1} = 7$ и $I=0, 2, 4, 6, 8$ (соответствующие кривые расположены слева направо): а — $g_\Theta=0.4$, $\alpha=0.3$; б — $g_\Theta=0.7$, $\alpha=0.8$

на рис. 3.20. Из рисунка видно, что возрастание интенсивности шума I приводит к появлению двух стационарных состояний, которые отвечают максимумам функции распределения $P(\sigma)$ (3.115) при ненулевых напряжениях σ . Отсюда можно заключить, что существуют два стационарных значения напряжения, при которых плавится смазка [35], определяющиеся величинами T_e , g_Θ , I , θ , α , τ_λ , τ_p и τ_ε . Меньшее из этих значений отвечает метастабильному жидкоподобному состоянию смазки (штриховая кривая), а большее (сплошная) — ее устойчивому жидкоподобному состоянию, их разделяет неустойчивое состояние (штрихпунктирная), которое соответствует минимуму вероятности (3.115).

В данном случае наблюдается более сложный вид для вероятности и, как следствие, более сложные фазовые диаграммы. Здесь реализуются пять различных режимов трения. Рассмотрим каждый из них в отдельности. На рис. 3.21 показаны зависимости $P(\sigma)$ для различных режимов трения. Кривые 1 — 5 отвечают областям сухого (DF), прерывистого (SS), прерывистого и жидкостного

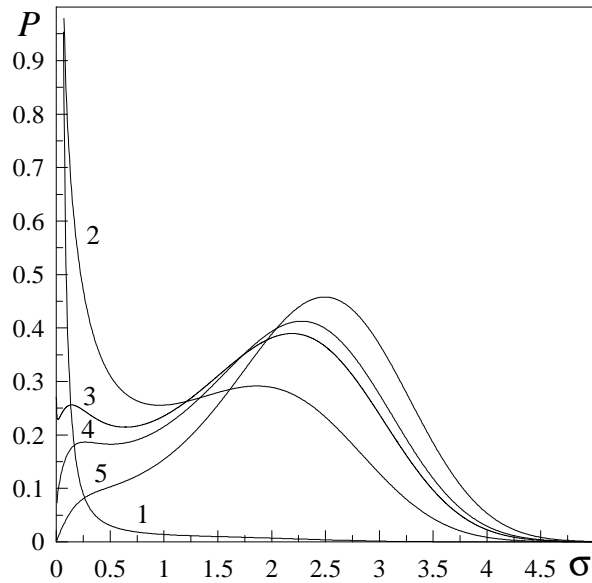


Рис. 3.21. Функция распределения сдвиговых напряжений для перехода первого рода при $\tau_p = \tau_\varepsilon = \tau_\lambda = 0.1$, $\theta^{-1} = 7$, $\alpha = 0.3$, $g_\Theta = 0.4$, $I = 4.5$. Кривые 1 – 5 отвечают температурам $T_e = 16, 21, 23.25, 24, 26$

($SS+SF$), жидкостных метастабильного и устойчивого ($MSF+SF$), жидкостного трения (SF).

Фазовые диаграммы, характерные для данной системы, представлены на рис. 3.22. Здесь область DF отвечает существованию лишь одного максимума вероятности $P(\sigma)$ при нулевом значении напряжения σ . Этот максимум соответствует твердоподобному состоянию смазки или сухому трению [35, 47]. В области прерывистого трения (SS) сосуществуют твердоподобная и жидкоподобная фазы смазки, т.е. кроме нулевого на зависимости $P(\sigma)$ появляется еще один максимум, который отвечает плавлению смазки или жидкостному трению. Для области $SS+SF$ является характерным самый сложный вид функции $P(\sigma)$. Здесь сосуществуют твердоподобное, метастабильное и устойчивое жидкоподобные состояния смазки, отвечающие максимумам $P(\sigma)$. Это означает возможность реализации прерывистого (stick–slip) трения, при котором происходят переходы между динамическими режимами трения, соответствующими трем указанным состояниям. Следует отметить, что данная область в отличие от других при изменении па-

раметров системы может не реализоваться (см. рис. 3.22б). Область SF отвечает устойчивому жидкостному трению, т.е. жидкоподобной фазе смазки при единственном стационарном значении напряжения. В области прерывистого движения $MSF+SF$ метастабильный и устойчивый жидкостные режимы трения могут сменять друг друга. Характерно, что переход из области $SS+SF$ в $MSF+SF$ сопровождается исчезновением в системе сухого трения. С ростом времени корреляции шума τ_λ область сухого трения (DF) расширяется, а область жидкостного трения (SF) уменьшается.

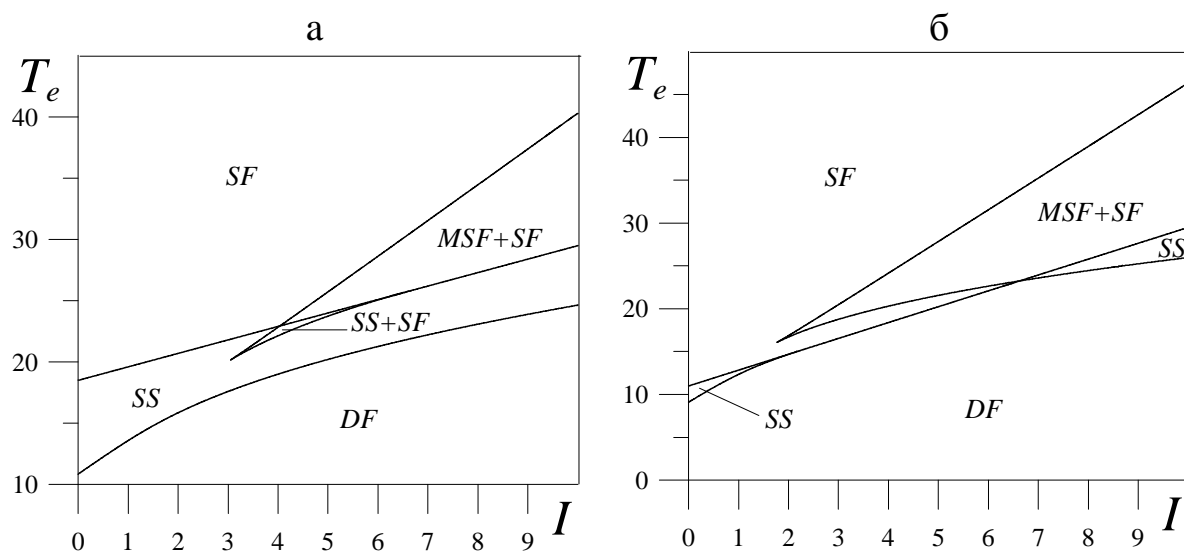


Рис. 3.22. Фазовые диаграммы с областями жидкостного (SF), сухого (DF) и прерывистых (SS , $MSF+SF$, $SS+SF$) режимов трения, соответствующие параметрам рис. 3.20а и 3.20б

3.2.5. Самоподобное поведение

3.2.5.1. Непрерывное превращение

В основных уравнениях (2.15) – (2.17) напряжение σ стоит в первой степени, однако в общем случае ее показатель a может быть не целым, а дробным:

$$\tau_\sigma \dot{\sigma} = -\sigma^a + g\varepsilon, \quad (3.129)$$

$$\tau_\varepsilon \dot{\varepsilon} = -\varepsilon + (T - 1)\sigma^a, \quad (3.130)$$

$$\tau_T \dot{T} = (T_e - T) - \sigma^a \varepsilon + \sigma^{2a} + \lambda(t). \quad (3.131)$$

С помощью учета некоррелированного шума сдвиговых напряжений и деформации, а также температуры пленки смазки в пункте 3.1.5 показано, что такая система описывает определяемый однородной функцией распределения (3.45) самоподобный режим, в котором отсутствует характерный масштаб напряжений [49, 51, 167].

Данный пункт посвящен исследованию влияния стохастического источника $\lambda(t)$ на эволюцию напряжений $\sigma(t)$ в самоподобном режиме [54]. В рамках приближения (3.82) получаем выражение для температуры:

$$T = T_e - \sigma^a \varepsilon + \sigma^{2a} + \lambda(t). \quad (3.132)$$

В эволюционном уравнении в каноническом виде уравнения нелинейного стохастического осциллятора типа генератора Ван-дер-Поля (3.84) коэффициент трения γ , сила f , амплитуда шума ϕ и параметр m определяются выражениями

$$\begin{aligned} \gamma(\sigma) &\equiv \frac{1}{g} [\tau_\varepsilon a \sigma^{a-1} + \tau_\sigma (1 + \sigma^{2a})], & f(\sigma) &\equiv \sigma^a (T_e - 1 - g^{-1}) - \sigma^{3a} (g^{-1} - 1), \\ \phi(\sigma) &\equiv \sigma^a, & m &\equiv \frac{\tau_\sigma \tau_\varepsilon}{g}. \end{aligned} \quad (3.133)$$

Найдем функцию распределения системы в зависимости от напряжений σ . С этой целью воспользуемся методом эффективного потенциала, описанным в пункте 3.2.2. В результате получаем уравнение Фоккера–Планка (3.112), где коэффициенты $D^{(1)}$ и $D^{(2)}$ имеют вид:

$$\begin{aligned} D^{(1)} &= \frac{g}{\tau_\varepsilon a \sigma^{a-1} + \tau_\sigma (1 + \sigma^{2a})} \left\{ \sigma^{3a} \left[I g a \left(\frac{2\tau_\sigma \sigma^{a-1} + \tau_\varepsilon (a-1)\sigma^{-2}}{[\tau_\varepsilon a \sigma^{a-1} + \tau_\sigma (1 + \sigma^{2a})]^2} \right) + \frac{g-1}{g} \right] + \right. \\ &+ \left. \sigma^a \left[T_e - \frac{1+g}{g} - I a \sigma^{a-1} \left(\frac{2g}{\tau_\varepsilon a \sigma^{a-1} + \tau_\sigma (1 + \sigma^{2a})} + \tau_\lambda \right) \right] \right\}, \end{aligned} \quad (3.134)$$

$$D^{(2)} = \frac{I g \sigma^{2a}}{\tau_\varepsilon a \sigma^{a-1} + \tau_\sigma (1 + \sigma^{2a})} \left[\frac{g}{\tau_\varepsilon a \sigma^{a-1} + \tau_\sigma (1 + \sigma^{2a})} + 2\tau_\lambda \right]. \quad (3.135)$$

Распределение (3.115), показанное на рис. 3.23, обладает максимумами, положения которых определяются набором величин T_e , g , I , a , τ_λ , τ_ε и τ_σ . При малых значениях температуры трущихся поверхностей T_e реализуется единственный максимум в точке $\sigma_0 = 0$, соответствующий твердоподобному состоянию смазки и режиму

сухого трения (кривая 1). С ростом T_e появляется максимум в точке $\sigma_0 \neq 0$, отвечающий стационарному состоянию, в котором происходит спонтанное появление сдвиговых напряжений, приводящее к плавлению смазки, переходу к режиму жидкостного трения и, как следствие, скольжению. Как показано кривой 2 на рис. 3.23, с дальнейшим увеличением T_e два указанных максимума сосуществуют. Исчезновение нулевого максимума $\sigma_0 = 0$ происходит только в случае отсутствия в системе шума ($I = 0$) при превышении критического значения температуры T_e (2.28), которое определяется параметром $g = G/G_0$. Сосуществование максимумов $P(\sigma)$, соответствующих нулевому и ненулевому значениям напряжений, отвечает области прерывистого (stick–slip) трения, при котором происходят переходы между указанными динамическими режимами трения. Как видно из рис. 3.23, распределение (3.115) принимает степенной вид (3.45) в области $\sigma \ll 1$ даже при низких температурах T_e , отвечающих сухому трению. Это означает, что корреляции флуктуаций приводят к возникновению самоподобного режима поведения твердopodobной смазки.

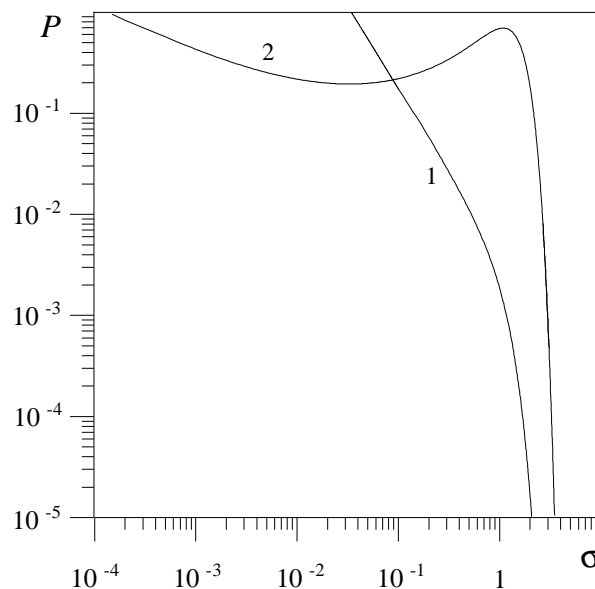


Рис. 3.23. Функция распределения сдвиговых напряжений для перехода второго рода при $g = 0.2$, $\tau_\sigma = \tau_\varepsilon = \tau_\lambda = 0.1$, $a = 0.75$ и $I = 2$. Кривые 1, 2 отвечают температурам $T_e = 6, 12$ соответственно

Стационарное состояние сдвиговых напряжений определяется условием экстремума (3.120) распределения (3.115). Подставляя сюда выражения (3.134), (3.135), приходим к уравнению

$$\left\{ T_e - \frac{1+g}{g} - \sigma^{2a} \left(\frac{1-g}{g} \right) - I\tau_\lambda a \sigma^{a-1} \right\} [\tau_\varepsilon a \sigma^{a-1} + \tau_\sigma (1 + \sigma^{2a})]^2 - Iga\sigma^{a-1} [\tau_\varepsilon \sigma^{a-1}(a+1) + 2\tau_\sigma] = 0. \quad (3.136)$$

Его решение показано на рис. 3.24, согласно которому рост интенсивности шума I приводит к появлению на монотонной зависимости $\sigma_0(T_e)$ двузначного участка, присущего переходам первого рода. При $a \neq 1$ в (3.136) можно положить $\sigma = 0$ только в случае отсутствия шума ($I = 0$). Следовательно, предельное значение температуры сдвигаемых поверхностей (2.28), обеспечивающее переход системы к жидкостному трению, отвечает точке A на фазовой диаграмме (рис. 3.25). Здесь режиму жидкостного трения (SF) соответствуют лишь участок оси ординат выше A , и основное пространство занимают области сухого (DF) и прерывистого (SS) трения. Рост времени корреляции τ_λ приводит к расширению области сухого трения, а прерывистое трение становится при этом все более трудно реализуемым. Очевидно, что на характер участка жидкостного трения продолжительность времени корреляции не влияет. Критические значения параметров состояния определяются условием $\left| \frac{d\sigma}{dT_e} \right| = \infty$, приводящим к уравнению:

$$\left\{ 2a \frac{g-1}{g} \sigma^{a-1} - I\tau_\lambda a(a-1) \sigma^{a-2} \right\} [\tau_\varepsilon a \sigma^{a-1} + \tau_\sigma (1 + \sigma^{2a})]^2 + 2a \left\{ T_e - \frac{1+g}{g} - \sigma^{2a} \frac{1-g}{g} - I\tau_\lambda a \sigma^{a-1} \right\} [\tau_\varepsilon a \sigma^{a-1} + \tau_\sigma (1 + \sigma^{2a})] \times [\tau_\varepsilon(a-1)\sigma^{a-2} + 2\tau_\sigma \sigma^{2a-1}] - 2Iga\sigma^{a-2}(a-1) [\tau_\sigma + \tau_\varepsilon(a+1)\sigma^{a-1}] = 0. \quad (3.137)$$

Анализ приведенных уравнений показывает, что при переходе от равенства $a = 1$ к случаю $0 < a < 1$ существенное изменение наблюдается для зависимости стационарных сдвиговых напряжений σ_0 от температуры T_e . При стационарном детерминистическом рассмотрении система (3.129) – (3.131) приводит к

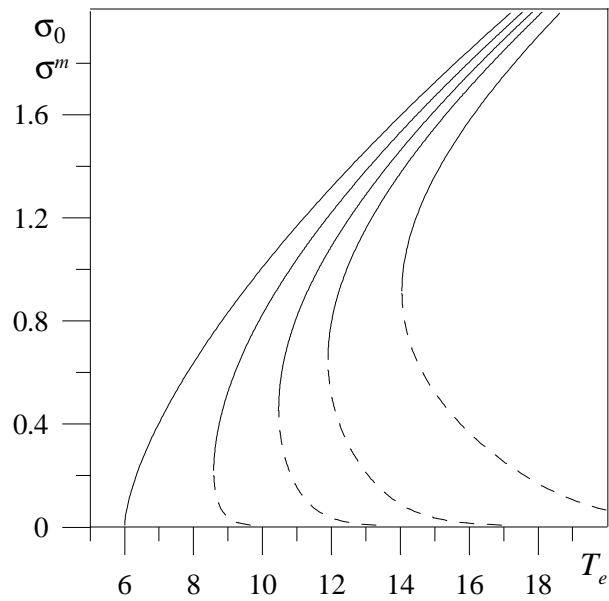


Рис. 3.24. Зависимость стационарных значений сдвиговых напряжений σ_0, σ^m от температуры T_e при параметрах рис. 3.23 и $I = 0, 1, 2, 3, 5$ (соответствующие кривые расположены слева направо)

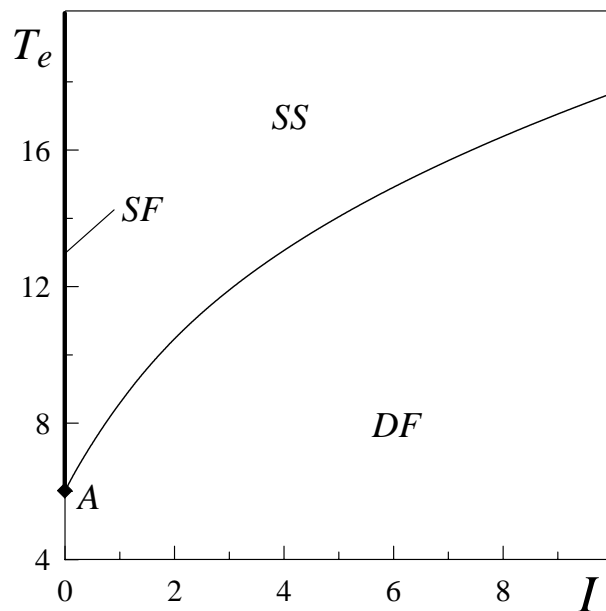


Рис. 3.25. Фазовая диаграмма, соответствующая параметрам рис. 3.23, с областями жидкостного (SF) (на оси ординат выше трикритической точки A), сухого (DF) и прерывистого (SS) трения

решению (3.60), которое обобщает стандартную корневую зависимость, соответствующую $a = 1$ (см. рис. 3.9). Как видно из рис. 3.26, минимум функции распределения (3.115), положение которого определяется напряжениями $\sigma = \sigma^m$ (штриховая кривая), может реализоваться при $\sigma^m = 0$, только когда $a = 1$ (см. пункт 3.2.4). В остальных случаях указанная кривая асимптотически приближается к $\sigma^m = 0$ с ростом параметра T_e . Это говорит о том, что при произвольном значении температуры сдвигаемых поверхностей существует максимум функции распределения (3.115), отвечающий нулевому значению напряжений $\sigma_0 = 0$, т.е. сухому трению. Таким образом, чисто жидкостный режим трения в системе при $a \neq 1$ и $I \neq 0$ не реализуется.

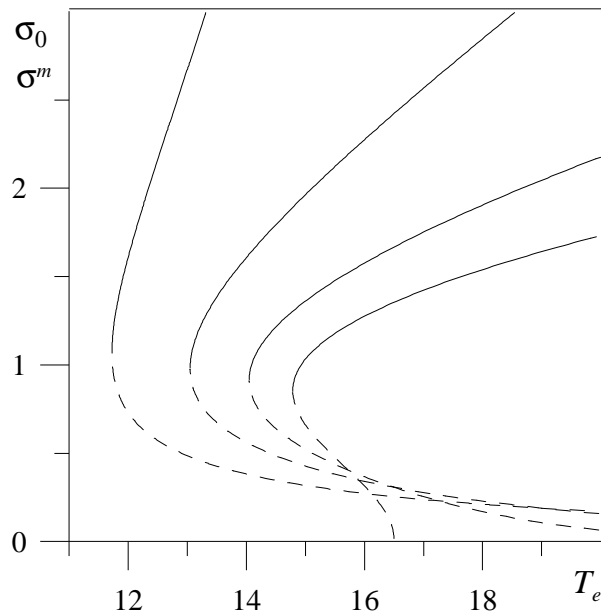


Рис. 3.26. Зависимость стационарных значений сдвиговых напряжений σ_0, σ^m от температуры T_e при параметрах рис. 3.23, $I = 5$ и $a=0.25, 0.5, 0.75, 1.0$ (соответствующие кривые расположены слева направо)

3.2.5.2. Учет деформационного дефекта модуля сдвига

Для учета деформационного дефекта модуля (см. подраздел 2.4) в уравнении (2.15) вместо τ_σ воспользуемся зависимостью $\tau_\sigma(\sigma)$ (2.51). В результате оно

принимает вид:

$$\tau_p \dot{\sigma} = -\sigma^a \left(1 + \frac{\theta^{-1} - 1}{1 + \sigma/\alpha} \right) + g_{\Theta} \varepsilon. \quad (3.138)$$

Тогда в рамках приближения (3.82) система (3.138), (3.130) и (3.131), как и ранее, сводится к уравнению (3.84), где коэффициент трения γ , сила f , амплитуда шума ϕ и параметр m определяются выражениями

$$\gamma(\sigma) \equiv \frac{1}{g_{\Theta}} \left[\tau_{\varepsilon} \left(a\sigma^{a-1} \left(\frac{\theta^{-1} + \sigma/\alpha}{1 + \sigma/\alpha} \right) + \sigma^a \frac{1 - \theta^{-1}}{\alpha(1 + \sigma/\alpha)^2} \right) + \tau_p(1 + \sigma^{2a}) \right], \quad (3.139)$$

$$f(\sigma) \equiv \sigma^a \left[T_e - 1 - \frac{1}{g_{\Theta}} \left(\frac{\theta^{-1} + \sigma/\alpha}{1 + \sigma/\alpha} \right) \right] - \sigma^{3a} \left[\frac{1}{g_{\Theta}} \left(\frac{\theta^{-1} + \sigma/\alpha}{1 + \sigma/\alpha} \right) - 1 \right], \quad (3.140)$$

$$\phi(\sigma) \equiv \sigma^a, \quad m \equiv \frac{\tau_p \tau_{\varepsilon}}{g_{\Theta}}. \quad (3.141)$$

Согласно методу эффективного потенциала, описанному в пункте 3.2.2, получим уравнение Фоккера–Планка (3.112) с коэффициентами дрейфа $D^{(1)}$ и диффузии $D^{(2)}$:

$$\begin{aligned} D^{(1)} = & \frac{1}{\gamma} \left\{ \sigma^a \left[T_e - 1 - \frac{1}{g_{\Theta}} \left(\frac{\theta^{-1} + \sigma/\alpha}{1 + \sigma/\alpha} \right) \right] + \sigma^{3a} \left[1 - \frac{1}{g_{\Theta}} \left(\frac{\theta^{-1} + \sigma/\alpha}{1 + \sigma/\alpha} \right) \right] - \right. \\ & - I\sigma^{2a-1} a\tau_{\lambda} - \frac{2I\sigma^a}{\gamma^2} \left[\gamma\sigma^{a-1} a - \frac{\sigma^a \tau_{\varepsilon}}{g_{\Theta}} \left(\frac{\sigma^{2a-1} a\tau_p}{\tau_{\varepsilon}} + \frac{\sigma^{a-2} a(a-1)(\sigma + \theta^{-1}\alpha)}{2\alpha(1 + \sigma/\alpha)} + \right. \right. \\ & \left. \left. + \frac{\sigma^{a-1} a(1 - \theta^{-1})}{\alpha(1 + \sigma/\alpha)^2} + \frac{\sigma^a(\theta^{-1} - 1)}{\alpha^2(1 + \sigma/\alpha)^3} \right) \right] \right\}, \quad (3.142) \end{aligned}$$

$$D^{(2)} = \frac{I\sigma^{2a}}{\gamma} [\gamma^{-1} + 2\tau_{\lambda}]. \quad (3.143)$$

Стационарное состояние сдвиговых напряжений определяется условием (3.120), которое с учетом выражений (3.142), (3.143) принимает вид:

$$\begin{aligned} & \left\{ T_e - 1 - \frac{1}{g_{\Theta}} \left(\frac{\theta^{-1} + \sigma/\alpha}{1 + \sigma/\alpha} \right) + \sigma^{2a} \left[1 - \frac{1}{g_{\Theta}} \left(\frac{\theta^{-1} + \sigma/\alpha}{1 + \sigma/\alpha} \right) \right] - I\sigma^{a-1} a\tau_{\lambda} \right\} \gamma^2 - \\ & - 2I\sigma^{a-1} a\gamma + \frac{2I\sigma^a \tau_{\varepsilon}}{g_{\Theta}} \left[\frac{\sigma^{2a-1} a\tau_p}{\tau_{\varepsilon}} + \frac{\sigma^{a-2} a(a-1)(\sigma + \theta^{-1}\alpha)}{2\alpha(1 + \sigma/\alpha)} + \right. \\ & \left. + \frac{\sigma^{a-1} a(1 - 2\theta^{-1} - \sigma/\alpha)}{2\alpha(1 + \sigma/\alpha)^2} + \frac{\sigma^a(\theta^{-1} - 1)}{\alpha^2(1 + \sigma/\alpha)^3} \right] = 0. \quad (3.144) \end{aligned}$$

Полагая в (3.144) $\sigma = 0$, найдем границу существования нулевого максимума распределения (3.115), соответствующего твердоподобному состоянию смазки. Как

и для перехода второго рода, имеем точку (2.28), которую можно получить только в случае $I = 0$, либо при $a = 1$. Зависимость стационарных значений сдвиговых напряжений σ_0, σ^m от температуры поверхностей трения T_e является решением уравнения (3.144) и качественно совпадает с показанной на рис. 3.20а. Из рисунка видно, что возрастание интенсивности шума I приводит к появлению двух стационарных состояний, которые отвечают максимумам функции распределения $P(\sigma)$ (3.115) при ненулевых напряжениях (рис. 3.27). Отсюда можно заключить, что существуют два значения напряжения σ_0 , при которых плавится смазка [35], определяющиеся величинами $T_e, g_\Theta, I, \theta, \alpha, \tau_\lambda, \tau_p, a$ и τ_ε . Меньшее из этих значений отвечает метастабильному жидкоподобному состоянию смазки (штриховая кривая на рис. 3.20а), большее (сплошная) — ее устойчивому жидкоподобному состоянию. Их разделяет неустойчивое состояние (штрихпунктирная кривая) при значении напряжений σ^m , которое соответствует минимуму вероятности (3.115). Из рис. 3.27 видно, что распределение (3.115) имеет максимум в точке $\sigma_0 = 0$, отвечающий твердоподобному состоянию смазки или сухому трению [35, 47], при произвольных T_e . Кроме того, как и в случае перехода второго рода, в области $\sigma \ll 1$ всегда наблюдается линейный участок распределения.

Фазовая диаграмма, характерная для данной системы, представлена на рис. 3.28. Здесь область сухого трения DF отвечает существованию единственного максимума вероятности $P(\sigma)$ при $\sigma_0 = 0$ (кривая 1 на рис. 3.27). В области прерывистого трения ($SS1$) сосуществуют твердоподобная и жидкоподобная фазы смазки, т.е. кроме нулевого на зависимости $P(\sigma)$ появляется максимум при $\sigma_0 \neq 0$, который отвечает плавлению смазки или жидкостному трению (кривая 2 на рис. 3.27). Область $SS2$ характеризуется подобным видом функции $P(\sigma)$ (см. кривую 4). Таким образом, область $SS2$ аналогична по фазовому составу $SS1$, с той лишь разницей, что для нее характерны отличные значения стационарных напряжений $\sigma_0 \neq 0, \sigma^m$ и вероятностей реализации сухого и жидкостного трения. Область $SS3$ характеризуется самым сложным видом функции $P(\sigma)$ (кривая 3 на рис. 3.27). Здесь сосуществуют твердоподобное и два жидкоподобных состояния

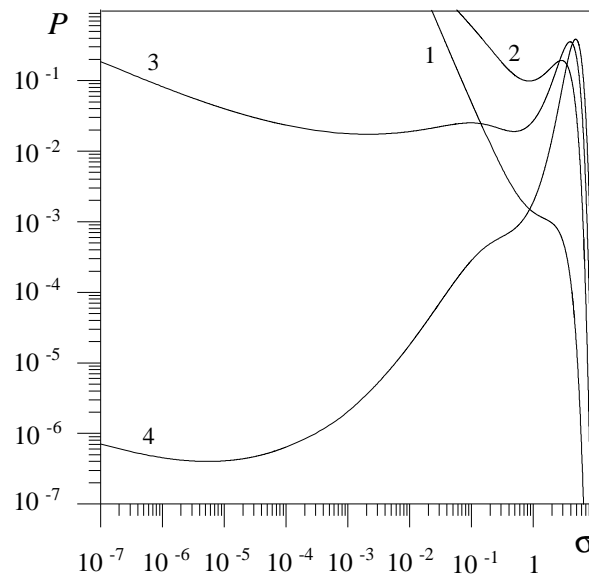


Рис. 3.27. Функция распределения сдвиговых напряжений для перехода первого рода при $\tau_p = \tau_\varepsilon = \tau_\lambda = 0.1$, $\theta^{-1} = 7$, $\alpha = 0.3$, $g_\Theta = 0.4$, $a = 0.75$ и $I = 4$. Кривые 1, 2, 3, 4 отвечают температурам $T_e = 15, 20, 25, 30$ соответственно

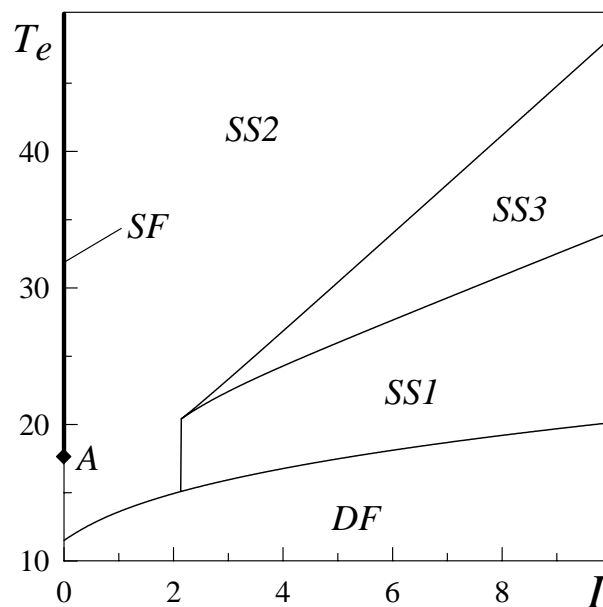


Рис. 3.28. Фазовая диаграмма с областями жидкостного (SF), сухого (DF) и прерывистых ($SS1$, $SS2$, $SS3$) режимов трения, соответствующая параметрам рис. 3.27

смазки, причем последние отвечают максимумам $P(\sigma)$, имеющим различный вид. Это означает возможность реализации прерывистого (stick–slip) движения, при котором происходят переходы между динамическими режимами трения, соответствующими трем указанным состояниям, с различной вероятностью. Как и в случае фазового перехода второго рода, устойчивому жидкостному трению (SF) отвечает участок оси ординат выше точки A , координата T_{c0} которой определяется выражением (2.28). Отметим еще раз, что этот режим трения возможен, когда $I = 0$ или $a = 1$. В последнем случае представленная картина меняется существенным образом, и условие (2.28) трансформируется из точки в прямую. С ростом времени корреляции шума τ_λ область сухого трения (DF) расширяется, а области прерывистого трения ($SS1, SS2, SS3$) уменьшаются, на режим же чисто жидкостного трения (SF) продолжительность τ_λ не оказывает влияния. Критические значения параметров состояния определяются условием $\left| \frac{d\sigma}{dT_e} \right| = \infty$, явный вид которого не приводится ввиду его громоздкости.

Анализ приведенных уравнений показывает, что при переходе от случая $a=1$ к $0 < a < 1$ наиболее существенное изменение наблюдается для зависимости стационарных сдвиговых напряжений σ_0, σ^m от температуры T_e . Согласно (3.144), в детерминистической ситуации ($I = 0$) могут выполняться равенства $\sigma_0 = 0$ и $\sigma^m = 0$ (см. рис. 3.29а). Из рис. 3.29б видно, что при интенсивности шума $I \neq 0$ минимум функции распределения $P(\sigma)$ (3.115) может реализоваться при $\sigma^m = 0$, только когда $a = 1$. Таким образом, чисто жидкостный режим трения (SF) в системе при $a \neq 1$ и $I \neq 0$ не существует (см. заключение подпункта 3.2.5.1). Следует отметить, что выражение (3.144) имеет сложную структуру. В частности, как видно из рис. 3.29а, с ростом величины a максимум функции $T_e(\sigma)$ трансформируется в ее минимум, что означает изменение характера трения.

Согласно указанному выше, вид фазовой диаграммы существенно зависит от величины a . С ее уменьшением от единицы до значения $a \approx 0.25$ число областей на диаграмме увеличивается, а далее — уменьшается. Самую сложную структуру имеет фазовая диаграмма, показанная на рис. 3.30а. Она прогнозирует 15 разли-

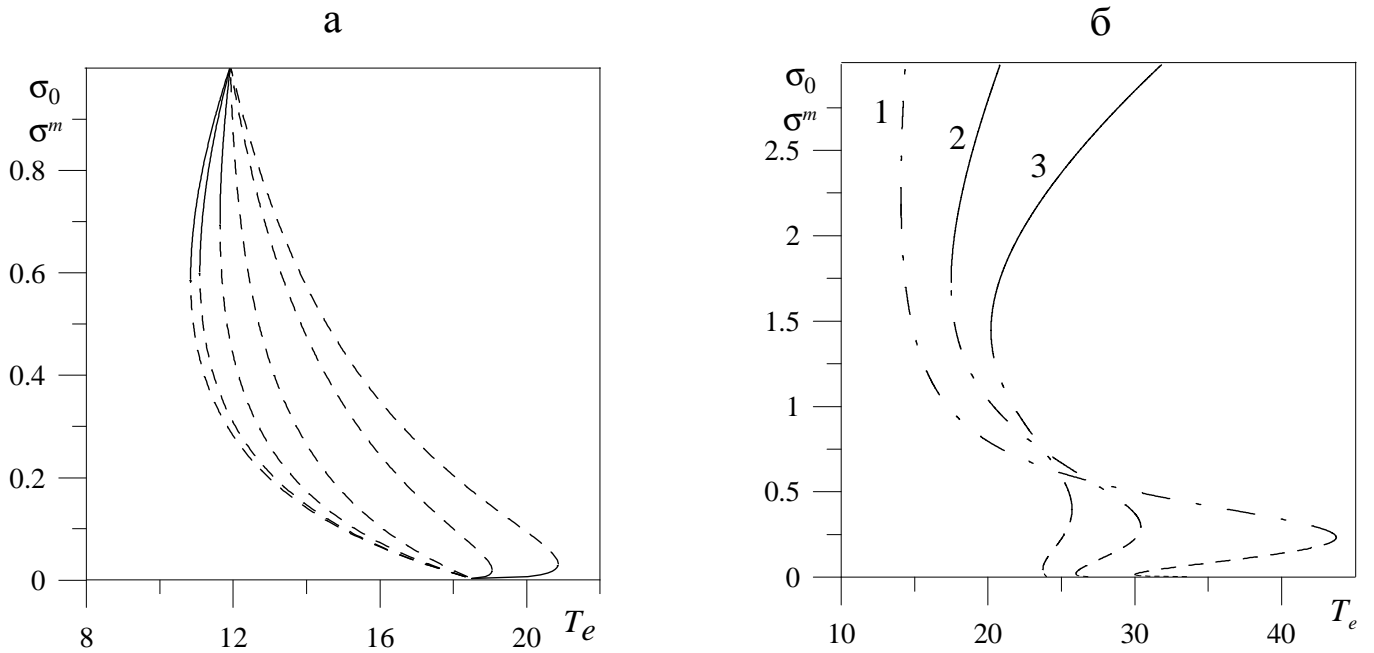


Рис. 3.29. Зависимость стационарных значений сдвиговых напряжений σ_0, σ^m от температуры T_e при параметрах рис. 3.27: а — $I = 0$ и $a=0.2, 0.3, 0.5, 0.7, 0.9, 1.0$ (соответствующие кривые расположены справа налево); б — $I = 5$ и $a=0.5, 0.75, 1.0$ (кривые 1, 2, 3 соответственно)

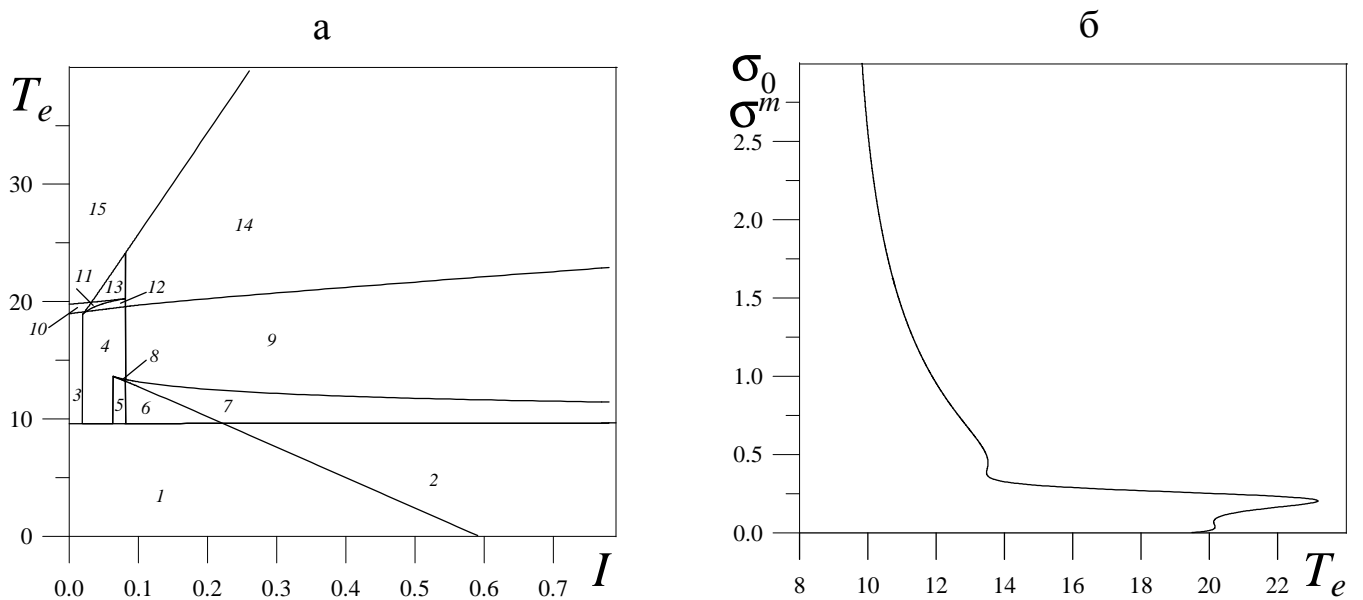


Рис. 3.30. Фазовая диаграмма при параметрах рис. 3.27 и $a=0.25$ (а) и зависимость стационарных значений сдвиговых напряжений σ_0, σ^m от температуры T_e (б), соответствующая рисунку (а) при $I=0.07$

чных режимов трения при ненулевых интенсивностях шума I , причем большинство из них соответствуют малым I и узкому их диапазону. На рис. 3.30б приведена соответствующая зависимость стационарных значений сдвиговых напряжений от температуры T_e . Видно, что она имеет множество максимумов и минимумов, которые определяют границы областей на фазовой диаграмме.

3.3. Выводы

1. Исследовано плавление ультратонкой пленки смазки в процессе трения между атомарно—гладкими поверхностями с учетом некоррелированного шума сдвиговых напряжений и деформации, а также температуры. Рассмотрение в рамках модели Лоренца для описания вязкоупругой среды показывает, что увеличение температуры трущихся поверхностей может сопровождаться самоорганизацией системы, приводящей к плавлению пленки смазки, и как следствие, жидкостному режиму трения. Определены области сухого (соответствует твердоподобному состоянию смазки), жидкостного (смазка жидкоподобна) и прерывистого трения (осуществляются переходы между указанными режимами) на фазовой диаграмме системы. Таким образом, флуктуации приводят к ее усложнению. Изменение интенсивностей шумов температуры и сдвиговой деформации пленки смазки может приводить систему ко всем указанным режимам трения. Показано, что область сухого трения ограничена относительно небольшими значениями интенсивностей шумов температуры и деформации смазки, а также температуры поверхностей трения. С увеличением интенсивности шума деформации пленка смазки плавится даже при низких температурах поверхностей трения. Таким образом, предложенный подход прогнозирует возможность контролировать процесс трения.

2. При численном анализе уравнения Ланжевена получены временные траектории сдвиговых напряжений, и показаны переходы между режимами трения, приводящие к прерывистому (stick—slip) движению. Для моделирования шума используется функция Бокса—Мюллера, которая является адекватной моделью

δ –коррелированной стохастической силы с гауссовым распределением. Рассмотрено плавление смазки за счет диссипативного разогрева сдвигаемых поверхностей, когда в процессе трения температура поверхностей растет по экспоненциальному закону. При этом с течением времени происходят последовательные переходы $DF \rightarrow SS \rightarrow SF$. Объяснены эксперименты по граничному трению с атомарно–гладкими слюдяными поверхностями, в которых происходит плавление смазки с течением времени без подвода дополнительного тепла извне.

3. Показано, что прерывистый режим трения может протекать самоподобным образом. При этом функция распределения системы имеет степенную асимптотику. Показано, что данный факт отражается при использовании системы Лоренца, параметризуемой сдвиговыми напряжениями и деформацией, а также температурой пленки смазки. Кроме того, учет условия самоподобия требует дробного характера релаксации напряжений и обратных связей в схеме Лоренца. Соответствующая фазовая диаграмма, определяющая области жидкостного, прерывистого и сухого трения, качественно совпадает с построенной для случая, когда указанные релаксационное слагаемое и обратные связи не имеют дробный показатель. Следует отметить, что при отличном от единицы значении последнего становится возможным уменьшение трения при малых интенсивностях шумов. В этом случае положение границы области жидкостного трения не зависит от температуры, а определяется только величиной интенсивности шума деформации, которая прямо пропорциональна интенсивности флуктуаций температуры.

4. Проведено исследование влияния коррелированных флуктуаций температуры смазки, которые описываются процессом Орнштейна–Уленбека, на характер ее плавления. Эти флуктуации представляют собой цветной шум, характеризующийся интенсивностью I и временем корреляции τ_λ . Показано, что при плавлении тонкого слоя смазки существенную роль играет степень скоррелированности изменения температуры смазки. Если время корреляции τ_λ увеличивается, то для перехода от сухого к жидкостному режиму трения при заданной интенсивности I флуктуаций T необходимо увеличение температуры поверхностей трения. В случае непрерыв-

ного превращения при малых интенсивностях I этот переход происходит, минуя область режима прерывистого трения, т.е. имеет характер перехода второго рода — плавления аморфной смазки. В обратном случае больших I реализуется переход первого рода, соответствующий плавлению кристаллической смазки.

Для описания перехода первого рода проведен учет дефекта модуля сдвига. Показано, что изменение интенсивности флуктуаций I и температуры трущихся поверхностей T_e может перевести систему из режима сухого трения к жидкостному, при этом последний возникает при двух значениях сдвиговых напряжений. Соответственно на фазовой диаграмме появляются области, где прерывистое (stick—slip) движение характеризуется переходами между метастабильным и устойчивым жидкостными режимами трения.

5. Проведенное рассмотрение показывает, что дробная система Лоренца для описания вязкоупругой среды позволяет представить самоподобное поведение смазки под влиянием цветного шума ее температуры. В отличие от ранее рассмотренного случая на соответствующей фазовой диаграмме область жидкостного трения реализуется только в отсутствие флуктуаций. Увеличение времени корреляции флуктуаций температуры пленки смазки приводит к возрастанию ее значения, необходимого для реализации прерывистого трения. Кроме того, изменение дробного показателя релаксационного слагаемого и обратных связей может усложнять фазовую диаграмму, увеличивая число областей на ней, в согласии с экспериментальными данными [7, 8].

Для описания перехода первого рода проведен учет дефекта модуля сдвига. Показано, что изменение интенсивности I и температуры трущихся поверхностей T_e может перевести систему из режима сухого трения к трем видам прерывистого, при этом один из них характеризуется двумя ненулевыми значениями стационарных сдвиговых напряжений. Соответственно на фазовой диаграмме появляется область, где прерывистое (stick—slip) движение характеризуется переходами между сухим, метастабильным и устойчивым жидкостными режимами трения.

В данном случае распределение напряжений принимает степенной вид в

области $\sigma \ll 1$ даже при низких температурах T_e , отвечающих сухому трению. Это означает, что корреляции флуктуаций приводят к возникновению самоподобного режима поведения твердоподобной смазки.

Результаты, представленные в данном разделе, опубликованы в работах [37, 38, 47–59]. Личный вклад соискателя в соответствующих работах состоит в следующем: [49] — принимал участие в аналитическом и численном исследовании стационарных значений основных параметров и фазовых портретов в детерминистическом случае и при учете шумов; [50] — построены и проанализированы временные зависимости напряжений при диссипативном разогреве поверхностей трения; [51] — исследован самоподобный, фрактальный и неаддитивный характер процесса трения; [52] — проанализирована фазовая кинетика смазки, проведено обобщение результатов; [54] — проведен расчет фазовых диаграмм и стационарных значений напряжений при учете деформационного дефекта модуля сдвига смазки; [56] — проведен анализ фазовых портретов, которые описывают кинетику смазки; [57] — проведен анализ построенных фазовых диаграмм, которые описывают фазовую динамику смазки.

РАЗДЕЛ 4

ФАЗОВАЯ ДИНАМИКА И КИНЕТИКА ИНТЕНСИВНОЙ ПЛАСТИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ

4.1. Основные соотношения

Система уравнений типа Лоренца [174, 175] часто используется в теории фазовых переходов для описания систем, способных к самоорганизации [33–35, 63, 152]. В то же время эта система обладает одним существенным недостатком — она не может быть получена из многомерного термодинамического потенциала. В настоящее время для описания целого ряда процессов — разрушения квази-хрупких материалов, измельчения зерен в процессе обработки металлов методами ИПД и т. д. — разрабатываются методы по своей сути близкие теории Ландау фазовых переходов [17, 176–178]. В них эволюционные уравнения всех основных параметров получены из многомерного термодинамического потенциала. Исследование модифицированного потенциала в данном разделе дает возможность построить фазовую диаграмму, которая прогнозирует принципиально различные режимы фрагментации.

Закон сохранения энергии должен выполняться как при внешних взаимодействиях выделенного объема, так и при внутренних преобразованиях различных видов энергии в результате протекания необратимых внутренних процессов. Первый закон термодинамики как раз регулирует внешние взаимодействия выделенного объема в форме работы и теплового обмена. Преобразование энергии на внутренних степенях свободы задается распределением необратимой части внешней работы по различным каналам диссипации. Переход части необратимой работы в теплоту это только один из каналов диссипации. Вторым каналом диссипации может быть формирование дефектной структуры, в частности, при наличии только одного типа дефектов.

Основной закон термодинамики для простых тел имеет вид [110]:

$$du = \delta A + \delta Q = \sigma_{ij}d\varepsilon_{ij} + Tds', \quad (4.1)$$

где u — плотность внутренней энергии;

A — работа внешних сил;

Q — теплота;

$\sigma_{ij}, \varepsilon_{ij}$ — тензоры напряжений и деформаций;

T, s' — температура и энтропия, связанная с внешними источниками тепла.

Левая часть равенства представляет закон сохранения энергии — внутренняя энергия системы изменяется на величину работы, совершенной внешними телами, и тепла, вошедшего в систему через ее внешние границы. Эта часть равенства выполняется для равновесных (обратимых) и неравновесных (необратимых) процессов. Правое равенство имеет место только для равновесных процессов, поскольку для ее записи используется специфически определенная величина — энтропия. В связи с тем, что часть работы внешних сил расходуется на внутренний разогрев, то ее величина складывается из обратимой и необратимой составляющих [17, 176–178]:

$$du = \sigma_{ij}d\varepsilon_{ij}^e + \sigma_{ij}d\varepsilon_{ij}^n + Tds' \quad (4.2)$$

Необратимая компонента работы внешних напряжений, представляемая вторым членом, идет на образование тепловых фононов, микротрещин, границ зерен и т.д., которые задают каналы диссипации энергии. При наличии лишь теплового канала диссипации необратимая часть работы превращается в тепло, и можно положить [17, 176–178]

$$\sigma_{ij}d\varepsilon_{ij}^n \equiv Tds'', \quad (4.3)$$

где s'' — энтропия, обусловленная внутренними процессами. Путем объединения энтропийных вкладов от внешних и внутренних источников получается термодинамическое тождество, представляющее первый и второй законы термодинамики для простых тел [17, 176–178]:

$$du = \sigma_{ij}d\varepsilon_{ij}^e + Tds. \quad (4.4)$$

Обычное термодинамическое неравенство следует из выражения (4.4), если к нему прибавить необратимую составляющую работы внешних сил, которая уже учтена в тепловом слагаемом:

$$du \leq \sigma_{ij}d\varepsilon_{ij} + Tds. \quad (4.5)$$

Таким образом, неравенство (4.5) обобщает термодинамическое тождество (4.4) [17, 176–178].

Если необратимая работа расходуется как на разогрев, так и на создание дефектов, в том числе дополнительных границ зерен при ИПД, то (4.3) можно записать в виде [17, 176–178]:

$$\sigma_{ij}d\varepsilon_{ij}^n \equiv Tds'' + \varphi dh, \quad (4.6)$$

где φ и h — сопряженная пара термодинамических переменных, которая характеризует дефектность материала — средняя поверхностная плотность энергии и объемная плотность суммарной поверхности границ зерен. Тогда термодинамическое тождество имеет вид [17, 176–178]:

$$du = \sigma_{ij}d\varepsilon_{ij}^e + Tds + \varphi dh. \quad (4.7)$$

Переменная φ растет при увеличении энергии каждого атома и "толщины" границы, то есть уровня ее неравновесности. Последний повышается с ростом уровня фрагментации материала. Поэтому между φ^{-1} и размером зерна в случае ИПД существует монотонная зависимость. Малые значения φ соответствуют более крупным зернам, в пределе монокристаллу, большие значения этой переменной отвечают более мелким зернам, а бесконечно большие φ — аморфному состоянию.

В общем случае в процессе обработки металлов методами ИПД формируется целая иерархия дефектов — дислокации, скопления дислокаций, ячеистые структуры, оборванные границы, малоугловые границы и высокоугловые или межзеренные границы и т.п., каждый из которых представляет отдельный механизм деформирования [63, 134, 179]. Поэтому в (4.7) следовало бы учесть сумму по всем типам дефектов, но в работе для простоты подразумевается наличие дефектов

только одного типа. Полагается, что главным дефектом является самый крупный дефект структуры — граница зерна, а остальные дефекты могут быть учтены значениями параметров теории. Строго говоря, это не совсем так, поскольку в процессе деформации может меняться соотношение между дефектами различных структурных уровней. Однако при выходе на стационарный режим это соотношение будет стремиться к постоянному значению, и для качественного описания модель с одним типом дефектов будет вполне приемлемой.

Все величины, входящие в (4.7), могут быть экспериментально измерены или вычислены. Первое слагаемое описывает обратимую часть внешней работы (изменение упругой энергии), второе слагаемое — тепловой канал диссипации, последнее слагаемое — канал диссипации, связанный с образованием дефектов. Энергия, введенная в систему за счет необратимой части внешней работы, распределяется между этими двумя каналами, которые с математической и физической точки зрения являются равноправными.

В целом процесс ИПД можно представить следующим образом [17, 176–178]. Материал, подвергаемый обработке ИПД, имеет зерненую структуру с большим начальным средним размером зерна. При пропускании материала через установку ИПД в области наиболее интенсивного деформирования возникают процессы пластического течения. Они в основном осуществляются проскальзыванием по границам зерен, в результате чего происходит релаксация механических напряжений. В то же время из-за несогласованного деформирования различных зерен при проскальзывании в материале образуются локальные напряжения, воздействующие на объемы зерен. Эти напряжения возрастают с ростом скорости деформирования. За счет них в объеме зерна реализуются процессы генерации дислокаций, объединения их в хаотические скопления, формирования ячеистой структуры, оборванных границ, которые, объединяясь, приводят к измельчению зерен. При этом новые внутренние границы являются элементами модели, описываемыми соотношением (4.7). Другие микроскопические элементы системы (дислокации, скопления дислокаций и т.д.) данным выражением в явном виде не описываются, но

оказывают влияние на свойства материала. Действующие в материале напряжения представлены упругой частью тензора деформаций. Его компоненты определяются геометрией и типом устройства установки ИПД, а величина задается скоростью деформирования.

Соотношение (4.7) является эквивалентом первого закона термодинамики после установления в системе стационарного состояния. Это стационарное состояние не является строго равновесным, так как сопровождается диссипативными процессами. Отметим, что его можно рассматривать как один из видов равновесия в системе, когда процессы, идущие во взаимнообратных направлениях сбалансированы и "не изменяются" во времени. При этом в системе может сформироваться специфическое распределение типичное для данного состояния.

Если система не достигла стационарного состояния, то в соответствии с общими принципами термодинамики для ее описания необходимо увеличить количество независимых аргументов [180]. Соотношение (4.7) на этот случай можно обобщить в виде [181]:

$$du = \sigma_{ij}d\varepsilon_{ij}^e + Tds + \chi ds' + \varphi dh. \quad (4.8)$$

Неравновесное состояние задается набором параметров, два из которых ε_{ij}^e и s описывают часть системы, которая уже пришла к равновесному распределению, а два другие s' и h — неравновесную часть системы (χ — неравновесная температура). Полагается, что изменение внутренней энергии является полным дифференциалом от всех четырех переменных. Производные от нее по равновесным переменным дают термодинамические силы σ_{ij} и T , а по неравновесным переменным — обобщенные термодинамические силы χ и φ , стремящиеся привести систему к стационарному состоянию.

В процессе диссипации часть энергии связывается полем тепловых колебаний Ts , часть же — дефектами φh . Осуществляя полное преобразование Лежандра по обоим видам связанной энергии, получим выражение для плотности свобо-

дной энергии в виде [181]:

$$f = u - Ts - \varphi h. \quad (4.9)$$

Согласно (4.7), внутренняя энергия является функцией экстенсивных переменных ε_{ij}^e , s и h , то есть $u = u(\varepsilon_{ij}^e, s, h)$, а свободная энергия (4.9) — экстенсивной переменной ε_{ij}^e и двух интенсивных переменных T и φ , то есть $f = f(\varepsilon_{ij}^e, T, \varphi)$.

Поскольку точное аналитическое выражение для свободной энергии не известно, рассмотрим упрощенную модель, разложив свободную энергию в ряд по ее аргументам вплоть до кубических вкладов [17, 60, 61, 176–178]:

$$f(\varphi, T, \varepsilon_{ij}^e) = f'_0 - h'_0\varphi + \frac{1}{2}a'\varphi^2 - \frac{1}{3}b\varphi^3 + \frac{1}{2}\lambda(\varepsilon_{ii}^e)^2 + \mu(\varepsilon_{ij}^e)^2 - g\varphi\varepsilon_{ii}^e - \\ - \frac{1}{2}\bar{\lambda}\varphi(\varepsilon_{ii}^e)^2 - \bar{\mu}\varphi(\varepsilon_{ij}^e)^2 - e\varphi^2\varepsilon_{ii}^e + \alpha'\varphi\Delta T + \alpha_g\varphi\Delta T\varepsilon_{ii}^e + \beta\varphi^2\Delta T - \gamma(\Delta T)^2, \quad (4.10)$$

где $\Delta T = T - T_0$, T_0 — начальная температура до ИПД для бездефектного состояния. Постоянные h'_0 , a' , b выражают зависимость свободной энергии квазиравновесной подсистемы от плотности энергии границ зерен при отсутствии внешних воздействий. Остальные параметры описывают внешние механические, температурные или смешанные воздействия. Упругие напряжения учитываются с точностью до квадратичных вкладов через первые два инварианта тензора деформаций $\varepsilon_{ii}^e \equiv \varepsilon_1^e + \varepsilon_2^e + \varepsilon_3^e$, $(\varepsilon_{ij}^e)^2 \equiv \varepsilon_{ij}^e\varepsilon_{ij}^e \equiv (\varepsilon_1^e)^2 + (\varepsilon_2^e)^2 + (\varepsilon_3^e)^2$, где ε_1^e , ε_2^e , ε_3^e — главные значения тензора деформаций [140]. Здесь по повторяющимся индексам подразумевается суммирование. Полагается, что вследствие быстрой релаксации в неравновесной подсистеме напряжения, при которых проявляются кубические вклады по тензору деформаций ε_{ij}^e , не успевают развиться. Далее при анализе берутся отрицательные значения инварианта ε_{ii}^e , поскольку описывается процесс сжатия деформируемого объекта, что и реализуется при ИПД.

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

$$f_0 = f'_0 + \frac{1}{2}\lambda(\varepsilon_{ii}^e)^2 + \mu(\varepsilon_{ij}^e)^2, \quad h_0 = h'_0 + g\varepsilon_{ii}^e + \frac{1}{2}\bar{\lambda}(\varepsilon_{ii}^e)^2 + \bar{\mu}(\varepsilon_{ij}^e)^2, \\ a = a' - 2e\varepsilon_{ii}^e, \quad \alpha = \alpha' + \alpha_g\varepsilon_{ii}^e \quad (4.11)$$

свободная энергия принимает более простой вид:

$$f(\varphi, T) = f_0 - h_0\varphi + \frac{1}{2}a\varphi^2 - \frac{1}{3}b\varphi^3 + \alpha\varphi\Delta T + \beta\varphi^2\Delta T - \gamma(\Delta T)^2. \quad (4.12)$$

4.2. Фазовая диаграмма

Запишем теперь для оставшихся компонент уравнения движения [60]

$$\tau_\varphi\dot{\varphi} = -\frac{\partial f}{\partial \varphi}, \quad \tau_T\dot{T} = -\frac{\partial f}{\partial T}, \quad (4.13)$$

где введены времена релаксации τ_φ , τ_T соответствующих величин, характеризующие инерционные свойства системы. Измеряя для удобства время в единицах τ_φ , получим двухпараметрическую систему уравнений для параметров состояния:

$$\dot{\varphi} = h_0 - a\varphi + b\varphi^2 - \alpha\Delta T - 2\beta\varphi\Delta T, \quad (4.14)$$

$$\tau\dot{T} = -\alpha\varphi - \beta\varphi^2 + 2\gamma\Delta T, \quad (4.15)$$

где $\tau \equiv \tau_T/\tau_\varphi$. Фактически, все хорошо известные дислокационные механизмы пластической деформации (см., например, достаточно полные обзоры по этой проблеме [63, 134, 179]) принимают участие в формировании новой границы зерна. Однако их учет осуществляется выбором эффективной постоянной теории h_0 , которая представляет собой эффективную плотность дефектов более глубоких структурных уровней или источник повышения энергии границ зерен, то есть, степени их неравновесности (см. эволюционное уравнение (4.14)). Распад сильно неравновесных границ приводит к их размножению, иными словами, к дроблению зерен.

Следует отметить, что в свободной энергии (4.10) в отличие от [17, 178] учтены два дополнительных слагаемых. Первое из них позволяет ввести отрицательную обратную связь между φ и T в уравнении (4.14), второе необходимо для описания самосогласованного поведения φ и T [60, 61].

Используем адиабатическое приближение $\tau_\varphi \gg \tau_T$, при котором эволюция температуры T следует за изменениями параметра φ . При этом в уравнении (4.15)

можно положить $\tau\dot{T} \approx 0$ и получить зависимость для температуры

$$T = T_0 + \frac{\alpha}{2\gamma}\varphi + \frac{\beta}{2\gamma}\varphi^2. \quad (4.16)$$

Подставив ΔT из (4.16) в (4.14), имеем уравнение типа Ландау—Халатникова:

$$\dot{\varphi} = -\frac{\partial V}{\partial \varphi}, \quad (4.17)$$

где производная $-\partial V/\partial \varphi \equiv F(\varphi)$ задает термодинамическую силу F :

$$F(\varphi) = h_0 - \left(a + \frac{\alpha^2}{2\gamma}\right)\varphi + \left(b - \frac{3\beta\alpha}{2\gamma}\right)\varphi^2 - \left(\frac{\beta^2}{\gamma}\right)\varphi^3, \quad (4.18)$$

которая стремится привести параметр φ в притягивающий аттрактор, соответствующий стационарному значению. Система при этом описывается термодинамическим потенциалом

$$V(\varphi) \equiv -\int_0^{\varphi} F(\varphi')d\varphi', \quad (4.19)$$

совпадающим с (4.12) при использовании подстановки (4.16).

Стационарные состояния плотности энергии границ зерен φ задаются условием экстремума потенциала (4.19), так как при $\partial V/\partial \varphi = 0$, согласно (4.17), $\dot{\varphi} = 0$. При этом максимумы потенциала соответствуют неустойчивым состояниям, а его минимумы — устойчивым. Условие стационарности $\partial V/\partial \varphi = 0$ приводит к выражению

$$2\beta^2\varphi^3 - (2b\gamma - 3\alpha\beta)\varphi^2 + (\alpha^2 + 2a\gamma)\varphi - 2h_0\gamma = 0. \quad (4.20)$$

Таким образом, положения экстремумов потенциала зависят от параметров задачи $a, b, \alpha, \beta, \gamma, h_0$ и не зависят от уровня отсчета энергии f_0 . Данные экстремумы определяют режимы фрагментации при ИПД [60].

Решение (4.20) показано на рис. 4.1, согласно которому при больших отрицательных значениях инварианта ε_{ii}^e существуют три стационарных состояния, два из которых соответствуют минимуму потенциала $V(\varphi)$ (сплошная и штриховая кривая), а один его максимуму (штрихпунктирная кривая). Первый минимум мо-

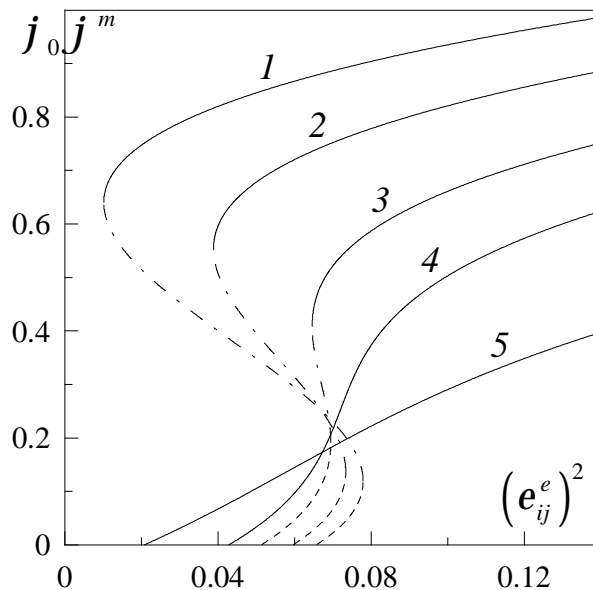


Рис. 4.1. Зависимость стационарных значений плотности энергии границ зерен φ_0, φ^m [Дж/м²] от инварианта $(\varepsilon_{ij}^e)^2$ при параметрах $h'_0 = 0.005$ м⁻¹, $\bar{\lambda} = 0.01$ м⁻¹, $\bar{\mu} = 2.1$ м⁻¹, $\alpha' = 1.7$ К⁻¹·м⁻¹, $\alpha_g = 1.0$ К⁻¹·м⁻¹, $e = 0.05$ Дж⁻¹·м, $g = 0.1$ м⁻¹, $a' = 0.3$ Дж⁻¹·м, $\gamma = 2.4$ м⁻³·К⁻²·Дж, $\beta = 2.2$ Дж⁻¹·К⁻¹·м, $b = 2.5$ Дж⁻²·м³. Кривые 1–5 отвечают значениям $\varepsilon_{ii}^e = -1.55, -1.4, -1.2, -1.0, -0.5$

жет достигаться при нулевом и ненулевом значении плотности энергии границ зерен φ_0 в зависимости от величины $(\varepsilon_{ij}^e)^2$. Ненулевые значения он принимает только в том случае, когда $(\varepsilon_{ij}^e)^2$ больше некоторой критической величины. Это связано с тем, что при ИПД процесс фрагментации может протекать, когда упругие деформации ε_{ij}^e и связанные с ними напряжения σ_{ij} превышают предел текучести. Стационарные состояния в процессе ИПД могут быть достигнуты только при выполнении этого условия. Если оно не выполняется, то система также может стремиться к стационарным состояниям, однако с другой существенно более низкой скоростью. Отметим, что в возбужденном (деформированном) состоянии предел текучести примерно на 10% выше, чем в равновесном (в сталях повышение предела текучести, обусловленное возбуждением границ зерен, достигало 50%) [71]. Согласно кривым 1–3, меньшее из устойчивых стационарных значений φ_0 отвечает большему размеру зерна (штриховые части кривых), большее (сплошная) — меньшему

его размеру. Их разделяет неустойчивое состояние (штрихпунктирная кривая) при значении плотности энергии границ зерен φ^m , которое соответствует максимуму потенциала. Следует отметить, что нулевой минимум отвечает крупнозернистому поликристаллу, а в пределе монокристаллу. В случае монокристалла изначально реализуется нулевой минимум потенциала, и только когда он становится ненулевым процесс фрагментации начинает протекать.

Если образец до ИПД уже имеет мелкозернистую структуру (реализуется состояние близкое к ненулевому минимуму $V(\varphi)$), то, согласно кривой 1, эволюция структуры материала к стационарному состоянию возможна даже при малых значениях $(\varepsilon_{ij}^e)^2$.

Для всех приведенных на рисунке кривых при $(\varepsilon_{ij}^e)^2 = 0$ образец представляет собой монокристалл (или крупнозернистый поликристалл). Если увеличивать деформацию $(\varepsilon_{ij}^e)^2$, то некоторое время реализуется монокристалл ($\varphi_0 = 0$). Согласно кривым 1 и 2, при увеличении $(\varepsilon_{ij}^e)^2$ до значения, когда сосуществуют нулевой и ненулевой минимумы потенциала процесс фрагментации не может произойти, так как эти минимумы разделены потенциальным барьером (штрихпунктирная линия). Затем нулевой минимум становится ненулевым (пунктирная линия), и происходит непрерывный процесс фрагментации. При дальнейшем увеличении деформации первый минимум исчезает вместе с потенциальным барьером, и система по механизму фазового перехода первого рода резко переходит в состояние, описываемое вторым минимумом потенциала (сплошная линия). При этом происходит резкое уменьшение размеров зерен. Известно, что при фазовом переходе первого рода из-за наличия одновременно двух минимумов термодинамического потенциала система может находиться в двух метастабильных фазах [110]. Здесь это означает сосуществование предельных структур с различным размером зерна [107].

В случае, описываемом кривой 3, в отличие от кривых 1, 2 реализация потенциала одновременно с нулевым и ненулевым минимумами невозможна. В остальных кривых 1–3 эквивалентны.

С последующим уменьшением ε_{ii}^e по абсолютному значению (кривые 4, 5)

будет реализоваться непрерывный переход второго рода между монокристаллом и фрагментированным образцом при отсутствии потенциального барьера. При этом возможно формирование только одной предельной структуры.

Критическое значение квадрата сдвиговых деформаций получается из (4.20) при $\varphi = 0$

$$(\varepsilon_{ij}^e)_c^2 = -\frac{1}{\bar{\mu}} \left(h'_0 + g\varepsilon_{ii}^e + \frac{1}{2}\bar{\lambda}(\varepsilon_{ii}^e)^2 \right). \quad (4.21)$$

В координатах $(\varepsilon_{ij}^e)^2 - \varepsilon_{ii}^e$ соотношение (4.21) представляет кривую второго порядка, ниже которой существует стационарное решение (4.20), отвечающее минимуму $V(\varphi)$ в точке $\varphi_0 = 0$. На рис. 4.1 кривые выходят из точки (4.21) на оси абсцисс. Поэтому выражение (4.21) представляет значение второго инварианта, при котором начинает протекать процесс фрагментации. Поскольку (4.21) содержит величину ε_{ii} , все кривые выходят из разных точек.

На рис. 4.2 приведена фазовая диаграмма, где линии отвечают пределам потери устойчивости системы [60]. Кривая 1, ниже которой возможно нулевое стационарное решение, определяется выражением (4.21). При $\varphi_0 = 0$ отсутствует канал диссипации энергии, связанный с образованием дефектных структур, и система представляет собой монокристалл, либо структуру близкую к нему. Точки 1–4 на фазовой диаграмме соответствуют кривым потенциала на рис. 4.3, который обладает минимумами. Их положения определяются параметрами задачи.

Область A отвечает реализации двух ненулевых минимумов потенциала $V(\varphi)$ (кривая 2 на рис. 4.3). Здесь наблюдаются две предельные структуры с большим (первый минимум потенциала) и малым (второй минимум) размером зерна.

Область диаграммы A' подобна области A , но с тем отличием, что первый минимум потенциала здесь нулевой (кривая 1 рис. 4.3). Поскольку первая предельная структура формируется при $\varphi_0 = 0$, она представляет собой монокристалл. В этой области в процессе ИПД фрагментация материала может не реализоваться. Следует отметить, что переходы между минимумами потенциала возможны непосредственно во время ИПД. Благодаря им в областях A, A' форми-

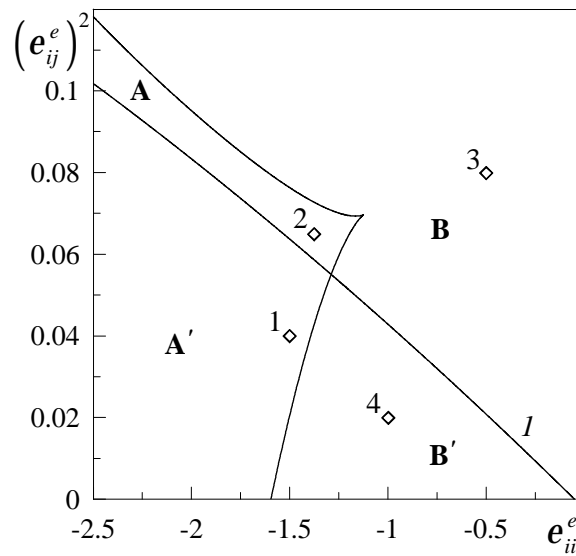


Рис. 4.2. Фазовая диаграмма системы с областями формирования двух (A, A') и одной (B, B') предельных структур, соответствующая параметрам рис. 4.1

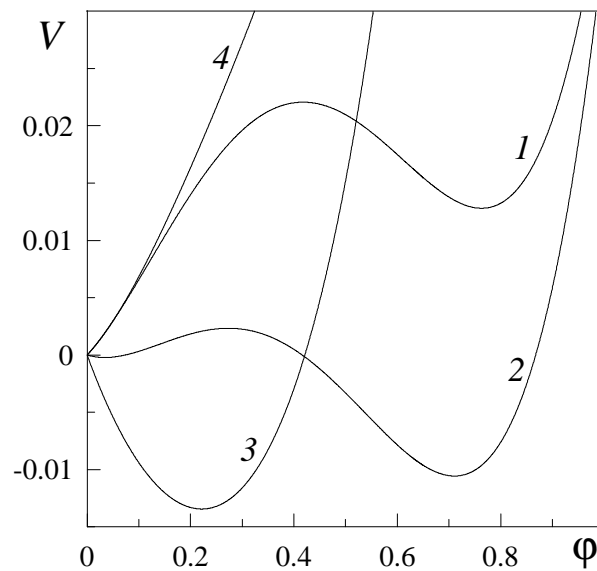


Рис. 4.3. Зависимость термодинамического потенциала V [Дж/м³] (4.19) от плотности энергии границ зерен φ [Дж/м²] при параметрах рис. 4.1. Кривые 1–4 отвечают значениям инварианта $(\varepsilon_{ij}^e)^2 = 0.04, 0.065, 0.08, 0.02$ и следа тензора деформации $\varepsilon_{ii}^e = -1.5, -1.375, -0.5, -1.0$ соответственно (точки 1–4 на рис. 4.2)

руются две предельные структуры, что отвечает режиму, при котором имеет место смесь зерен различного размера. Когда процесс ИПД закончен, следует полагать, что образец сформирован, и дальнейшие переходы не осуществляются.

В области больших деформаций B , согласно кривой 3 на рис. 4.3, формируется одна предельная структура. При увеличении $(\varepsilon_{ij}^e)^2$ размер зерна будет уменьшаться, и в пределе $(\varepsilon_{ij}^e)^2 \rightarrow \infty$ обработанный образец имеет аморфную структуру.

Единственный нулевой минимум $V(\varphi)$ (кривая 4 на рис. 4.3) реализуется в области малых деформаций B' . Здесь система представляет собой монокристалл.

4.3. Кинетика установления равновесного значения плотности энергии дефектов

4.3.1. Временные зависимости

Исследуем кинетику рассматриваемой системы [60]. Для анализа методом фазовой плоскости [33, 34, 151] при заданных соотношениях времен релаксации τ_φ, τ_T необходимо уточнять вид термодинамического потенциала (4.12) согласно экспериментальным данным. Это связано с тем, что система уравнений (4.14), (4.15) в общем случае при произвольных параметрах может оказаться расходящейся и не описывать установление стационарного состояния. В связи с этим рассмотрим упрощенный вариант эволюции системы в рамках адиабатического приближения $\tau_\varphi \gg \tau_T$. При этом исследование сводится к анализу кинетического уравнения Ландау–Халатникова (4.17), которое в явном виде представляется как

$$\dot{\varphi} = h_0 - \left(a + \frac{\alpha^2}{2\gamma}\right) \varphi + \left(b - \frac{3\beta\alpha}{2\gamma}\right) \varphi^2 - \left(\frac{\beta^2}{\gamma}\right) \varphi^3. \quad (4.22)$$

Релаксационные временные зависимости $\varphi(t)$, полученные при решении дифференциального уравнения (4.22) и соответствующие параметрам рисунка 4.1, для различных областей фазовой диаграммы приведены на рис. 4.4. Рисунки 4.4а–г соответствуют точкам 1–4 рис. 4.2.

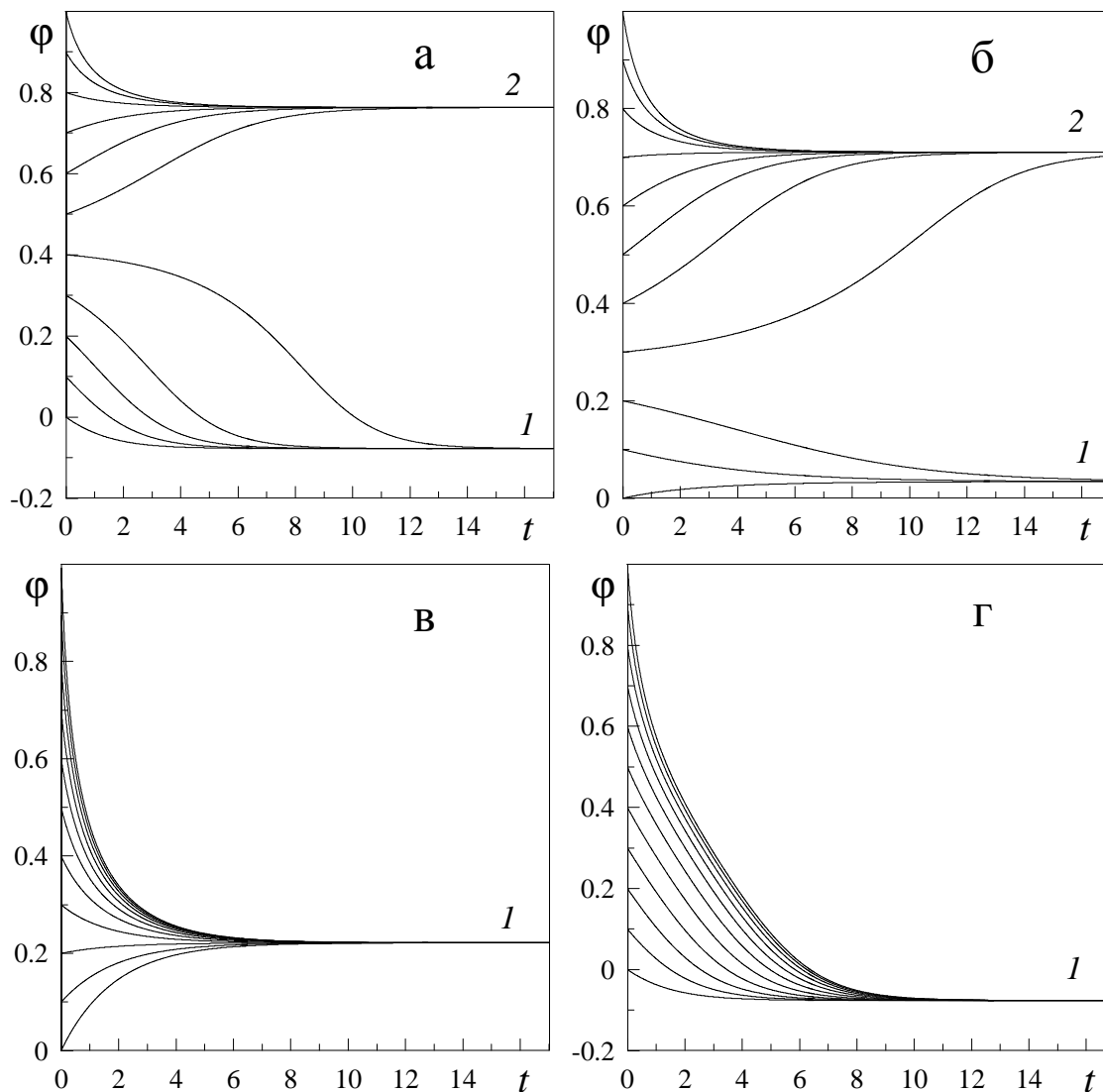


Рис. 4.4. Релаксационные зависимости $\varphi(t)$ [Дж/м²], полученные при решении уравнения (4.22) для параметров рис. 4.1. Рисунки а–г соответствуют точкам 1–4 на рис. 4.2. Время t [Дж/м] измерено в единицах $\tau_\varphi = [\text{Дж}^{-1} \cdot \text{м} \cdot \text{с}]$

На рис. 4.4а показаны зависимости, описывающие фрагментацию материала в области A' фазовой диаграммы при различных начальных условиях $\varphi(0)$. Соответствующий потенциал показан кривой 1 на рис. 4.3. Первое устанавливающееся стационарное значение (при малых начальных φ) находится в отрицательной области φ . Это связано с тем, что, на самом деле, первый минимум потенциала реализуется при $\varphi < 0$. Однако отрицательные φ не имеют физического смысла, так как при них канал диссипации энергии, связанный с образованием дефектов, ста-

новится источником выделения дополнительной энергии, а это противоречит законам сохранения. Поэтому следует считать, что при достижении нулевого значения плотность энергии границ зерен перестает убывать, и система переходит в режим $\dot{\varphi} = 0$. Согласно рисунку, в зависимости от начальных условий может реализоваться как монокристалл (когда система выходит на стационарное значение, описываемое прямой 1), так и мелкозернистая предельная структура (прямая 2).

Временные зависимости, соответствующие области A фазовой диаграммы, показаны на рис. 4.4б. Его отличие от предыдущего заключается в том, что здесь первая стационарная точка реализуется в положительной области плотности энергии границ зерен φ . Соответственно формируются две предельные структуры с крупным (прямая 1) и более мелким (прямая 2) зерном.

Область B диаграммы представлена рисунком 4.4в. Здесь существует одно стационарное состояние (прямая 1), отвечающее единственному минимуму потенциала $V(\varphi)$ (кривая 3 на рис. 4.3). При любых начальных условиях система релаксирует к этому значению, и образуется предельная структура с соответствующим размером зерна.

Последней области B' диаграммы соответствует рисунок 4.4г. Поскольку минимум потенциала $V(\varphi)$ наблюдается при $\varphi < 0$, стационарное значение формируется в отрицательном диапазоне φ . Как и для рис. 4.4а, φ_0 следует считать нулевым. При этом в результате быстрой релаксации системы к стационарной точке формируются крупные монокристаллические зерна. Соответствующий потенциал показан кривой 4 на рис. 4.3.

Отметим, что первое слагаемое h_0 в (4.22) описывает некоторый постоянный источник дефектов, приводящий к росту плотности энергии границ зерен φ . Большие значения параметра h_0 смещают стационарные точки задачи в область более высоких значений дефектности и способствуют формированию более мелких зерен. Существование этого источника связано с дефектностью материала более глубоких структурных уровней — наличием дислокационной подструктуры, примесей и т.д. В частности, в случае сплавов параметром h_0 определяется

зависимость предельного размера зерна от процентного содержания легирующих элементов. Так, например, в работе [129] для сплавов на основе алюминия приведены данные, из которых следует, что средний размер зерна в сплавах Al–Mg составляет 150 и 90 нм для 5 и 10%Mg; для сплавов Al–5%Zn–2%Mg и Al–10%Zn–4%Mg величина зерна равна соответственно 150 и 120 нм (до деформации — 500 мкм). Это подтверждает указанную выше закономерность.

4.3.2. Координаты $\dot{\varphi} - \varphi$

Исследуем влияние деформации ε_{ij}^e на процесс установления равновесия в системе с учетом определения (4.11). Функция, находящаяся в правой части (4.22), представлена на рис. 4.5. Кривая 1 построена при самом малом значении деформации. Первое пересечение кривой с осью абсцисс соответствует неустойчивой стационарной точке (максимуму потенциала $V(\varphi)$ (4.19)), поскольку при отклонении от нее система назад не возвращается. Второе пересечение отвечает минимуму потенциала, и соответственно устойчивому значению φ . Как видно из рисунка, при $\varphi = 0$ скорость изменения плотности энергии границ зерен отрицательна. Это связано с тем, что $V(\varphi)$ имеет минимум в области значений $\varphi < 0$. Поэтому, как и ранее, следует полагать, что при достижении нулевого значения плотности энергии границ зерен перестает уменьшаться.

Пусть в системе установилось равновесное значение $\varphi > 0$, отвечающее второму пересечению кривой 1 с осью абсцисс, и при этом образовалась соответствующая предельная структура. Если теперь быстро увеличивать значение деформации, плотность энергии границ зерен растет, как показано кривой 2. Размер зерна в предельной структуре при этом уменьшается. Здесь кинетика приближения к устойчивому стационарному значению имеет экспоненциальный характер, поскольку зависимость вблизи точки пересечения близка к линейному виду. При дальнейшем увеличении $(\varepsilon_{ij}^e)^2$, как показано кривой 3, наблюдаются три точки пересечения зависимости с осью абсцисс. При этом добавляется новое стационар-

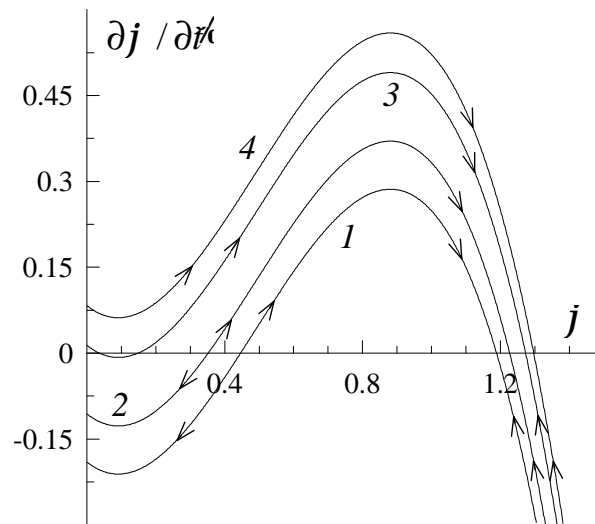


Рис. 4.5. Скорость изменения плотности энергии границ зерен $\partial\varphi/\partial t$ [м^{-1}] (4.22) как функция φ [$\text{Дж}/\text{м}^2$] при параметрах $h'_0 = 0.005 \text{ м}^{-1}$, $\bar{\lambda} = 2.2 \text{ м}^{-1}$, $\bar{\mu} = 2.1 \text{ м}^{-1}$, $\alpha' = 1.7 \text{ К}^{-1}\cdot\text{м}^{-1}$, $\alpha_g = 1.0 \text{ К}^{-1}\cdot\text{м}^{-1}$, $e = 0.05 \text{ Дж}^{-1}\cdot\text{м}$, $g = 2.1 \text{ м}^{-1}$, $a' = 0.3 \text{ Дж}^{-1}\cdot\text{м}$, $\gamma = 2.4 \text{ м}^{-3}\cdot\text{К}^{-2}\cdot\text{Дж}$, $\beta = 2.2 \text{ Дж}^{-1}\cdot\text{К}^{-1}\cdot\text{м}$, $b = 2.8 \text{ Дж}^{-2}\cdot\text{м}^3$, $\mu = 0.3 \text{ Дж}\cdot\text{м}^{-3}$, $\varepsilon_{ii}^e = -1.8$. Кривые 1–4 отвечают значениям $(\varepsilon_{ij}^e)^2 = 0.01, 0.05, 0.107, 0.14$ соответственно

ное устойчивое состояние, описываемое первым пересечением. Так как оно близко к значению $\varphi = 0$, реализуется предельная структура с крупным размером зерна. Потенциал имеет при этом два минимума и один максимум в положительной области φ , в отрицательной же он монотонно возрастает. При дальнейшем увеличении $(\varepsilon_{ij}^e)^2$ существует только одно стационарное состояние (кривая 4), которое отвечает реализации предельной структуры с малым размером зерна.

Следует отметить, что в реальном эксперименте в силу геометрических особенностей методов ИПД достижение стационарного режима невозможно. В таких классических методах, как равноканальное угловое прессование, винтовая экструзия, многоугольная равноканальная гидроэкструзия и т.д., для которых характерно сохранение сечения образца до и после обработки ИПД, этого нельзя достичь по причине невозможности обеспечения постоянного во времени упругого напряжения (в нашем случае ε_{ij}^e). Образец с некоторой постоянной скоростью входит

в активную зону экспериментальной установки и выходит из нее. При этом действующие сдвиговые напряжения σ_{ij} ($i \neq j$) меняются от нуля до некоторого максимального значения при входе в активную зону и от максимального значения до нуля при выходе из нее. Тем не менее, в активной зоне структура материала будет эволюционировать в сторону стационарного значения, но за время пребывания в зоне система успеет пройти только часть пути в этом направлении. Поэтому для достижения стационарного предельного среднего размера зерна широко практикуется многократное повторение обработки материала на одной и той же установке или комбинирование обработки на установках различного типа.

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

4.4. Влияние шума на процесс интенсивной пластической деформации

4.4.1. Фазовая диаграмма

Как в методах, изложенных в работах [17, 176–178], так и выше в этом разделе не учитывалось возможное влияние флуктуационного шума, что может внести существенные коррективы в характер эволюции системы в процессе ИПД. Например, введение аддитивного некоррелированного шума в подразделе 3.1 позволило описать прерывистый режим (stick–slip) в процессе трения двух атомарно–гладких слюдяных поверхностей, разделенных ультратонкой пленкой смазки [47, 50, 51]. Как отмечалось ранее, такой режим наблюдался экспериментально [7, 8], и его описание не представляется возможным при использовании той же модели в детерминистическом случае (см. раздел 2) [35]. Данный подраздел посвящен исследованию влияния аддитивного некоррелированного шума на фрагментацию

материала в процессе ИПД и описанию ее самоподобного режима [61], который наблюдался экспериментально [125, 134].

Запишем систему уравнений для параметров состояния:

$$\tau_\varphi \dot{\varphi} = h_0 - a\varphi + b\varphi^2 - \alpha\Delta T - 2\beta\varphi\Delta T + \sqrt{I_\varphi}\xi_1(t), \quad (4.23)$$

$$\tau_T \dot{T} = -\alpha\varphi - \beta\varphi^2 + 2\gamma\Delta T + \sqrt{I_T}\xi_2(t). \quad (4.24)$$

Следует отметить, что при введении последнего слагаемого в свободной энергии (4.10) результирующий шум становится мультипликативным (зависящим от параметра φ). При этом он обеспечивает не только переходы системы между минимумами потенциала, а и является причиной возникновения дополнительных стационарных состояний (см. подраздел 3.1) [47, 50, 51]. В правые части уравнений добавлены стохастические слагаемые, которые моделируют шумы с интенсивностями $I_{\varphi,T}$ [160], возникающие в результате влияния различных структурных неоднородностей, включений, примесей, дефектов, тепловых флуктуаций и т.д. Для параметра φ это, фактически, означает, что в начальном состоянии в материале одновременно имеются как крупные, так и мелкие зерна (статический шум или хаос), соотношение между которыми предопределяет конкурентную борьбу и перебросы между различными структурными состояниями. Функция $\xi(t)$ представляет δ -коррелированный стохастический источник (белый шум). Его моменты определяются выражениями (3.4). В рамках адиабатического приближения $\tau_\varphi \gg \tau_T$, при котором эволюция температуры T следует за изменениями параметра φ , из уравнения (4.24) находим:

$$T = T_0 + \frac{\alpha}{2\gamma}\varphi + \frac{\beta}{2\gamma}\varphi^2 - \frac{\sqrt{I_T}}{2\gamma}\xi_2(t). \quad (4.25)$$

Подставив ΔT из (4.25) в (4.23), получим уравнение Ланжевена:

$$\tau_\varphi \dot{\varphi} = F(\varphi) + \sqrt{I(\varphi)}\xi(t), \quad (4.26)$$

где сила F задается выражением (4.18), а эффективная интенсивность шума I выражается равенством

$$I(\varphi) = I_\varphi + I_T \frac{(\alpha + 2\beta\varphi)^2}{4\gamma^2}, \quad (4.27)$$

следующим из свойства аддитивности дисперсий гауссовых случайных величин [162]. Уравнению (4.26) соответствует уравнение Фоккера–Планка в форме Ито [2]:

$$\tau_\varphi \frac{\partial P(\varphi, t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial \varphi} (F(\varphi)P(\varphi, t)) + \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} (I(\varphi)P(\varphi, t)). \quad (4.28)$$

Соответствующее стационарное распределение

$$P(\varphi) = \mathcal{Z}^{-1} \exp\{-U(\varphi)\} \quad (4.29)$$

определяется нормировочной постоянной \mathcal{Z} и эффективным потенциалом

$$U(\varphi) = \ln I(\varphi) - \int_0^\varphi \frac{F(\varphi')}{I(\varphi')} d\varphi'. \quad (4.30)$$

Стационарные состояния плотности энергии границ зерен φ задаются условием экстремума распределения (4.29) (потенциала (4.30)), которое приводит к выражению

$$2\beta^2\gamma\varphi^3 - (2b\gamma^2 - 3\alpha\beta\gamma)\varphi^2 + (\alpha^2\gamma + 2a\gamma^2 + 4\beta^2 I_T)\varphi - 2(h_0\gamma^2 - \alpha\beta I_T) = 0. \quad (4.31)$$

Таким образом, положения экстремумов распределения (потенциала) не зависят от интенсивности шума I_φ . Данные экстремумы определяют режимы фрагментации при ИПД [62].

Решение (4.31) показано на рис. 4.6. При малых значениях интенсивности I_T существуют три стационарных состояния, два из которых соответствуют минимуму потенциала $U(\varphi)$ (сплошная и штриховая кривая), а одно его максимуму (штрихпунктирная кривая). Кривые 2, 3, 4 качественно повторяют кривые 2, 3, 4 на рис. 4.1 с тем отличием, что здесь они построены при различных значениях интенсивности шума I_T , а не инварианта ε_{ii}^e , как на рис. 4.1. Первый минимум может достигаться при нулевом и ненулевом значениях плотности энергии границ зерен φ_0 в зависимости от значения $(\varepsilon_{ij}^e)^2$. Как отмечалось в подразделе 4.2, ненулевые значения она принимает только в том случае, когда $(\varepsilon_{ij}^e)^2$ больше некоторой критической величины. Второй минимум всегда имеет ненулевое значение.

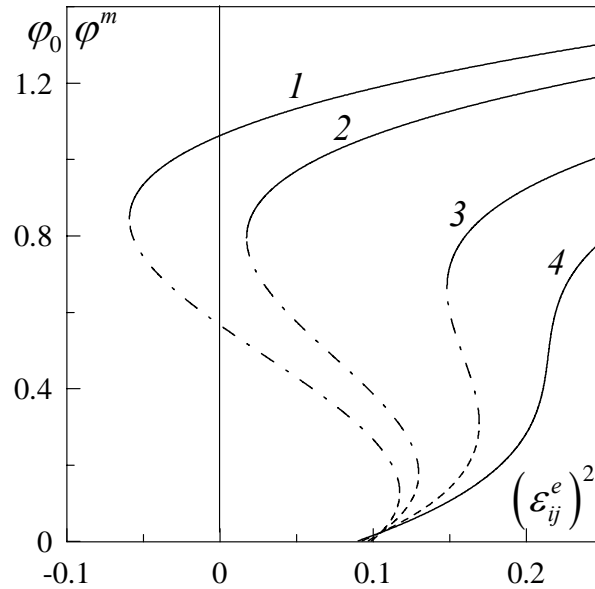


Рис. 4.6. Зависимость стационарных значений плотности энергии границ зерен φ_0, φ^m [Дж/м²] от инварианта $(\varepsilon_{ij}^e)^2$ при параметрах рис. 4.5. Кривые 1–4 отвечают значениям $I_T = 0.1, 0.22, 0.45, 0.6$ [Дж²·К⁻²·м⁻⁶]

Отметим, что часть кривой может оказаться в нефизической области мнимых деформаций (кривая 1). При этом, если в установку ИПД изначально подается монокристалл ($\varphi = 0$), то в детерминистическом случае (подраздел 4.2, рис. 4.1) система представляет собой монокристалл до тех пор, пока с ростом $(\varepsilon_{ij}^e)^2$ не начнет происходить непрерывный процесс фрагментации (штриховая кривая). Так как шум обеспечивает перебросы системы между минимумами эффективного потенциала, то здесь процесс фрагментации может произойти и при малом значении внешнего воздействия $(\varepsilon_{ij}^e)^2$, если интенсивность шума окажется для этого достаточной. Может показаться, что этот переход осуществляется и при $(\varepsilon_{ij}^e)^2 = 0$. Последнее означало бы самопроизвольную фрагментацию материала без внешнего воздействия под действием внутренних сил. Но этого не может произойти, поскольку кривая на рис. 4.6 оказывается в отрицательной области второго инварианта только при малых значениях интенсивности I_T , которой не достаточно для перехода системы через потенциальный барьер. Однако действие шума снижает границу фазового перехода, так как при достаточной интенсивности I_T (либо

при малой высоте барьера) переход осуществляется. При этом происходит резкое уменьшение размеров зерен согласно механизму фазового перехода первого рода. С увеличением I_T зависимость выходит из нефизической области (кривая 2).

Критическое значение второго инварианта получается из (4.31) при $\varphi = 0$

$$(\varepsilon_{ij}^e)_c^2 = -\frac{1}{\bar{\mu}} \left(h'_0 + g\varepsilon_{ii}^e + \frac{1}{2}\bar{\lambda}(\varepsilon_{ii}^e)^2 - \frac{\alpha\beta I_T}{\gamma^2} \right). \quad (4.32)$$

В координатах $(\varepsilon_{ij}^e)^2 - I_T$ (4.32) соотношение представляет прямую с угловым коэффициентом $\alpha\beta/\bar{\mu}\gamma^2$, ниже которой существует нулевое стационарное решение уравнения (4.31), отвечающее минимуму $U(\varphi)$ в точке $\varphi_0 = 0$.

На рис. 4.7 приведена фазовая диаграмма. Прямая 1, ниже которой возмо-

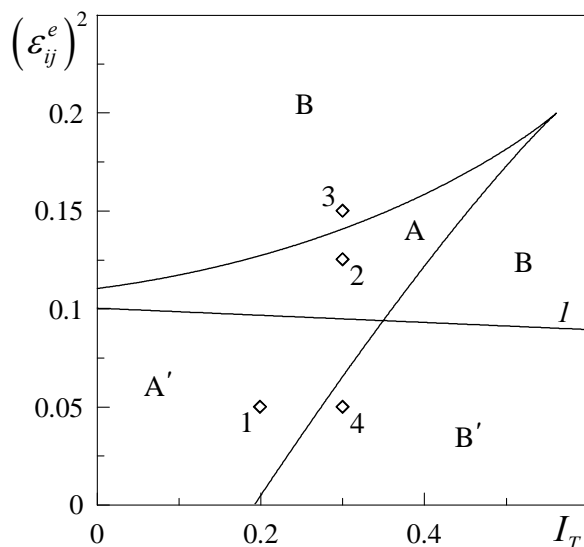


Рис. 4.7. Фазовая диаграмма системы с областями формирования двух (A, A') и одной (B, B') предельных структур, соответствующая параметрам рис. 4.5

жно нулевое стационарное решение, определяется выражением (4.32). Точки 1–4 на фазовой диаграмме соответствуют кривым потенциала $U(\varphi)$ (4.30). Последние построены при различных значениях интенсивности шума I_T , а не инварианта ε_{ii}^e , но качественно совпадают с показанными на рис. 4.3.

Область A отвечает реализации двух ненулевых минимумов потенциала $U(\varphi)$ (кривая 2 на рис. 4.3). Область диаграммы A' подобна области A , но с тем отличием, что первый минимум потенциала здесь нулевой (кривая 1 рис. 4.3). По-

сколькx первая предельная структура формируется при $\varphi_0 = 0$, она представляет собой монокристалл. В этой области малых деформаций в процессе ИПД фрагментация материала может не реализоваться. Однако так как всегда сказывается влияние шума, который осуществляет переход системы между минимумами потенциала, здесь скорее будут сосуществовать две предельные структуры с различными типами зерен. Первая из них соответствует самым крупным монокристаллическим зернам (нулевой минимум потенциала), вторая — более мелким зернам.

В области больших деформаций B , согласно кривой 3 на рис. 4.3, формируется одна предельная структура, и размер зерна здесь минимален. Единственный нулевой минимум $U(\varphi)$ (кривая 4 на рис. 4.3) реализуется в области малых деформаций B' . Здесь система представляет собой монокристалл, поскольку отсутствует второй минимум, в который в результате действия шума в процессе ИПД осуществляются переходы.

4.4.2. Самоподобный режим

Экспериментально обнаружено, что в процессе ИПД при определенных условиях могут возникать фрактальные структуры [63, 125]. При этом во фрагментированном образце существуют зерна различного размера, и невозможно выделить какой-либо характерный масштаб (в нашем случае — масштаб плотности энергии границ зерен φ). Это означает, что система подобна сама себе при ее увеличении в любое количество раз.

Для исследования самоподобного поведения системы, следуя [49, 51, 61, 62], найдем распределение вероятности (4.29), вид которого определяется эффективным потенциалом (4.30). В случае $I_\varphi \gg I_T$ получаем выражение

$$P(\varphi) \approx Z^{-1} I_\varphi^{-1} \exp \left\{ I_\varphi^{-1} \int_0^\varphi F(\varphi') d\varphi' \right\}, \quad (4.33)$$

существенно отличное от однородной функции

$$P(x) = x^{-2\omega} \mathcal{P}(\varphi), \quad x = \varphi \varphi_s. \quad (4.34)$$

Последняя отвечает самоподобной системе, для которой отсутствует характерный масштаб плотности энергии дефектов ($\omega < 1$ — показатель распределения) [167].

Флуктуации температуры $I_T \gg I_\varphi$ приводят к распределению:

$$P(\varphi) \approx Z^{-1} 4\gamma^2 I_T^{-1} (\alpha + 2\beta\varphi)^{-2} \exp \left\{ 4\gamma^2 I_T^{-1} \int_0^\varphi F(\varphi') (\alpha + 2\beta\varphi')^{-2} d\varphi' \right\}. \quad (4.35)$$

Данное распределение характеризуется степенной асимптотикой $P(\varphi) \sim \varphi^{-2}$ при $\alpha \rightarrow 0$ ($\alpha' \approx -\alpha_g \varepsilon_{ii}^e$) только в области $\varphi \rightarrow 0$, так как при этом интеграл в выражении (4.35) равен нулю и не дает вклад в распределение. При $\varphi \gg 1$ интеграл в общем случае дает значительный вклад, и распределение становится экспоненциальным, т.е. быстро спадает с увеличением φ . Требование самоподобия заключается в степенном виде функции распределения, поскольку при этом она спадает гораздо медленнее чем экспоненциальная, и вероятность возникновения в системе значений $\varphi \gg 1$ хоть и мала, но существенна. Таким образом, рост интенсивности флуктуаций температуры в области $\varphi \rightarrow 0$ приводит к установлению самоподобного режима, которому отвечает однородная функция $P(x)$, характеризуемая целым показателем $2\omega = 2$. Это означает формирование большого количества предельных структур с крупными зёрнами различного размера. Однако более интересна ситуация, когда образуются фрактальные структуры, т.е. размер зёрен представлен как большими, так и малыми значениями φ .

В общем случае показатель распределения 2ω может быть не целым, а дробным, в частности, режиму СОК отвечает значение $2\omega = 1.5$ [18, 19]. Во избежание такого ограничения заменим потенциал (4.12) выражением⁹

$$f(\varphi, T) = f_0 - h_0\varphi + \frac{1}{2}a\varphi^2 - \frac{1}{3}b\varphi^3 + \alpha\varphi\Delta T + \beta\varphi^{1+\omega}\Delta T - \gamma(\Delta T)^2, \quad (4.36)$$

где введен показатель $0 < \omega < 1$. В работах [49, 51] для описания самоподобного режима параметр порядка возводился в степень непосредственно в кинетических

⁹При $\omega = 1$ получаем потенциал (4.12) и переходим к случаю, описанному в пункте 4.4.1.

уравнениях. Здесь поскольку система является гамильтоновой, т.е. все уравнения получены из многомерного термодинамического потенциала, необходимо произвести замену непосредственно в потенциале, а затем получать из него соответствующие уравнения. Система кинетических уравнений (4.23), (4.24) при этом принимает вид

$$\tau_\varphi \dot{\varphi} = h_0 - a\varphi + b\varphi^2 - \alpha\Delta T - (1 + \omega)\beta\varphi^\omega \Delta T + \sqrt{I_\varphi}\xi_1(t), \quad (4.37)$$

$$\tau_T \dot{T} = -\alpha\varphi - \beta\varphi^{1+\omega} + 2\gamma\Delta T + \sqrt{I_T}\xi_2(t). \quad (4.38)$$

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

Тогда условие адиабатичности $\tau_\varphi \gg \tau_T$ немедленно приводит к уравнению Ланжевена (ср. с (4.26))

$$\tau_\varphi \dot{\varphi} = F_\omega(\varphi) + \sqrt{I_\omega(\varphi)}\xi(t), \quad (4.39)$$

где сила F_ω и эффективная интенсивность шума I_ω определяются равенствами

$$F_\omega(\varphi) = h_0 - \left(a + \frac{\alpha^2}{2\gamma}\right)\varphi + b\varphi^2 - \frac{\alpha\beta}{\gamma}\left(1 + \frac{\omega}{2}\right)\varphi^{1+\omega} - \frac{\beta^2(1 + \omega)}{2\gamma}\varphi^{1+2\omega}, \quad (4.40)$$

$$I_\omega(\varphi) = I_\varphi + I_T \frac{(\alpha + (1 + \omega)\beta\varphi^\omega)^2}{4\gamma^2}. \quad (4.41)$$

Соответствующее распределение (ср. с (4.29))

$$P_\omega(\varphi) = \mathcal{Z}^{-1} \exp\{-U_\omega(\varphi)\} \quad (4.42)$$

задается статистической суммой \mathcal{Z} и эффективным потенциалом

$$U_\omega(\varphi) = \ln I_\omega(\varphi) - \int_0^\varphi \frac{F_\omega(\varphi')}{I_\omega(\varphi')} d\varphi'. \quad (4.43)$$

При $I_T \gg I_\varphi$ и $\alpha \rightarrow 0$ (4.42) сводится к каноническому виду (4.34), где $x = \varphi\varphi_s = \varphi$ и $\mathcal{P}(\varphi)$ определяется выражением

$$\mathcal{P}(\varphi) \approx \frac{4\gamma^2\beta^{-2}}{\mathcal{Z}(1+\omega)^2 I_T} \exp\left\{4\gamma^2 I_T^{-1} \int_0^\varphi F_\omega(\varphi') (\alpha + (1+\omega)\beta\varphi'^\omega)^{-2} d\varphi'\right\}. \quad (4.44)$$

Согласно этому, распределение (4.42) имеет степенной вид, если интеграл в (4.44) слабо изменяется с увеличением φ . Условие $I_T \gg I_\varphi$ легко обеспечить, положив $I_\varphi = 0$. Примем также $\alpha = 0$ ($\alpha' \approx -\alpha_g \varepsilon_{ii}^e$), так как степенной вид распределения (4.42) требует выполнения этого условия. Подынтегральное выражение в (4.44) при этом имеет вид

$$4\gamma^2 I_T^{-1} \left[\frac{h_0}{(\beta(1+\omega))^2 \varphi^{2\omega}} - \frac{a}{(\beta(1+\omega))^2 \varphi^{2\omega-1}} + \frac{b\varphi^{2(1-\omega)}}{(\beta(1+\omega))^2} - \frac{\varphi}{2\gamma(1+\omega)} \right]. \quad (4.45)$$

Первое слагаемое с ростом φ уменьшается, второе слабо влияет на распределение при $a \approx 0$ или $\omega > 0.5$, третье слагаемое не дает вклада при $b \approx 0$. Причем влияние этих слагаемых можно значительно уменьшить при увеличении параметра β . Однако четвертое слагаемое с ростом φ существенно искажает степенной вид распределения, превращая его в экспоненциальное. Поэтому степенное распределение будет реализоваться только при $\gamma \ll 1$ или $I_T \gg 1$ и в ограниченном диапазоне $0 < \varphi < \varphi_{max}^{10}$. Однако физически φ не может принимать бесконечно больших значений, так как при этом фрагментированный образец будет представлять собой аморфную структуру, а этого нельзя достичь современными методами ИПД. Поэтому такое ограничение здесь уместно — в диапазоне $0 < \varphi < \varphi_{max}$ формируется квазифрактальная структура, где имеются размеры зерен при всех φ данного диапазона. При больших φ распределение быстро спадает, становясь экспоненциальным, и более мелкие зерна не образуются.

Точки экстремума распределения (4.42) определяются уравнением:

$$(1+\omega)\beta^2\gamma\varphi^{1+2\omega} + \alpha\beta\gamma(2+\omega)\varphi^{1+\omega} - 2b\gamma^2\varphi^2 + (\alpha^2\gamma + 2a\gamma^2)\varphi + (1+\omega)I_T\beta\omega(\alpha + (1+\omega)\beta\varphi^\omega)\varphi^{\omega-1} - 2h_0\gamma^2 = 0. \quad (4.46)$$

Согласно (4.46), в актуальной области $\gamma \ll 1$, $I_T \gg 1$ фазовая диаграмма теряет смысл, так как при таком соотношении параметров существенным остается только предпоследнее слагаемое. При этом, согласно (4.34), при $\varphi = 0$ распределение расходится, так как интеграл в (4.44) не дает вклада. С увеличением φ распределение

¹⁰Физический смысл требований самоподобия $\gamma \ll 1$ и $I_T \gg 1$ становится понятен из (4.41), поскольку при таких условиях возрастает эффективная интенсивность шума, соответственно увеличивается разброс значений φ по их величине.

остаётся степенным до тех пор, пока не станет существенным последнее слагаемое в (4.45), и распределение (4.42) не превратится в экспоненциально убывающее. Таким образом, при выбранном диапазоне параметров реализуется один максимум функции распределения в точке $\varphi = 0$, далее до $\varphi = \varphi_{max}$ распределение становится степенным, и при $\varphi > \varphi_{max}$ оно экспоненциально спадает.

Распределения вероятностей (4.42) для самоподобного режима при $\omega = 0.7$ приведены на рис. 4.8. Они ненормированные, поскольку интерес представляет

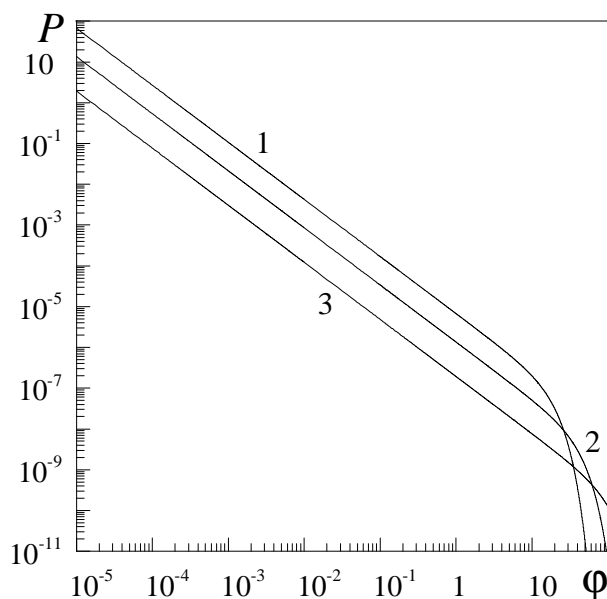


Рис. 4.8. Ненормированная функция распределения (4.42) при $\omega = 0.7$, $I_\varphi = 0$ [с·м⁻²] и параметрах $h'_0 = 0.005$ м⁻¹, $\bar{\lambda} = 2.2$ м⁻¹, $\bar{\mu} = 2.1$ м⁻¹, $\alpha_g = 1.0$ К⁻¹·м⁻¹, $e = 0.05$ Дж⁻¹·м, $g = 2.1$ м⁻¹, $a' = 0.3$ Дж⁻¹·м, $\gamma = 0.01$ м⁻³·К⁻²·Дж, $\beta = 3.2$ Дж⁻¹·К⁻¹·м, $b = 0.01$ Дж⁻²·м³, $\varepsilon_{ii}^e = -1.8$, $(\varepsilon_{ij}^e)^2 = 0.1$, $\alpha' = -\alpha_g \varepsilon_{ii}^e$ К⁻¹·м⁻¹. Кривые 1–3 отвечают значениям $I_T = 2, 10, 70$ [Дж²·К⁻²·м⁻⁶]

только диапазон значений φ , при которых распределение имеет степенной вид. Все кривые построены в логарифмическом масштабе для того, чтобы показать, что в определенном диапазоне φ распределение принимает степенной вид, и реализуется самоподобный режим.

Чтобы убедиться в линейности участков кривых на рис. 4.8 при $0 < \varphi < \varphi_{max}$ проведем корреляционный анализ. Для этого в диапазоне значений $10^{-5} \leq \varphi \leq 10$

(где визуальными зависимостями представляются прямые) методом наименьших квадратов получим уравнения регрессии вида:

$$\lg P_\omega(\varphi) = A \lg \varphi + B, \quad (4.47)$$

для первой кривой $A = -1.4157, B = -5.2063$, для второй $A = -1.4032, B = -5.8765$, и для третьей $A = -1.4005, B = -6.7153$. Полученное значение $A \approx -1.4$ согласуется со степенным выражением (4.34), где в нашем случае $2\omega = 1.4$. Коэффициент корреляции определим стандартным образом:

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y})^2}{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2}, \quad (4.48)$$

где $y \equiv \lg P_\omega(\varphi)$ и \hat{y} — значения соответственно уравнению (4.47);

$\bar{y} = \sum_{i=1}^n y_i/n$ — среднее значение, а текущие значения y_i берутся из выражения (4.42) без учета \mathcal{Z} .

При этом для кривых 1–3 на рис. 4.8 величины R^2 составляют соответственно 0.99987989, 0.99999502, 0.99999989. Это говорит о высокой скоррелированности уравнения регрессии (4.47) и выражения (4.42) на линейном участке, т.е. распределение является здесь действительно степенным. На рисунке видно, что с увеличением интенсивности шума I_T протяженность линейного участка увеличивается, о чем также свидетельствует увеличение значения R^2 с ростом I_T . В формируемой квазифрактальной структуре при этом минимально возможный размер зерна будет уменьшаться.

4.5. Выводы

1. Приведенное рассмотрение, базирующееся на принципах теории фазовых переходов Ландау, дает целостную картину фрагментации твердых тел в процессе ИПД. Для описания образующихся дефектных структур введены плотности энергии и суммарной поверхности границ зерен, что дает возможность учесть два

канала диссипации энергии (тепловой и производства дефектов). Данный подход позволяет описать существование предельной (стационарной) зернистой структуры, которая достигается в процессе ИПД (ненулевой минимум термодинамического потенциала). Крупнозернистое состояние материала (в пределе монокристалл) связывается с нулевым минимумом свободной энергии и в контексте теории его можно рассматривать как своего рода предельную структуру, которая будет равновесной относительно обычной пластичности. Показано, что переход от крупнозернистой структуры к мелкозернистой в процессе ИПД может проходить по сценарию фазового перехода первого и второго родов.

2. В детерминистическом случае и при учете аддитивного некоррелированного шума построены фазовые диаграммы с областями реализации различных типов предельных структур. Минимумы потенциала соответствуют формированию предельных структур с различным размером зерна. На фазовой диаграмме выделено четыре области — две с существованием одной предельной структуры и две с существованием двух. В этих областях предельная структура может формироваться как при нулевой плотности энергии границ зерен (крупные монокристаллические зерна), так и при ненулевом ее значении (более мелкие зерна). Установлено, что с увеличением упругих деформаций размер зерен в предельных структурах уменьшается.

Проанализировано влияние шума температуры на процесс фрагментации. Выяснено, что фазовая диаграмма при воздействии флуктуаций имеет такие же области, как и в детерминистическом случае. Однако фазовая диаграмма при этом является динамической, т.е. шум обеспечивает постоянные переходы между режимами фрагментации в процессе ИПД.

3. Исследована кинетика установления стационарных значений плотности энергии дефектов. Для всех областей фазовой диаграммы в рамках адиабатического приближения (когда изменение температуры следует за изменением плотности энергии границ зерен) для анализа кинетического уравнения типа Ландау–Халатникова приведены релаксационные зависимости $\varphi(t)$. Согласно последним,

тип формируемой предельной структуры зависит от начальных значений плотности энергии границ зерен.

4. Исследование самоподобного режима показывает, что можно подобрать параметры, при которых распределение плотности энергии границ зерен имеет ступенной вид (4.34) в определенном интервале $0 < \varphi < \varphi_{max}$. В этом диапазоне образуются квазифрактальные структуры, где существуют размеры зерен при всех φ указанного отрезка.

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

Результаты, представленные в данном разделе, опубликованы в работах [60–63]. Личный вклад соискателя в соответствующих работах состоит в следующем: [60] — построена и проанализирована фазовая диаграмма, которая определяет различные режимы фрагментации; [61, 62] — построены и проанализированы зависимости стационарных значений плотности энергии границ зерен от второго инварианта тензора деформации; [63] — принимал участие в подготовке и систематизации материала к разделам 3–5 "Коллективное поведение дислокационно–вакансионного ансамбля в локализованной зоне пластической деформации", "Синергетика структурных превращений при деформации и отжиге ГЦК–металлов", "Волны пластической деформации".

РАЗДЕЛ 5

ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ ВДАЛИ ОТ РАВНОВЕСИЯ

5.1. Образование лавин

5.1.1. Формирование стационарной лавины

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 СОК, являются землетрясения и снежные лавины [18, 19]. Кроме того, режим СОК проявляется при течении сыпучих материалов по наклонной поверхности (известная модель *sandpile*) [182–185], 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 (3.43):

$$P(s) = s^{-\tau} \mathcal{P}(x), \quad x \equiv s/s_c. \quad (5.1)$$

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 [27], типичные значения указанных показателей составляют $\tau = 3/2$, $D = 4$, $z = 2$. С другой стороны, скейлинговые соотношения, дополненные равенством восприимчивости и среднего размера ла-

вины, приводят к выражениям [27]:

$$\tau = 1 + \frac{z}{D}, \quad \tau = 2 \left(1 - \frac{1}{D} \right). \quad (5.2)$$

Одним из наиболее разработанных методов, позволяющих представить основные особенности СОК, является полевая схема [27, 186], 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 [27, 186], 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 [186], характеризуется набором критических показателей $\beta = \gamma = \delta = 1$, $\mu = 2$, $\nu = 1/2$, $\eta = 0$, присущих теории среднего поля [27].

Касаясь других подходов, отметим, что большинство из них было приложено к наиболее популярной и простой модели sandpile, которая исследована как

аналитически [187, 188], так и численно [22, 182–185, 187–189]. Аналитическое представление сводится, как правило, к полевым методам, первый из которых [25] 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 [26, 183–185]. 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. Полная картина самоорганизации, изложенная в разделах 2, 3, требует использования трехпараметрического подхода.

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:

$$\frac{d\dot{x}}{dt} = -\frac{\dot{x}}{\tau_x}, \quad (5.3)$$

$$\frac{d\dot{y}}{dt} = -\frac{\dot{y}}{\tau_y^{(0)}}, \quad (5.4)$$

$$\frac{dy'}{dt} = \frac{y'_e - y'}{\tau_S}, \quad (5.5)$$

где τ_x , $\tau_y^{(0)}$ и τ_S — времена релаксации компонент скорости и наклона соответственно. Согласно (5.3) – (5.5), 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 (5.3) следует дополнить величиной $f = \dot{y}/\gamma$, представляющей силу жидкого трения вдоль оси y (γ — кинетический коэффициент). В результате получаем

$$\tau_x \ddot{x} = -\dot{x} + a^{-1} \dot{y}, \quad (5.6)$$

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

$$f = (D/\gamma)y''. \quad (5.7)$$

В стационарном потоковом состоянии $\ddot{x} = 0$ решение уравнения (5.6) определяет касательную $y = ax + \text{const}$, так, что сила трения $f = \tau_x^{-1} \dot{x}$ пропорциональна горизонтальной компоненте скорости песка. Учитывая зависимость (5.7) и используя цепное правило дифференцирования $dy'/dt = \dot{y}' + y'' \dot{x}$, из (5.5) получаем уравнение для изменения наклона:

$$\tau_S \dot{y}' = (y'_e - y') - (\tau_S/D) \dot{x} y'. \quad (5.8)$$

С учетом (5.4) найдем уравнение для вертикальной компоненты скорости, предполагая, что наклон и сила жидкого трения вдоль оси x ($f = \tau_x^{-1} \dot{x}$) связаны с ней положительной обратной связью, а равновесный наклон и сила трения $f = \dot{y}/\gamma$ — отрицательной:

$$\ddot{y} = -\frac{\dot{y}}{\tau_y^{(0)}} + \frac{y' \dot{x}}{\tau_x} - \frac{y'_e \dot{y}}{a \tau_x}. \quad (5.9)$$

Отсюда окончательно получаем:

$$\tau_y \ddot{y} = -\dot{y} + \frac{\tau_y}{\tau_x} y' \dot{x}, \quad \frac{1}{\tau_y} \equiv \frac{1}{\tau_y^{(0)}} \left(1 + \frac{y'_e \tau_y^{(0)}}{a \tau_x} \right). \quad (5.10)$$

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

Уравнения (5.6), (5.8), (5.10) составляют основу для самосогласованного описания течения песка [33, 49]. Их отличительная особенность состоит в том, что

перед нелинейными членами в (5.8), (5.10), стоят разные знаки, тогда как (5.6) линейно. Последнее означает, что на начальной стадии лавина начинает распространяться вдоль касательной $y = ax + \text{const}$. Отрицательный знак перед последним членом в уравнении (5.8) 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 (5.10) является причиной самоорганизации, приводящей к образованию лавин.

В безразмерном виде уравнения (5.6), (5.8), (5.10) сводятся к системе Лоренца [174, 175]:

$$\dot{u} = -u + v, \quad (5.11)$$

$$\epsilon \dot{v} = -v + uS, \quad (5.12)$$

$$\delta \dot{S} = (S_e - S) - uv, \quad (5.13)$$

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 (5.11) – (5.13) не имеет аналитического решения, но при $\epsilon \ll 1$, $\delta \ll 1$ можно использовать адиабатическое приближение, в рамках которого левые части уравнений (5.12), (5.13) полагаются равными нулю. В результате приходим к зависимости S и v от горизонтальной скорости u :

$$S = \frac{S_e}{1 + u^2}, \quad v = \frac{S_e u}{1 + u^2}. \quad (5.14)$$

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 (5.14) в (5.11) дает уравнение Ландау–Халатникова

$$\dot{u} = -\frac{\partial E}{\partial u} \quad (5.15)$$

с кинетической энергией

$$E = \frac{u^2}{2} - \frac{S_e}{2} \ln(1 + u^2). \quad (5.16)$$

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 [186]. 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 $S_0 = 1$. Зависимости $E(u)$ и $u_0(S_e)$ показаны на рис. 2.1, где под синергетическим потенциалом V , напряжением σ_0 и температурой T_e следует понимать энергию E , скорость u_0 и наклон S_e соответственно.

Представленный сценарий отвечает сверхкритическому режиму формирования лавин, который соответствует фазовому переходу второго рода [26]. Это следует из разложения кинетической энергии (5.16) 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 [27]. Однако показатель $\beta = 1/2$ в два раза меньше, чем в [27], 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

$$\frac{\tau_x}{\tau_x(u)} = 1 + \frac{m}{1 + u^2/u_\tau^2}, \quad (5.17)$$

где $0 < u_\tau < 1$. Тогда кинетическая энергия (5.16) приобретает слагаемое

$$\Delta E = \frac{m u_\tau^2}{2} \ln \left(1 + \frac{u^2}{u_\tau^2} \right), \quad (5.18)$$

а стационарные значения скорости принимают вид:

$$u_0^m = u_{00} \left[1 \mp \sqrt{1 + u_\tau^2 u_{00}^{-4} (S_e - S_c)} \right]^{1/2}, \quad (5.19)$$

$$2u_{00}^2 \equiv (S_e - 1) - S_c u_\tau^2, \quad S_c \equiv 1 + m, \quad (5.20)$$

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

$$S_{\pm} = \frac{1 + u_{00}^2 \pm \sqrt{(1 + u_{00}^2)^2 - (1 - u_{\tau}^2) S_e}}{1 - u_{\tau}^2}. \quad (5.21)$$

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

$$S_m^0 = 1 + u_{\tau} \sqrt{m/(1 - u_{\tau}^2)} \quad (5.22)$$

при

$$S_e = S_c^0, \quad S_c^0 \equiv (1 - u_{\tau}^2) (S_m^0)^2, \quad (5.23)$$

до предельного значения $S_- = 1$ при $S_e \rightarrow \infty$. Зависимости u_0 , u^m , S_0 от S_e представлены на рис. 2.3, 2.4, где под напряжением σ и температурой T_e следует понимать скорость u и наклон S_e соответственно. Их поведение рассмотрено в подразделе 2.4. Субкритический режим реализуется при условии, что $u_{\tau} < 1$, и параметр m , который входит в закон дисперсии (5.17), больше, чем

$$m_{min} = \frac{u_{\tau}^2}{1 - u_{\tau}^2}. \quad (5.24)$$

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 (5.20), тогда как наклон, отвечающий остановке лавины, имеет гораздо меньшее значение S_c^0 (см. (5.22), (5.23)). 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. подпункты 2.4.2.3, 2.4.3.3).

5.1.2. Флуктуационное формирование лавины

Используя метод изложенный в подразделе 3.1, исследуем влияние аддитивного некоррелированного шума на составляющие скорости u , v и наклон S . С этой целью введем в правые части уравнений (5.11) – (5.13) стохастические слагаемые $I_u^{1/2}\xi_1$, $I_v^{1/2}\xi_2$, $I_S^{1/2}\xi_3$ (здесь интенсивности I_u , I_v , I_S измерены в единицах $(\tau_x/\tau_y)(D/\tau_S)$, $a^2(\tau_x/\tau_y)(D/\tau_S)$, $a^2(\tau_x/\tau_y)^2$ соответственно; $\xi(t)$ — δ -коррелированная стохастическая переменная) [33, 49, 161, 162]. Тогда в рамках адиабатического приближения уравнения (5.12), (5.13) приводят к временным зависимостям:

$$v(t) = \bar{v} + \tilde{v}\xi(t), \quad S(t) = \bar{S} + \tilde{S}\xi(t); \quad (5.25)$$

$$\begin{aligned} \bar{v} &\equiv S_e u d(u), & \tilde{v} &\equiv \sqrt{I_v + I_S u^2} d(u), \\ \bar{S} &\equiv S_e d(u), & \tilde{S} &\equiv \sqrt{I_S + I_v u^2} d(u), & d(u) &\equiv (1 + u^2)^{-1}. \end{aligned} \quad (5.26)$$

В этих уравнениях детерминистические составляющие сводятся к равенствам (5.14). Выражения (5.11), (5.25), (5.26) приводят к уравнению Ланжевена

$$\dot{u} = f(u) + \sqrt{I(u)} \xi(t), \quad f \equiv -\frac{\partial E}{\partial u}, \quad (5.27)$$

где сила f задается энергией E , определяемой формулой (5.16), а эффективная интенсивность шума выражается равенством

$$I(u) \equiv I_u + (I_v + I_S u^2) d^2(u). \quad (5.28)$$

Отметим, что подстановка равенств (5.25), (5.26) в (5.11) приводит к стохастической добавке

$$\left[I_u^{1/2} + \left(I_v^{1/2} + I_S^{1/2} u \right) d(u) \right] \xi(t), \quad (5.29)$$

квадрат амплитуды которой отличается от эффективной интенсивности шума (5.28). Непосредственное использование адиабатического приближения в уравнениях (5.12), (5.13) дает флуктуационные добавки зависимостей (5.25) 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 (5.26). Последняя из этих добавок явно нефизическая, поскольку дает полную компенсацию флуктуаций наклона \tilde{S} при горизонтальной составляющей скорости $u = \sqrt{I_S/I_v}$.

Можно найти явный вид выражения для эффективной энергии $U(u)$ (3.16), однако оно весьма громоздко и поэтому здесь не приводится. Уравнение, определяющее положение экстремумов этой зависимости и задаваемого ею распределения $P(u)$ (3.14), имеет вид

$$x^3 - S_e x^2 - 2I_S x + 4(I_S - I_v) = 0, \quad x \equiv 1 + u^2. \quad (5.30)$$

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 можно положить $I_u = 0$, и равенства (5.16), (5.28), (3.16) приводят к выражению для эффективной энергии

$$U(u) = \frac{1}{2I_S} \left[\frac{u^4}{2} + (2 - S_e - i)u^2 + \right. \quad (5.31) \\ \left. + (1 - i)(1 - S_e - i) \ln(1 + u^2/i) \right] + \ln[(I_v + I_S u^2)d^2(u)], \quad i \equiv I_v/I_S.$$

Согласно (5.30), эффективная энергия (5.31) имеет минимальное значение в точке $u=0$, если наклон S_e не превышает критическое значение

$$S_c = 1 + 2I_S - 4I_v, \quad (5.32)$$

которое возрастает с увеличением интенсивности флуктуаций наклона и уменьшается с ростом интенсивности флуктуаций вертикальной скорости. При этом песок находится в состоянии покоя. На прямой (5.32) достигается значение горизонтальной скорости

$$u^2 = \frac{1}{2} \left[S_e - 3 + \sqrt{(S_e - 3)^2 - 4(4 - 3S_e - 4I_v)} \right], \quad (5.33)$$

вытекающее из (5.30) после исключения корня $u^2 = 0$. Условия образования лавины легко найти в простом случае $I_v = 0$, когда выражение для данной скорости

принимает вид

$$u_c^2 = \frac{1}{2} \left[(S_e - 3) + \sqrt{(S_e + 7)(S_e - 1)} \right]. \quad (5.34)$$

При $S_e < 4/3$ корни u_c являются комплексными, а при $S_e > 4/3$ — действительными $u_{\pm} = \pm u_c$, что означает образование лавины. При выполнении условия (5.32) корень $u = 0$ отвечает минимуму эффективной энергии (5.31) для $S_e < 4/3$, тогда как при $S_e > 4/3$ он соответствует максимуму, а корни u_{\pm} — симметричным минимумам.

На прямой $I_v = I_S$, после исключения корня $u^2 = 0$ уравнения (5.30), получаем его решения

$$u_{\pm} = \pm \left(\frac{1}{2} \right)^{1/2} \left[S_e - 2 + \sqrt{S_e^2 + 8I_S} \right]^{1/2} \quad (5.35)$$

действительные при наклоне $S_e > 1 - 2I_S$.

Найдем условия существования корней уравнения (5.30) в случае $I_v = 0$. Полагая его дискриминант равным нулю, получаем выражения:

$$I_S = 0, \quad I_S^2 - I_S \left[\frac{27}{2} \left(1 - \frac{S_e}{3} \right) - \frac{S_e^2}{8} \right] + \frac{S_e^3}{2} = 0, \quad (5.36)$$

последнее из которых дает зависимости

$$2I_S = \left[\frac{27}{2} \left(1 - \frac{S_e}{3} \right) - \frac{S_e^2}{8} \right] \pm \left\{ \left[\frac{27}{2} \left(1 - \frac{S_e}{3} \right) - \frac{S_e^2}{8} \right]^2 - 2S_e^3 \right\}^{1/2}. \quad (5.37)$$

Они отвечают 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

$$I_S = 2. \quad (5.38)$$

Эта кривая касается прямой (5.32) в трикритической точке

$$S_e = 4/3, \quad I_S = 1/6, \quad (5.39)$$

в которой происходит образование лавины.

Рассмотрим теперь общий случай, когда существенными оказываются оба мультипликативных шума — $I_v, I_S \neq 0$. Теперь условие экстремума обобщенной

энергии (5.31) приводит к равенству $u = 0$ и уравнению (5.30). Его анализ показывает, что условие существования нулевого решения определяется выражением (5.32), а трикритическая точка имеет координаты

$$S_e = \frac{4}{3}(1 - I_v), \quad I_S = \frac{1}{6}(1 + 8I_v). \quad (5.40)$$

При фиксированных значениях интенсивности I_v фазовая диаграмма имеет вид, качественно совпадающий с показанным на рис. 3.2, где под температурой T_e и интенсивностью I_T следует понимать наклон S_e и интенсивность I_S соответственно. Здесь линии 1, 2 отвечают потере устойчивости системы, т.е. границам областей, отвечающих различным формам зависимости эффективной энергии (5.31) от скорости u . Выше прямой 1 энергия (5.31) имеет минимум только при ненулевой скорости u , и потоковое состояние (SF) является устойчивым. Ниже кривой 2 энергия (5.31) характеризуется минимумом только при $u = 0$, и реализуется равновесное состояние (DF). Между этими линиями энергия (5.31) имеет минимумы при нулевой и ненулевой скорости u , и расположена двухфазная область (SS). Здесь могут происходить переходы между указанными режимами поведения песка. При $I_v < 1/4$ ситуация подобна случаю $I_v = 0$: лавина возникает только при наклоне S_e , превышающем критическое значение (см. рис. 3.2а). С ростом флуктуаций вертикальной скорости до $I_v > 1/4$ ситуация изменяется коренным образом: даже в отсутствие наклона S_e и малых значениях его флуктуаций I_S становится возможным спонтанное образование лавины (см. рис. 3.2б). Согласно (5.40), 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. 3.2в).

Проведенное рассмотрение показывает, что диссипативная динамика течения песка по наклонной поверхности представляется схемой Лоренца, в рамках которой горизонтальная и вертикальная составляющие скорости играют роль параметра порядка и сопряженного поля, а наклон поверхности является управляющим параметром. Исследование, проведенное в пункте 5.1.1, показывает, что для

формирования лавины в отсутствие шума наклон y'_c , задаваемый внешними условиями, должен превышать критическое значение

$$y'_c = (1 + m)\gamma/\tau_y. \quad (5.41)$$

В результате наиболее предрасположенными к образованию стационарной лавины оказываются сыпучие среды, обладающие малыми значениями кинетического коэффициента γ и постоянной m в выражении (5.17), а также большим временем релаксации τ_y скорости течения. В отсутствие шума формирование лавины представляет фазовый переход, обусловленный внешним воздействием, которое обеспечивает наклон, превышающий значение (5.41).

При включении аддитивного некоррелированного шума 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

$$I_S = -\frac{1}{2} + 2I_v, \quad (5.42)$$

следующим из (5.30) при $x = 1$ ($u = 0$) и $S_e = 0$. Таким образом, в отсутствие флуктуаций наклона лавина образуется, если интенсивность шума вертикальной скорости превышает значение

$$I_{v0} = \frac{1}{4} \frac{D\gamma^2}{\tau_x\tau_y\tau_S}, \quad (5.43)$$

отвечающее точке O на рис. 3.3, где под интенсивностями I_T, I_ε следует понимать I_S, I_v соответственно. В общем случае формированию лавины способствуют флуктуации как вертикальной скорости, так и наклона поверхности песка, интенсивности которых ограничены условием (5.42). Смешанное состояние возникает при достижении значений:

$$I_{v1} = \frac{D\gamma^2}{\tau_x\tau_y\tau_S}, \quad I_{S1} = \frac{3}{2} \frac{\gamma^2}{\tau_x\tau_y}, \quad (5.44)$$

отвечающих трикритической точке T на рис. 3.3. Если же интенсивность шума вер-

тикальной скорости превышает еще большее значение

$$I_{v2} = 2 \frac{D\gamma^2}{\tau_x \tau_y \tau_S}, \quad (5.45)$$

соответствующее флуктуациям наклона $I_{S2} = 6\gamma^2/\tau_x \tau_y$ (точка C на рис. 3.3), 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 (SS), представляющих равновесное и потоковое состояния на рис. 3.2, 3.3. Согласно проведенному анализу, указанная перемежаемость возможна в области, ограниченной прямой (5.42) и кубической параболой:

$$I_v = I_S \left[1 - \left(\frac{2}{27} \right)^{1/2} \sqrt{I_S} \right], \quad (5.46)$$

где использованы безразмерные величины I_v, I_S .

5.1.3. Дробная система Лоренца

Для дальнейшего исследования самоорганизующейся системы следует найти распределение вероятности $P(u)$ (3.14), вид которого определяется эффективной энергией $U(u)$ (3.16). В случае $I_u, I_S \ll I_v$ получаем выражение

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

$$f(u) \equiv -u + S_e u / (1 + u^2), \quad (5.47)$$

существенно отличное от однородной функции (5.1), отвечающей самоподобной системе. Флуктуации наклона $I_S \gg I_u, I_v$ приводят к распределению требуемого вида:

$$P(u) \approx I_S^{-1} \left(\frac{1 + u^2}{u} \right)^2 \exp \left\{ I_S^{-1} \int \frac{f(u) (1 + u^2)^2}{u^2} du \right\} \sim u^{-2}. \quad (5.48)$$

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 (5.1) имеем $\tau \approx 3/2$). Во избежание такого ограничения заменим параметр порядка u в нелинейных слагаемых уравнений (5.11) – (5.13) степенным множителем u^a с показателем $0 < a < 1$ [33, 49]. Тогда с учетом стохастических добавок основные уравнения принимают вид:

$$\begin{aligned}\dot{u} &= -u + v + \sqrt{I_u} \xi_1(t), \\ \epsilon \dot{v} &= -v + u^a S + \sqrt{I_v} \xi_2(t), \\ \delta \dot{S} &= (S_e - S) - u^a v + \sqrt{I_S} \xi_3(t),\end{aligned}\tag{5.49}$$

где использованы безразмерные переменные. Физический смысл проведенной замены состоит в том, что требование самоподобия достигается в рамках предположения о дробном характере положительной и отрицательной обратных связей. Тогда условие адиабатичности $\epsilon, \delta \ll 1$ приводит к уравнению Ланжевена (ср. с (5.27))

$$\dot{u} = f_a(u) + \sqrt{I_a(u)} \xi(t),\tag{5.50}$$

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

$$\begin{aligned}f_a(u) &\equiv -u + S_e u^a d_a(u), \\ I_a(u) &\equiv I_u + (I_v + I_S u^{2a}) d_a^2(u), \quad d_a(u) \equiv (1 + u^{2a})^{-1}.\end{aligned}\tag{5.51}$$

Соответствующее распределение (ср. с (3.14))

$$P_a(u) = \frac{\mathcal{Z}^{-1}}{I_a(u)} \exp\{-E_a(u)\},\tag{5.52}$$

где \mathcal{Z} — статистическая сумма, задается эффективным потенциалом

$$E_a(u) \equiv - \int_0^u \frac{f_a(u')}{I_a(u')} du'.\tag{5.53}$$

Точки экстремума этого распределения определяются уравнением:

$$2a I_S u^{2a} + (1 + u^{2a})^2 u^{1-a} [S_e - u^{1-a} (1 + u^{2a})] = 2a(I_S - 2I_v),\tag{5.54}$$

согласно которому граница области образования лавин

$$I_S = 2I_v \quad (5.55)$$

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

$$u^{2(1-a)} (1+u^{2a})^2 [(2+a^{-1}) + (a^{-1}-1) u^{-2a}] - \frac{1}{2} S_e u^{1-a} (1+u^{2a}) [(3+a^{-1}) + (a^{-1}-1) u^{-2a}] = 2aI_S. \quad (5.56)$$

Выражения (5.54) – (5.56) обобщают равенства (5.30), (5.42), (5.46), отвечающие случаю $a = 1$.

Анализ приведенных выражений показывает, что результаты пункта 5.1.2, где $a = 1$, мало изменяются при переходе к общему случаю $0 < a < 1$. 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 (рис. 5.1). 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 (5.55) (см. рис. 3.10, где под напряжением σ_0 и температурой T_e следует понимать скорость u_0 и наклон S_e соответственно). Как и в отсутствие шума (рис. 2.3), нижние ветви кривых отвечают неустойчивым значениям параметра порядка, а верхние — устойчивым. Область отсутствия лавин расположена при промежуточных значениях параметров состояния S_e, I_v, I_S . Фазовая диаграмма, определяющая состояния системы в зависимости от интенсивностей шумов I_v, I_S , имеет вид, подобный случаю $a = 1$. Однако при $a \neq 1$ прямая (5.42) трансформируется в (5.55) (ср. рис. 3.11 и 3.3), где под интенсивностями I_T, I_ε следует понимать I_S, I_v соответственно. Рост шума вертикальной скорости I_v увеличивает область образования лавин.

В полной аналогии с рассмотрением самоподобного режима, проведенным в пункте 3.1.5, приходим к выводу, что влияние случайного разброса скорости u не

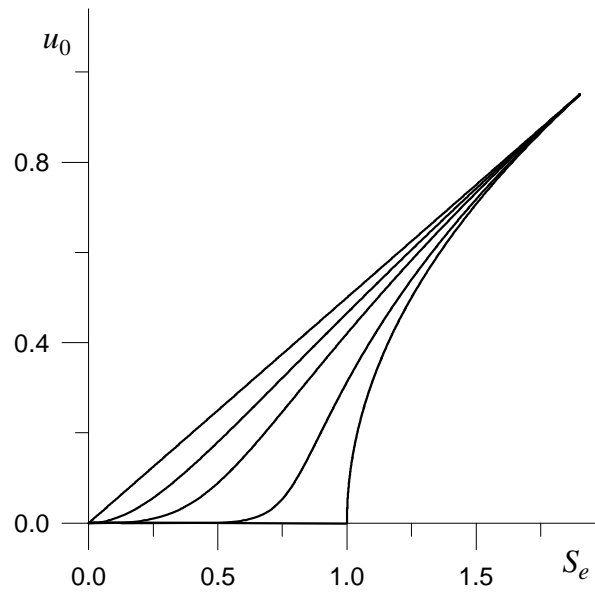


Рис. 5.1. Зависимость стационарной скорости u_0 от параметра S_e при $a = 0; 0.5; 0.7; 0.9; 1.0$ (соответствующие кривые расположены сверху вниз)

существенно, тогда как флуктуации скорости v и наклона S сказываются критическим образом. Качественная картина влияния этих флуктуаций дается фазовой диаграммой, показанной на рис. 3.11, где вместо I_T, I_ε следует взять интенсивности I_S, I_v . Самоподобный режим реализуется в двухфазной области (SS), которая ограничена прямой (5.55) и колоколообразной кривой (5.46). Разброс вертикальной скорости расширяет интервал значений a , характеризующий самоподобное распределение горизонтальной скорости. В самоподобном режиме распределение (5.52) принимает вид, качественно показанный на рис. 3.12 для различных соотношений между интенсивностями флуктуаций скорости v и наклона S , где под напряжением σ следует понимать скорость u . Степенная зависимость, присущая самоподобному режиму, реализуется при $u \ll 1$ и $I_u, I_v \ll I_S$. В этом случае распределение (5.52) сводится к каноническому виду (5.1), где функция $\mathcal{P}(u)$ имеет вид

$$\mathcal{P}(u) = \frac{d_a^{-2}(u)}{ZI_S} \exp \left\{ -I_S^{-1} \int_0^u \frac{d_a^{-2}(u')}{(u')^{2a-1}} du' \right\}, \quad d_a(u) \equiv (1 + u^{2a})^{-1}. \quad (5.57)$$

5.2. Взрывная кристаллизация ультрадисперсных аморфных пленок

5.2.1. Экспериментальные данные

Метастабильные аморфные пленки получают быстрым охлаждением расплава или конденсацией пара на холодную подложку [190–193]. Эксперименты показывают сложность и многообразие проявлений происходящего при этом процесса кристаллизации [190–195]. При малых толщинах пленки тепло, выделяющееся в результате кристаллизации, успевает отводиться в термостат, и реализуется обычный механизм холодной кристаллизации [190]. При этом пленки полупроводников приобретают волнистую поверхность с гребнями, направленными перпендикулярно движению фронта кристаллизации [194]. Такой механизм реализуется при малой частоте зарождения центров кристаллизации [194, 195].

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 [194, 195]. 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 [194, 195].

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 толщины 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 [196]. Примеры такого перехода дают процессы кристаллизации в слоях аморфного льда и некоторых органических веществ [190, 192], а также в аморфных ультрадисперсных порошках германия с вкраплениями кристаллической фазы [192, 193]. Исследованию механизма взрывной кристаллизации, обусловленного указанной неустойчивостью, посвящен настоящий подраздел [33, 64, 65].

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 ¹¹ $J_{max} \sim 10^{14} \text{ с}^{-1}\text{см}^{-3}$, которое отвечает более высоким температурам, чем реализуются в процессе кристаллизации [190]. Поэтому в германии естественный процесс нуклеации 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 [193]. 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. 5.2, где светлый фон отвечает незакристаллизовавшимся областям, приведен характерный вид карти-

¹¹ Так, в слоях аморфного льда, подверженных взрывной кристаллизации, имеем $J_{max} \sim 10^{20} \text{ с}^{-1}\text{см}^{-3}$.

ны, 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 [197, 198].

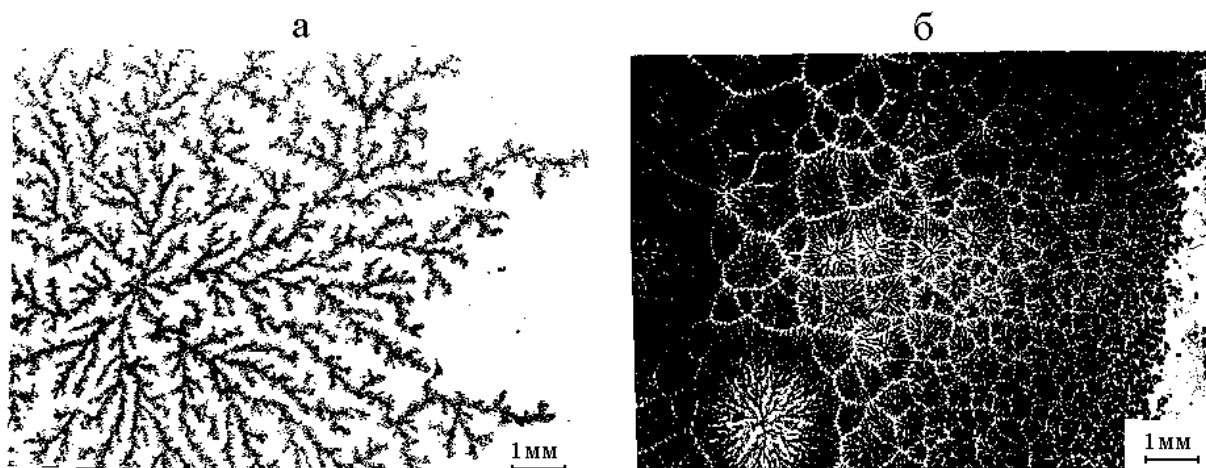


Рис. 5.2. Узоры, возникающие в слое аморфного порошка Ge при взрывной кристаллизации: а — из одного центра; б — из нескольких спонтанно возникших центров

5.2.2. 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 [193]. Покажем, что такой переход является следствием самоорганизации системы, обусловленной положительной обратной связью теплоты перехода со скоростью движения фронта кристаллизации. Впервые указанная неустойчивость обсуждалась в [196].

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 $T_0 - T_\infty$ на фронте кристаллизации и в термостате [33, 64, 65]. В рамках синергетического подхода, изложенного в разделе 2 и подразделе 5.1, 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 (5.11) – (5.13), где горизонтальная компонента скорости песка (параметр порядка) u сводится к скорости фронта кристаллизации, вертикальная компонента скорости песка (сопряженное поле) v — к эффективной температуре T , а наклон поверхности (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 (5.11), нелинейное уравнение (5.12) 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

$$T_0 = T_\infty + A_T u f, \quad (5.58)$$

согласно которой рост скорости фронта кристаллизации и термодинамического фактора приводит к разогреву среды. Кинетическое уравнение (5.13) для разности термодинамических потенциалов фаз f отличается от (5.11), (5.12) 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 (5.12), которая приводит к разогреву фронта кристаллизации, способствующему развитию неустойчивости. С другой стороны, согласно (5.13), этот разогрев приводит к уменьшению термодинамического фактора f , препятствующему ее течению.

Аналитическое исследование системы дифференциальных уравнений (5.11)–(5.13) возможно при выполнении адиабатических условий

$$\tau_T \ll \tau_u, \quad \tau_f \ll \tau_u, \quad (5.59)$$

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 подразделу 2.2 и пункту 5.1.1, при постоянных значениях времен релаксации τ_u, τ_T, τ_f система (5.11) – (5.13) 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 (5.17). В результате поведение системы определяется синергетическим потенциалом (5.16) и (5.18), вид которого показан на рис. 2.2, где температура поверхностей трения T_e 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 (5.19), — взрывной. Согласно рис. 2.3, 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 (5.20). Очевидно, это и означает переход к механизму взрывной кристаллизации. Согласно рассмотрению, проведенному в подразделе 2.4 и пункте 5.1.1, а также рис. 2.4, в интервале реализации перехода первого рода (f_c^0, f_c) , где нижний предел дается равенством (5.23), стационарное значение разности термодинамических потенциалов фаз (5.21) 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. 5.2а). 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. 5.2б).

5.2.3. Описание взрывной кристаллизации в представлении самоорганизующейся критичности

Отличие СОК от фазового перехода состоит в том, что не требует внешнего воздействия (например, накачки энергии). Настоящий пункт посвящен развитию картины, позволяющей представить взрывную кристаллизацию как режим СОК [33, 64, 65]. В рамках такого представления эволюция системы развивается как иерархическая последовательность элементарных актов самоорганизации, называемых лавинами [29]. 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 узоров кристаллизации, приведенных на рис. 5.2, где она обнаруживается в форме древовидной фрактальной структуры. Такое иерархическое дерево представляет геометрический образ ультраметрического пространства, в котором реализуются состояния системы [199].

Представим сначала геометрическую картину распределения узлов иерархического дерева по его уровням [33, 200].

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. 5.3 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

$$u = u_0 - n. \quad (5.60)$$

Элементарные акты самоорганизации отвечают узлам нижнего уровня $n=u_0$. Расстояние между узлами, определяемое числом шагов к общему предку, сводится к номеру уровня (5.60), отсчитанному снизу вверх.

Как видно из рис. 5.3а, в простейшем случае регулярного дерева с целым показателем ветвления s число узлов $N_n = s^n$ экспоненциально спадает с расстоянием u между ними:

$$N(u) = N \exp(-u \ln s), \quad N \equiv s^{u_0}. \quad (5.61)$$

Здесь использовано равенство (5.60), максимальное число узлов N отвечает уровню u_0 . Для дерева Фибоначчи (рис. 5.3б), где $N_n = \nu \tau^n$, $\nu \approx 1.171$, $\tau \approx 1.618$, имеем

$$N(u) = N \exp(-u \ln \tau), \quad N \equiv \nu \tau^{u_0}. \quad (5.62)$$

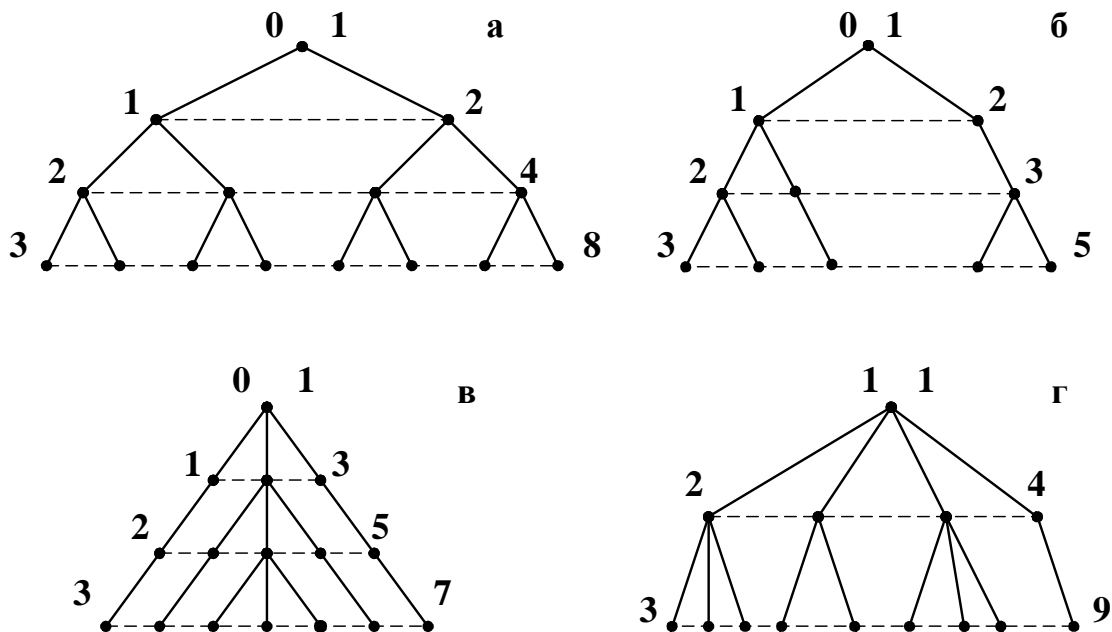


Рис. 5.3. Основные типы иерархических деревьев (номер уровня показан слева, число узлов — справа): а — регулярное дерево с $s = 2$; б — дерево Фибоначчи; в — вырожденное дерево с $s = 3$; г — нерегулярное дерево для $a = 2$

Характерно, что экспоненциальная зависимость остается и в случае дробного показателя ветвления $s = \tau$.

Для вырожденного дерева (рис. 5.3в) равенство $N_n = (s - 1)n + 1$ и формула (5.60) дают линейную зависимость

$$N(u) = N - (s - 1)u, \quad N \equiv (s - 1)u_0 + 1. \quad (5.63)$$

Очевидно, в случае нерегулярного дерева, представленного на рис. 5.3г, реализуется степенная зависимость

$$N_n = n^a, \quad a > 1, \quad (5.64)$$

имеющая промежуточный характер между экспонентами (5.61), (5.62) и линейной зависимостью (5.63). Далее равенство (5.64) удобно переписать как функцию расстояния u :

$$N(u) = N(1 - u/u_0)^a, \quad N \equiv u_0^a, \quad a > 1. \quad (5.65)$$

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

$$j_n = -\chi(Q_n) \frac{dQ_n}{dn}, \quad (5.66)$$

тепловой поток между уровнями иерархии n определяется теплотой кристаллизации Q_n и эффективным коэффициентом температуропроводности

$$\chi(Q) = \chi Q^\beta, \quad (5.67)$$

где $\chi, \beta > 0$. В стационарном состоянии полный поток равномерно распределен по иерархическим уровням согласно условию

$$j_n N_n = \text{const} \equiv J. \quad (5.68)$$

Использование выражений (5.65) – (5.67) дает тепловой эффект кристаллизации

$$Q_n = Q n^{-b}, \quad b = \frac{a-1}{1+\beta} > 0, \quad (5.69)$$

нормированный максимальным значением $Q \equiv Q_{n=1}$. Подставляя сюда (5.60), получаем

$$Q(u) = q(1 - u/u_0)^{-b}, \quad (5.70)$$

где тепловой эффект на нижнем уровне $u = 0$ составляет

$$q \equiv Q u_0^{-b} = Q N^{-b/a}. \quad (5.71)$$

В общем случае условие сохранения потока (5.68) не выполняется, и поведение системы задается скейлинговым соотношением

$$Q_n = N^{b/a} n^{-b} q_n, \quad (5.72)$$

вид которого следует из равенств (5.69), (5.71). Согласно (5.66) – (5.68), медленно изменяющаяся функция q_n удовлетворяет уравнению Ландау–Халатникова (5.15), где роль времени t и скорости u играют величины ϑ, x , определенные равенствами

$$\vartheta \equiv \ln n^b; \quad x \equiv q_n/q_c, \quad q_c^{1+\beta} \equiv (J/b\chi) N^{-(a-1)/a}, \quad (5.73)$$

а потенциал (5.16) приобретает вид

$$V = \frac{x^{1-\beta}}{1-\beta} - \frac{x^2}{2}, \quad (5.74)$$

показанный на рис. 5.4. Максимальное значение $V_0 = (1 + \beta)/2(1 - \beta)$ достигается при $x_c = 1$, а при $x > 1$ величина V неограниченно падает. 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 (3.9))

$$\frac{dx}{d\vartheta} = -\frac{\partial V}{\partial x} + \sqrt{\chi}\xi \quad (5.75)$$

с белым шумом $\xi(\vartheta)$ (3.4) с интенсивностью, сводящейся к коэффициенту температуропроводности χ , введенному в определении (5.67).

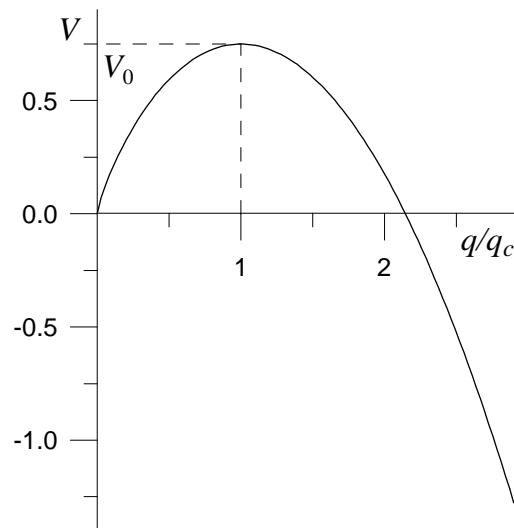


Рис. 5.4. Вид эффективного потенциала (5.74) при $\beta = 0.2$

Решения стохастического уравнения (5.75) распределены в ультраметрическом пространстве согласно функции $w(\vartheta, x)$, удовлетворяющей уравнению Фоккера–Планка [162]

$$\frac{\partial w}{\partial \vartheta} + \frac{\partial j}{\partial x} = 0, \quad j \equiv -w \frac{\partial V}{\partial x} - \chi \frac{\partial w}{\partial x}. \quad (5.76)$$

В равновесном состоянии поток отсутствует ($j = 0$), и функция распределения

$$w_0(x) \propto \exp\{-V(x)/\chi\} \quad (5.77)$$

определяется потенциалом (5.74). С переходом в стационарное состояние постоянный поток приобретает ненулевое значение, определяемое равенством (5.68), а плотность вероятности w остается независимой от номера иерархического уровня $n \equiv \exp(\vartheta/b)$. Согласно (5.76), стационарное $w(x)$ и равновесное $w_0(x)$ распределения связаны равенством [136]:

$$\frac{w(q)}{w_0(q)} = \frac{j}{\chi} \int_{q/q_c}^{\infty} \frac{dx}{w_0(x)}, \quad (5.78)$$

где учтено граничное условие $w \rightarrow 0$ при $q \rightarrow \infty$.

Выражение (5.78) 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 (5.78), дополненное граничным условием $w(G) = w_0(G)$, приводит к потоку

$$j = 2\chi W \left\{ 1 + \operatorname{erf} \left[\sqrt{\frac{1+\beta}{2\chi}} \left(1 - \frac{G}{q_c} \right) \right] \right\}^{-1}, \quad (5.79)$$

где коэффициент

$$W \propto \exp(-V_0/\chi), \quad V_0 = \frac{1}{2} \frac{1+\beta}{1-\beta} \quad (5.80)$$

представляет вероятность преодоления барьера потенциала (5.74). Согласно (5.79), 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 (5.78), 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 $w(q) \approx 0$ ¹². При этом рост граничного значения q_b задается уравнением [201]

$$\frac{dq_b}{d\vartheta} = \chi \frac{q_b - q_c}{q_b^2}. \quad (5.81)$$

Для определения критического значения теплового эффекта q_c сравним макроскопический поток J в (5.68) и микроскопический j в (5.76). Они отличаются множителем $N^{(a-1)/a} \equiv u_0^{a-1}$, величина которого определяется полным числом зародышей N (см. (5.65)). Тогда последнее равенство (5.73) и выражение (5.79), взятое при $G = 0$, $\chi \ll 1$, дают

$$q_c = Q \exp\left(-\frac{(1-\beta)^{-1}}{2\chi}\right), \quad (5.82)$$

где предэкспоненциальный множитель Q представляет вероятность преодоления барьера, не подлежащую определению в рамках использованного подхода. Равенство (5.82) подобно известному результату теории БКШ для температуры сверхпроводящего перехода. Согласно (5.82), критический тепловой эффект q_c медленно возрастает с увеличением теплопроводности χ , играющей роль параметра эффективного взаимодействия.

5.2.4. 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 (5.1))

$$P(Q, u) = u^{-\tau} w(q), \quad (5.83)$$

¹²Более точно определение потока (5.76), где диффузионный вклад пренебрежимо мал, дает $w \approx -j(\partial V/\partial x)^{-1}$.

где $w(q)$ — стационарное распределение зародышей, рассмотренное в предыдущем пункте;

τ — положительный показатель.

Физический смысл скейлингового соотношения (5.83) состоит в том, что в масштабе $(1-u/u_0)^{-b}$ полное тепло Q сводится к вкладу одного зародыша q (см. (5.70)), и распределение (5.83) 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. 5.2 [33, 64, 65]. Обратная вероятность $\bar{\mathcal{P}}(t)$ отсутствия кристаллизации за время t определяется интегрированием по u распределения (5.83) с весовой функцией

$$p_u(t) = \exp\{-t/t(u)\}, \quad t(u) = t_0 \exp\{Q(u)/\chi\}, \quad (5.84)$$

определяющей дебаевскую релаксацию со временем $t(u)$, задаваемым высотой барьера (5.70). Высота барьера V_m синергетического потенциала (5.16), (5.18) задает время зарождения центра кристаллизации в (5.84):

$$t_0 \approx \tau_D \exp(V_m/\Delta), \quad (5.85)$$

где параметр Δ представляет разброс значений f_e ,

$$\tau_D \sim 10^{-12} \text{ с} \text{ — дебаевское время.}$$

Использование метода перевала приводит к асимптотической зависимости ($t \gg t_{ef}$)

$$\bar{\mathcal{P}}(t) = \left(\frac{q}{\chi}\right)^{\tau/b} \left[1 - \left(\frac{\chi}{q} \ln \frac{t}{t_{ef}}\right)^{-1/b}\right]^{-\tau}, \quad t_{ef} \equiv \frac{\tau}{b} \left(\frac{q}{\chi}\right)^{1/b} t_0, \quad (5.86)$$

где предполагается условие $1 \ll u_m \leq u_0$, в котором u_m отвечает максимуму подинтегрального выражения и удовлетворяет уравнению

$$\frac{\chi\tau}{bq} \frac{(1-x)^{1+b}}{x} = \frac{t}{t_0} \exp\left\{-\frac{q}{\chi}(1-x)^{-b}\right\}, \quad x \equiv \frac{u_m}{u_0}. \quad (5.87)$$

Учитывая скейлинговое соотношение

$$u_0 \propto (q_c - q)^{-1/\sigma}, \quad \sigma > 0 \quad (5.88)$$

для обрезающего параметра u_0 , приходим к неравенствам

$$q - q_c \ll q, \quad t \gg t_{ef} \exp \left\{ (q_c/\chi)^{-1/b} - 1 \right\}^{-b}, \quad (5.89)$$

обеспечивающим указанные условия. При этом тепловой эффект q в равенствах (5.86), (5.87) можно заменить критическим значением q_c .

Согласно (5.86), 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 (5.82) теплота $Q = \frac{\epsilon}{2}(1 - \beta)^{-1}$, а коэффициент температуропроводности ограничен максимальным значением $\chi_0 = \frac{1}{2}(1 - \beta)^{-1}$.

Подобно формированию закритического зародыша в ходе фазового перехода первого рода [136], преодоление барьера V_0 , обеспечивающее закритический тепловой эффект $q > q_c$, происходит за время (ср. с (5.80))

$$t_c \approx t_0 \exp(V_0/\chi). \quad (5.90)$$

Последующий рост зародыша обеспечивается иерархической теплопроводностью, приводящей к логарифмической зависимости вероятности формирования полного кластера

$$\mathcal{P}(t) = 1 - \bar{\mathcal{P}} \left[1 - \bar{\mathcal{P}}^{1/\tau} \left(\ln \frac{t - t_c}{t_{ef}} \right)^{-1/b} \right]^{-\tau}, \quad t_{ef} \equiv (\tau/b) \bar{\mathcal{P}}^{1/\tau} t_0, \quad (5.91)$$

где время t отсчитано от значения (5.90). Минимальная вероятность отсутствия кристаллизации

$$\bar{\mathcal{P}} = \left(\frac{\chi_0}{\chi} \right)^{\tau/b} \exp \left\{ -\frac{\tau}{b} \left(\frac{\chi_0}{\chi} - 1 \right) \right\} \quad (5.92)$$

определяется отношением интенсивности шума χ к максимальному значению $\chi_0 = \frac{1}{2}(1 - \beta)^{-1}$. Согласно (5.92), с ростом температуропроводности χ максимальная вероятность кристаллизации $\mathcal{P} \equiv 1 - \bar{\mathcal{P}}$ стремится к нулю согласно рис. 5.5.

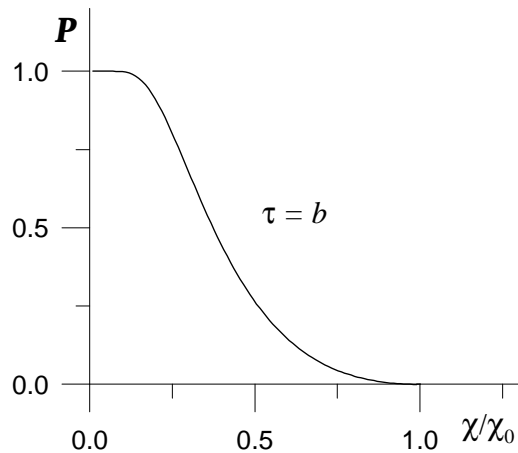


Рис. 5.5. Зависимость максимальной вероятности кристаллизации \mathcal{P} от температуропроводности χ

5.3. Суперсимметричная теория самоорганизующейся системы с эффектами памяти и потери эргодичности

5.3.1. Микроскопическое представление системы Лоренца

В настоящее время в теории самоорганизующихся систем сложилась своеобразная ситуация. Более двадцати лет успешно развивается синергетическая концепция, позволяющая объяснить самоорганизацию (упорядочение) открытой системы за счет усиления беспорядка окружающей среды [1]. Однако она не использовалась для описания неэргодичности, присущей, например, структурным и спиновым стеклам [115, 117, 143–146, 202], транспортным потокам [69, 70, 164, 168, 203], потоковым стационарным состояниям (лавинам) [18, 49]. В связи с этим стандартный синергетический подход требует нетривиального расширения — необходимо описать не только потерю симметрии при упорядочении самоорганизующейся системы, но и потерю эргодичности, приводящую к кластеризации фазового пространства. Решению этой задачи в рамках суперсимметричной теории [30–32, 204, 205] посвящен настоящий подраздел [33, 66, 67]. При этом исследуется только картина самоорганизации без рассмотрения ансамбля лавин.

Как в разделе 2 и подразделах 5.1, 5.2, 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 [110]. 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 упорядочивающуюся 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 2. 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 [34]. При этом весьма удобным оказывается использование системы Лоренца [1]:

$$\tau_\eta \dot{\eta} = -\eta + A_\eta h, \quad (5.93)$$

$$\tau_h \dot{h} = -h + A_h \eta S, \quad (5.94)$$

$$\tau_S \dot{S} = (S_e - S) - A_S \eta h, \quad (5.95)$$

где точка означает дифференцирование по времени t ;

$\tau_\eta, \tau_h, \tau_S$ — времена релаксации соответствующих величин;

A_η, A_h, A_S — положительные константы связи;

S_e — параметр внешнего воздействия.

Она является простейшей синергетической схемой, описывающей классическую модель хаоса и странного аттрактора [175], которая была впервые предложена для описания хаотических флуктуаций при конвективном течении [174] и позже при генерации в одномодовом лазере [206].

Изложим сначала микроскопическую схему, представляющую процесс самоорганизации [33, 66]. 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

$$H = \sum_{\mathbf{k}} \left\{ (E_1 n_{\mathbf{k}1} + E_2 n_{\mathbf{k}2}) + \omega_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}}^+ b_{\mathbf{k}} + \frac{i}{2} v (b_{\mathbf{k}}^+ d_{\mathbf{k}} - d_{\mathbf{k}}^+ b_{\mathbf{k}}) \right\}, \quad (5.96)$$

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 гамильтониану (5.96), имеют вид

$$\dot{b}_{\mathbf{k}} = -i\omega_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}} + (v/2) d_{\mathbf{k}}, \quad (5.97)$$

$$\dot{d}_{\mathbf{k}} = -i\Delta d_{\mathbf{k}} + (v/2) b_{\mathbf{k}} (n_{\mathbf{k}2} - n_{\mathbf{k}1}), \quad (5.98)$$

$$\dot{n}_{\mathbf{k}1} = (v/2)(b_{\mathbf{k}}^+ d_{\mathbf{k}} + d_{\mathbf{k}}^+ b_{\mathbf{k}}), \quad (5.99)$$

$$\dot{n}_{\mathbf{k}2} = -(v/2)(b_{\mathbf{k}}^+ d_{\mathbf{k}} + d_{\mathbf{k}}^+ b_{\mathbf{k}}), \quad (5.100)$$

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 (5.97), (5.98), 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 $-i/\tau_{\eta}$, $-i/\tau_h$, характеризуемые временами релаксации τ_{η} , τ_h (условия $\text{Im } \omega_{\mathbf{k}} < 0$, $\text{Im } \Delta < 0$ отражают принцип причинности). В результате уравнения (5.97), (5.98) 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 (5.99), (5.100) 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:

$$\eta_{\mathbf{k}} \equiv \langle b_{\mathbf{k}}^+ \rangle = \langle b_{\mathbf{k}} \rangle, h_{\mathbf{k}} \equiv \langle d_{\mathbf{k}} \rangle = \langle d_{\mathbf{k}}^+ \rangle, S_{\mathbf{k}} \equiv \langle n_{\mathbf{k}2} - n_{\mathbf{k}1} \rangle, S_{e\mathbf{k}} \equiv \langle n_{\mathbf{k}2}^e - n_{\mathbf{k}1}^e \rangle, \quad (5.101)$$

где угловые скобки означают термодинамическое усреднение. Тогда в пренебрежении корреляцией в распределении частиц по квантовым состояниям уравнения Гейзенберга (5.97) – (5.100), дополненные диссипативными слагаемыми, приводят к системе Лоренца (5.93) – (5.95). 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 (5.93) – (5.95) 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 [1, 34].

Для анализа полученных уравнений введем масштабы η_m , h_m , S_c , определяющие изменения параметра порядка η , сопряженного поля h и управляющего параметра S :

$$\begin{aligned}\eta_m^{-2} &\equiv A_h A_S = \tau_h \tau_S v^2, & h_m^{-1} &\equiv A_\eta / \eta_m = (\tau_\eta / 2) (\tau_h \tau_S)^{1/2} v^2, \\ S_c^{-1} &\equiv A_\eta A_h = 2^{-2} \tau_\eta \tau_h v^2.\end{aligned}\tag{5.102}$$

Тогда использование нормированных величин η , h , S приводит систему Лоренца к простейшему виду (ср. с (5.11) – (5.13)):

$$\tau_\eta \dot{\eta} = -\eta + h,\tag{5.103}$$

$$\tau_h \dot{h} = -h + \eta S,\tag{5.104}$$

$$\tau_S \dot{S} = (S_e - S) - \eta h.\tag{5.105}$$

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 (5.105), который препятствует нарастанию параметров состояния термостата $S(\eta)$, $h(\eta)$. Положительная связь величин η , S с h в (5.104) приводит к противоположному влиянию упорядочивающейся подсистемы на параметры термостата $h(\eta)$, $S(\eta)$. Отметим, что если изменить оба знака перед нелинейными слагаемыми в (5.104), (5.105), 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 сопряженного поля, то она является формальной причиной самоорганизации, поскольку помимо параметра порядка η основное уравнение (5.103) 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 [1, 34]. Соответствующая картина самоорганизации изложена в подразделе 2.4 и пункте 5.1.1.

Далее показано (см. пункт 5.3.2 и приложение А), что система Лоренца отвечает простейшему лагранжиану суперсимметричного поля, компоненты которого представляют величины η , h , S . В отличие от обычной полевой теории стохастической системы [30], 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 [30], где суперполе представляет не более чем удобное техническое средство). Исследование корреляторов суперполя, проводимое в пункте 5.3.3, показывает, что в эргодическом состоянии компоненты таких корреляторов не являются независимыми: наличие суперсимметрии обуславливает выполнение флуктуационно—диссипационной теоремы, связывающей указанные компоненты [30]. 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.

5.3.2. Суперсимметричный лагранжев формализм

В разделе 2 и пункте 5.1.1 мы в рамках адиабатического приближения пренебрегли флуктуациями сопряженного поля h и управляющего параметра S , что позволило свести систему Лоренца (5.103)–(5.105) к уравнению Ландау–Халатникова (2.26), где под напряжением σ следует понимать параметр порядка η . Для построения лагранжева формализма следует совершить обратный переход, включая в (2.26) действие флуктуаций ζ [33, 66]. Тогда с учетом неоднородности исходное выражение сводится к уравнению Ланжевена [162]:

$$\dot{\eta}(\mathbf{r}, t) - \nabla^2 \eta(\mathbf{r}, t) = f(\mathbf{r}, t) + \zeta(\mathbf{r}, t), \quad (5.106)$$

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 затронутого потенциала, отнесенного к интенсивности флуктуаций T .

Слагаемое $-\nabla^2 \eta$ учитывает пространственную неоднородность в рамках модели Гинзбурга–Ландау. Выражение (5.106) записано для несохраняющегося параметра порядка, в противном случае члены $-\nabla^2 \eta$, f приобретают дополнительный оператор $-\nabla^2$ [3, 160]. Флуктуационное слагаемое нормировано условиями белого шума

$$\langle \zeta(\mathbf{r}, t) \rangle = 0, \quad \langle \zeta(\mathbf{r}, t) \zeta(\mathbf{r}', t') \rangle = T \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta(t - t'), \quad (5.107)$$

которые отвечают усреднению по распределению Гаусса с дисперсией T .

Для построения лагранжиана, отвечающего уравнению Ланжевена (5.106), воспользуемся стандартной полевой схемой [30], основанной на рассмотрении производящего функционала

$$Z\{\eta(\mathbf{r}, t)\} = \left\langle \prod_{(\mathbf{r}, t)} \delta(\dot{\eta} - \nabla^2 \eta - f - \zeta) \det \left| \frac{\delta \zeta}{\delta \eta} \right| \right\rangle, \quad (5.108)$$

который представляет обобщение статистической суммы. Здесь континуальное произведение берется по полному набору координат \mathbf{r} и времени t , δ –функция учи-

тывает уравнение Ланжевена (5.106), детерминант представляет якобиан перехода от ζ к η . Следуя стандартной схеме [30], 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 (5.108) принимает стандартный вид

$$Z\{\eta\} = \int P\{\eta, \varphi, \bar{\psi}, \psi\} D\varphi D\psi D\bar{\psi}, \quad P \propto e^{-S}, \quad S \equiv \int \mathcal{L}(\eta, \varphi, \bar{\psi}, \psi) d\mathbf{r} dt, \quad (5.109)$$

где лагранжиан

$$\mathcal{L} = \varphi(\dot{\eta} - \nabla^2 \eta) - \bar{\psi}(\dot{\psi} - \nabla^2 \psi) - \frac{\varphi^2}{2} + \varphi V_0'(\eta) - V_0''(\eta) \bar{\psi} \psi \quad (5.110)$$

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

$$\dot{\eta} - \nabla^2 \eta = -V_0'(\eta) + \varphi, \quad (5.111)$$

$$\dot{\varphi} + \nabla^2 \varphi = V_0''(\eta) \varphi - V_0'''(\eta) \bar{\psi} \psi, \quad (5.112)$$

$$\dot{\psi} - \nabla^2 \psi = -V_0''(\eta) \psi, \quad (5.113)$$

$$-\dot{\bar{\psi}} - \nabla^2 \bar{\psi} = -V_0''(\eta) \bar{\psi}. \quad (5.114)$$

Первое сводится к виду уравнения Ланжевена (5.106), если стохастической добавке ζ сопоставить поле φ . Согласно принципу наименьшего действия, из которого следуют уравнения Эйлера, это поле отвечает максимуму распределения P в (5.109). 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 $\pm \varphi$. Характерным является распределение знаков перед градиентными слагаемыми в уравнениях (5.111) – (5.114): 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 А

показано, что полевые уравнения (5.111) – (5.114) совпадают по структуре с системой Лоренца (5.103) – (5.105).

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

$$\Phi = \eta + \bar{\psi}\chi + \bar{\chi}\psi - \bar{\chi}\chi f, \quad (5.115)$$

где грассмановы координаты χ , $\bar{\chi}$ обладают теми же антикоммутиационными свойствами, что и поля ψ , $\bar{\psi}$. Для суперсимметричного представления лагранжиана (5.110) следует прежде всего заменить затравочный потенциал $V_0(\eta)$ на перенормированный $\tilde{V}(\eta)$, фигурирующий в уравнении движения (A.8)¹³, а также избавиться от градиентных слагаемых, переходя к вариационным производным

$$\tilde{V}'\{\eta\} \equiv \frac{\delta\tilde{V}\{\eta\}}{\delta\eta} = \frac{\partial\tilde{V}(\eta)}{\partial\eta} - \nabla^2\eta, \quad \tilde{V}\{\eta\} \equiv \int \tilde{V}(\eta) d\mathbf{r}. \quad (5.116)$$

Тогда, выражая амплитуду флуктуаций φ через обобщенную силу f согласно равенству (A.10), приводим лагранжиан (5.110) к виду

$$\mathcal{L} = \left(\frac{\dot{\eta}^2}{2} - \bar{\psi}\dot{\psi} - \frac{f^2}{2} \right) + \left(-\tilde{V}'\{\eta\}f - \bar{\psi}\tilde{V}''\{\eta\}\psi \right) + \tilde{V}'\{\eta\}\dot{\eta}. \quad (5.117)$$

Последнее слагаемое может быть опущено как полная производная по времени от $\tilde{V}\{\eta\}$, и в представлении суперполя (5.115) лагранжиан (5.117) принимает канонический вид

$$\mathcal{L} = \int \Lambda(\Phi) d\chi d\bar{\chi}, \quad \Lambda \equiv -\frac{1}{2}\Phi\bar{D}D\Phi + \tilde{V}(\Phi). \quad (5.118)$$

Здесь кинетическая суперэнергия ядра Λ отвечает первой скобке выражения (5.117), а потенциальная $\tilde{V}(\Phi)$ — второй. В рамках Φ^4 -модели равенства (A.4), (A.8), (A.9) дают

$$\tilde{V} = \frac{\sigma}{2} + \frac{1-\sigma}{2}\Phi^2 + w\frac{1+6\sigma}{12}\Phi^4, \quad (5.119)$$

где параметр ангармонизма $w > 0$ возникает благодаря тому, что в отличие от параметра порядка η суперполе (5.115) не может быть масштабировано единственным

¹³Эта перенормировка обусловлена самосогласованием компонент суперполя (5.115).

значением η_m (см. (5.102)). Генераторы группы суперсимметрии имеют вид

$$D = \frac{\partial}{\partial \bar{\chi}} - \chi \frac{\partial}{\partial t}, \quad \bar{D} = \frac{\partial}{\partial \chi} - \bar{\chi} \frac{\partial}{\partial t}. \quad (5.120)$$

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

$$-\frac{1}{2}[\bar{D}, D]\Phi + \tilde{V}'\{\Phi\} = 0, \quad \frac{1}{2}[\bar{D}, D]\Phi \equiv f + \dot{\psi}\chi + \bar{\chi}\dot{\psi} + \bar{\chi}\chi\ddot{\eta}. \quad (5.121)$$

Проектируя (5.121) на орты суперпространства $1, \bar{\chi}, \chi, \bar{\chi}\chi$, приходим к уравнениям

$$\ddot{\eta} = -\tilde{V}''\{\eta\}f - \tilde{V}'''\{\eta\}\bar{\psi}\psi, \quad (5.122)$$

$$f = -\tilde{V}'\{\eta\}, \quad (5.123)$$

$$\dot{\psi} = -\tilde{V}''\{\eta\}\psi, \quad (5.124)$$

$$\dot{\bar{\psi}} = \tilde{V}''\{\eta\}\bar{\psi}, \quad (5.125)$$

последние из которых с точностью до замены \tilde{V} на V_0 совпадают с (5.113), (5.114), а связь (5.123) дает определение силы f . Что касается уравнения (5.122), то оно получается после дифференцирования равенства (5.111) по времени и подстановки в результат производных $\dot{\eta}$, $\dot{\varphi}$ из (A.10), (5.112). Таким образом, с точностью до перенормировки (A.8) затравочного потенциала $V_0(\eta)$ системы (5.111) – (5.114), (5.122) – (5.125) оказываются эквивалентными. Однако если уравнения первой симметричны относительно порядка производной по времени, то при переходе от флуктуации φ к обобщенной силе f в системе (5.122) – (5.125) такая симметрия пропадает.

Можно показать [204], 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 А, произведение грассмановых полей представляет энтропию и, следовательно, их поведение является существенно важным при описании процесса самоорганизации.

5.3.3. Корреляционная техника

Введем суперсимметричный коррелятор

$$C(z, z') \equiv \langle \Phi(z)\Phi(z') \rangle, \quad z \equiv \{\mathbf{r}, t, \bar{\chi}, \chi\}. \quad (5.126)$$

Согласно уравнению движения (5.121), его затравочная составляющая $C^{(0)}(z, z')$, отвечающая потенциалу $\tilde{V}^{(0)} = (1 - \sigma)\Phi^2/2$, удовлетворяет равенству

$$L_{\mathbf{k}\omega}(\chi)C_{\mathbf{k}\omega}^{(0)}(\chi, \chi') = \delta(\chi, \chi'), \quad L \equiv (1 - \sigma) - \frac{1}{2}[\bar{D}, D], \quad (5.127)$$

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 (5.120) и соотношения $(1/4)[\bar{D}, D]^2 = -\omega^2$ получаем

$$C^{(0)}(\chi, \chi') = \frac{1 + (\bar{\chi}\chi + \bar{\chi}'\chi') - [(1 - \sigma) + i\omega]\bar{\chi}\chi' - [(1 - \sigma) - i\omega]\bar{\chi}'\chi + \omega^2\bar{\chi}\chi\bar{\chi}'\chi'}{(1 - \sigma)^2 + \omega^2}, \quad (5.128)$$

где для краткости опущен индекс ω и не учитывается пространственная дисперсия. Выражение (5.128) представляет разложение по базисным составляющим:

$$\mathbf{B}_0 = \bar{\chi}\chi, \quad \mathbf{B}_1 = \bar{\chi}'\chi', \quad \mathbf{T} = 1, \quad \mathbf{T}_1 = \bar{\chi}\chi\bar{\chi}'\chi'; \quad (5.129)$$

$$\mathbf{F}_0 = -\bar{\chi}'\chi, \quad \mathbf{F}_1 = -\bar{\chi}\chi'. \quad (5.130)$$

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

$$X(\chi, \chi') = \int Y(\chi, \chi'')Z(\chi'', \chi')d\chi''d\bar{\chi}''. \quad (5.131)$$

Тогда компоненты (5.129), (5.130) 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 (5.126):

$$\mathbf{C} = g_+\mathbf{B}_0 + g_-\mathbf{B}_1 + S\mathbf{T} + s\mathbf{T}_1 + G_+\mathbf{F}_0 + G_-\mathbf{F}_1. \quad (5.132)$$

Подставляя (5.115) в (5.126), получаем коэффициенты

$$g_+ = -\langle f\eta \rangle, g_- = -\langle \eta f \rangle; S = \langle \eta^2 \rangle, s = \langle f^2 \rangle; G_+ = \langle \bar{\psi}\psi^* \rangle, G_- = \langle \bar{\psi}^*\psi \rangle. \quad (5.133)$$

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 грасманово сопряженных полей $\bar{\psi}, \psi$. Для затравочного суперкоррелятора (5.128) имеем

$$\begin{aligned} g_{\pm}^{(0)} = S^{(0)} &= [(1 - \sigma)^2 + \omega^2]^{-1}, & s^{(0)} &= \omega^2[(1 - \sigma)^2 + \omega^2]^{-1}, \\ G_+^{(0)} &= [(1 - \sigma) + i\omega]^{-1}, & G_-^{(0)} &= [(1 - \sigma) - i\omega]^{-1}. \end{aligned} \quad (5.134)$$

Отсюда с учетом (A.10) находим связь $\langle \eta\varphi \rangle_0 = G_-^{(0)}$, представляющую частный случай тождества Уорда [30]. Оно означает, что коррелятор грасмановых полей сводится к функции отклика параметра порядка η на амплитуду флуктуаций φ .

Согласно [32], для дальнейшего рассмотрения удобно перейти к суперсимметричному полю

$$\Phi = \eta + \bar{\psi}\chi + \bar{\chi}\psi + \bar{\chi}\chi\varphi, \quad (5.135)$$

отличающемуся от исходного выражения (5.115) 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 (5.132) принимает компактный вид

$$\mathbf{C} = G_+\mathbf{A} + G_-\mathbf{B} + S\mathbf{T}, \quad (5.136)$$

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 (5.136) позволяет обращаться с суперкоррелятором (5.126) как с вектором прямого произведения суперпространств.

В результате поведение самоорганизующейся системы описывается лагранжианом

$$\mathcal{L} = \left(\varphi\dot{\eta} - \bar{\psi}\dot{\psi} - \frac{\varphi^2}{2} \right) + (\tilde{V}'\{\eta\}\varphi - \bar{\psi}\tilde{V}''\{\eta\}\psi). \quad (5.137)$$

Введем замороженный беспорядок

$$p^2 = \frac{\overline{(f(\mathbf{r}) - \bar{f})^2} - (\Delta\varphi)^2}{(\Delta\varphi)^2}, \quad (5.138)$$

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 (5.137), принимает вид

$$-\frac{1}{2} \int |\varphi_{\omega}|^2 \frac{d\omega}{2\pi} - \frac{p^2}{2} \int \delta(\omega) |\varphi_{\omega}|^2 d\omega. \quad (5.139)$$

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 (5.139) сводится к стандартной форме $-(1/2) \int \varphi^2 dt$. В условиях закалки имеем $p > 0$, и второе слагаемое в (5.139) приводит к перенормировке затравочного суперкоррелятора (5.128), компонента $S^{(0)}$ которого приобретает в (5.134) множитель $1 + 2\pi p^2 \delta(\omega)$. Соответственно для оператора \mathbf{L} в уравнении движения (5.127) находим

$$\mathbf{L} = L_+ \mathbf{A} + L_- \mathbf{B} + L \mathbf{T}; \quad L_{\pm} = (1 - \sigma) \pm i\omega, \quad L = - [1 + 2\pi p^2 \delta(\omega)]. \quad (5.140)$$

Кроме указанной перенормировки затравочного суперкоррелятора, замороженный беспорядок приводит к появлению эффективного притяжения [32]. Для простоты мы не будем учитывать его, ограничиваясь указанием на характер его влияния в конце рассмотрения.

Для получения уравнения, определяющего суперкоррелятор (5.126), следует умножить (5.121) на $\Phi(z')$ и усреднить результат по распределению $P\{\Phi\}$ в (5.109). В результате приходим к суперуравнению Дайсона

$$\mathbf{C}^{-1} = \mathbf{L} - \mathbf{\Sigma}, \quad (5.141)$$

где в рамках Φ^4 -модели (5.119) собственно энергетический супероператор $\mathbf{\Sigma}$ определен равенством

$$\Sigma(z, z') = \frac{2}{3} w^2 (1 + 6\sigma)^2 (C(z, z'))^3, \quad z \equiv \{\mathbf{r}, t, \bar{\chi}, \chi\}. \quad (5.142)$$

Здесь $w > 0$ — параметр ангармонизма, отнесенный к интенсивности шума T , и учтено условие $\int C(z, z)dz = 0$, следующее из равенств (5.129), (5.136).

В пренебрежении ангармонизмом имеем $\Sigma = 0$, и из (5.141) получаем компоненты (5.134), 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 (5.103) — (5.105). В общем случае собственно энергетическую суперфункцию следует разложить подобно суперкоррелятору (5.136):

$$\Sigma = \Sigma_+ \mathbf{A} + \Sigma_- \mathbf{B} + \Sigma \mathbf{T}. \quad (5.143)$$

Тогда с учетом (5.140) суперуравнение (5.141) сводится к компонентам

$$G_{\pm}^{-1} = [(1 - \sigma) \pm i\omega] - \Sigma_{\pm}, \quad (5.144)$$

$$S = [1 + 2\pi p^2 \delta(\omega) + \Sigma] G_+ G_-. \quad (5.145)$$

Явный вид коэффициентов разложения (5.143) задается выражением (5.142). Согласно [205], 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 (5.142) для пространственно—однородного случая получаем

$$\Sigma_{\pm}(t) = 2w^2(1 + 6\sigma)^2 S^2(t) G_{\pm}(t), \quad (5.146)$$

$$\Sigma(t) = (2/3)w^2(1 + 6\sigma)^2 S^3(t). \quad (5.147)$$

При подстановке в уравнения Дайсона (5.144), (5.145) нам понадобится частотное представление этих выражений, содержащее свертки. Эту трудность можно обойти, используя флуктуационно—диссипационную теорему [30, 205]

$$S(\omega') = \frac{2}{\omega'} \text{Im} G_{\pm}(\omega'), \quad \Sigma(\omega') = \frac{2}{\omega'} \text{Im} \Sigma_{\pm}(\omega'), \quad (5.148)$$

где фигурирует действительная частота ω' . Используя спектральное представление функции комплексной частоты ω , после интегрирования равенств (5.148) на-

ХОДИМ

$$S(t \rightarrow 0) = G_{\pm}(\omega \rightarrow 0), \quad \Sigma(t \rightarrow 0) = \Sigma_{\pm}(\omega \rightarrow 0). \quad (5.149)$$

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

$$S(t \rightarrow 0) = \chi \equiv G_{\pm}(\omega \rightarrow 0), \quad (5.150)$$

$$\Sigma_{\pm}(\omega \rightarrow 0) = \frac{2}{3}w^2(1 + 6\sigma)^2\chi^3, \quad (5.151)$$

где в равенстве (5.151) использовано выражение (5.147). В отличие от [207] здесь собственно энергетические компоненты Σ_{\pm} содержат только второй порядок ангармонизма w .

Равенства (5.144) – (5.147), (5.150), (5.151) позволяют полностью описать поведение самоорганизующейся системы. В частности, кроме упорядочения, они позволяют представить эффекты потери эргодичности и появления памяти. Последние проявляются в удлинении корреляторов ¹⁴:

$$G_{-}(\omega) = -\Delta + G_{-0}(\omega), \quad S(t) = q + S_0(t) \quad (5.152)$$

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 $\chi_0 \equiv G_{-}(\omega=0)$ ¹⁵.

Подставим удлинённые корреляторы (5.152) в выражения (5.146), (5.147). Тогда перенормированные компоненты собственно энергетической суперфункции

¹⁴Укажем на обратный знак необратимого отклика Δ по сравнению с определением для термодинамических систем, где, кроме того, упорядочение отвечает области малых значений интенсивности шума (температуры).

¹⁵При 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 (5.149) – (5.151) всем корреляторам следует приписать индекс 0 и положить $\omega=0$.

принимают вид

$$\begin{aligned}\Sigma_{\pm}(t) &= 2w^2(1+6\sigma)^2q^2(-\Delta + G_{\pm 0}(t)) + \Sigma_{\pm 0}(t), \\ \Sigma_{\pm 0}(t) &\equiv 2w^2(1+6\sigma)^2S_0(t)G_{\pm 0}(t)(2q + S_0(t));\end{aligned}\quad (5.153)$$

$$\begin{aligned}\Sigma(t) &= (2/3)w^2(1+6\sigma)^2q^2(q + 3S_0(t)) + \Sigma_0(t), \\ \Sigma_0(t) &\equiv (2/3)w^2(1+6\sigma)^2S_0^2(t)(3q + S_0(t)).\end{aligned}\quad (5.154)$$

Здесь нелинейные по корреляторам $G_{\pm 0}$, S_0 члены собраны в слагаемых $\Sigma_{\pm 0}$, Σ_0 , во втором равенстве (5.153) учтена связь (5.150), а в (5.154) 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 (5.152), (5.154) в уравнение Дайсона (5.145), получаем в ω -представлении

$$q_0 [1 - (2/3)w^2(1+6\sigma)^2\chi_0^2q_0^2] = p^2\chi_0^2, \quad (5.155)$$

$$S_0 = \frac{(1 + \Sigma_0)G_+G_-}{1 - 2w^2(1+6\sigma)^2q^2G_+G_-}. \quad (5.156)$$

Первое из этих уравнений обусловлено включением памяти, которая приводит к δ -образному вкладу при $\omega = 0$, второе отвечает конечным частотам $\omega \neq 0$. При $\omega \rightarrow 0$ характерная комбинация $G_+G_- = \chi_0^2$, и полюс структурного фактора (5.156)

$$2w^2(1+6\sigma^c)^2q_0^2 = \chi_0^{-2} \quad (5.157)$$

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

Подставим теперь фурье-образ выражения (5.153) в уравнение (5.144). Тогда, используя для $\Sigma_{\pm 0}(\omega)$ равенство (5.151), в гидродинамическом пределе $\omega \rightarrow 0$ получаем уравнение для запаздывающей функции Грина

$$G_-^{-1} + 2w^2(1+6\sigma)^2q^2G_- = [(1-\sigma) - i\omega] - 2w^2(1+6\sigma)^2\chi^2(q + \chi/3), \quad (5.158)$$

где учтена связь (5.150). Отсюда для микроскопической восприимчивости $\chi \equiv G_-(\omega \rightarrow 0)$ следует

$$1 - (1 - \sigma)\chi + (2/3)w^2(1+6\sigma)^2\chi [(\chi + q)^3 - q^3] = 0. \quad (5.159)$$

Уравнения (5.155), (5.157), (5.159) 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 (5.155), (5.157) определяют макроскопические величины q_0 , χ_0 , а уравнение (5.159) — 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 (5.138), и параметр термического беспорядка $\sigma \equiv S_e/S_c$.

Комбинируя равенства (5.155), (5.157), находим выражение для макроскопического параметра памяти

$$q_0 = (3/4)^{1/3}(1 + 6\sigma^c)^{-2/3}(p/w)^{2/3}, \quad (5.160)$$

который монотонно возрастает с увеличением p . Подстановка (5.160) в (5.157) дает макроскопическую восприимчивость

$$\chi_0 = 2^{1/6}3^{-1/3}w^{-1/3}(1 + 6\sigma^c)^{-1/3}p^{-2/3}, \quad (5.161)$$

спадающую с ростом p .

Задавая микроскопический параметр памяти в уравнении (5.159) выражением (ср. с (5.160))

$$q = (3/4)^{1/3}(1 + 6\sigma)^{-2/3}(p^c/w)^{2/3}, \quad (5.162)$$

находим микроскопические значения q , χ в зависимости от σ (рис. 5.6, 5.7). Характерная особенность этих зависимостей состоит в двузначности функций $q(\sigma)$, $\chi(\sigma)$ при малом термическом беспорядке. Поскольку с приближением к точке по-

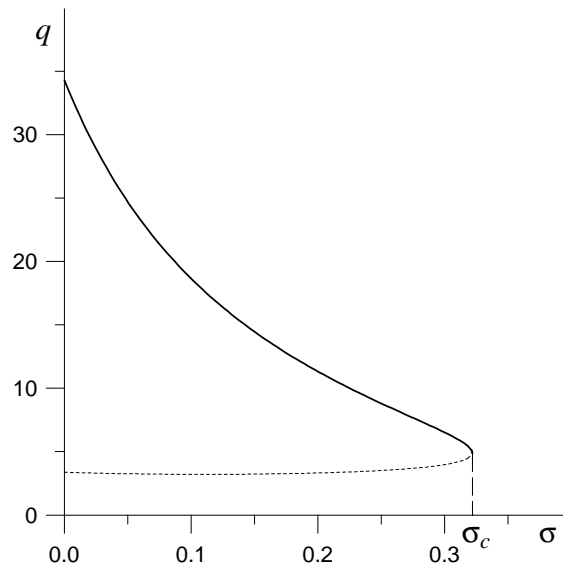


Рис. 5.6. Зависимость микроскопического параметра памяти q от интенсивности термического беспорядка σ при параметре ангармонизма $w = 0.01$ (пунктирная линия отвечает неустойчивому состоянию, σ_c — точка упорядочения)

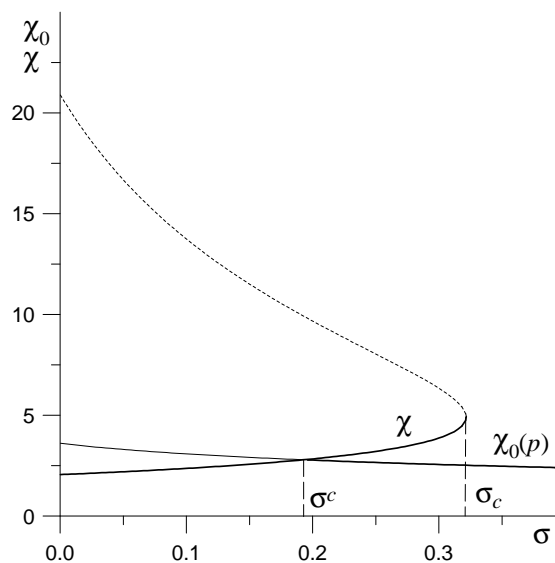


Рис. 5.7. Зависимость микроскопической χ и макроскопической χ_0 восприимчивостей от интенсивности термического беспорядка σ при параметре ангармонизма $w = 0.01$ (пунктирная и тонкая сплошная линии отвечают неустойчивому состоянию, жирная — устойчивому; σ^c — точка потери эргодичности, σ_c — точка упорядочения)

тери устойчивости восприимчивость должна возрастать, то значения q , χ , показанные на рис. 5.6, 5.7 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

$$3A + (A+1)^3 = 1 + 2(1-\sigma^c)p^{-2}, \quad A \equiv 2^{5/6}3^{-2/3}(1+6\sigma^c)^{1/3}w^{1/3}p^{-4/3}, \quad (5.163)$$

получающимся из условия $\chi = \chi_0$ с учетом равенств (5.159) – (5.162). Как видно из рис. 5.7, 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. 5.8. Видно, что положение границы σ_c неупорядоченного со-

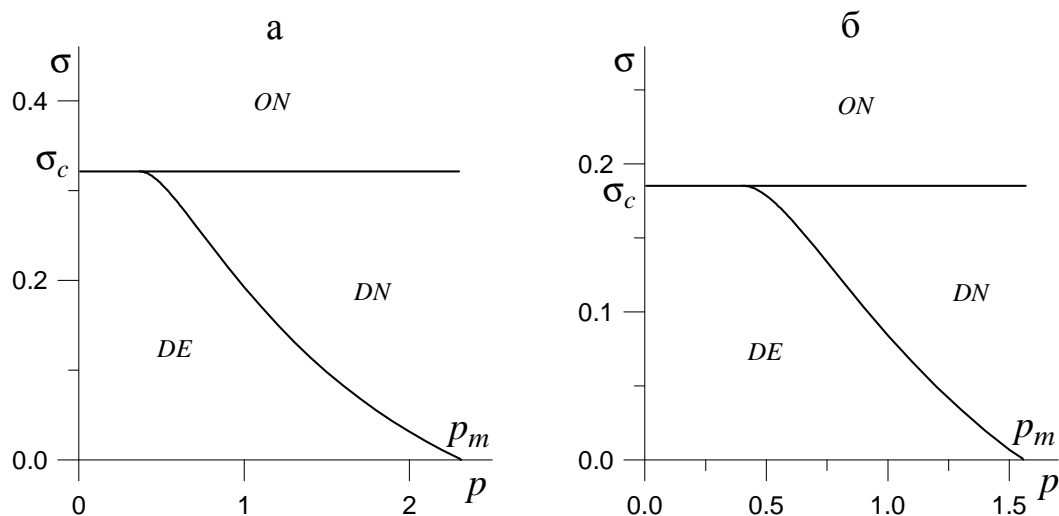


Рис. 5.8. Фазовая диаграмма: а — при $w = 0.01$; б — при $w = 0.02$ (O — упорядоченная фаза, D — разупорядоченная, E — эргодическая, N — неэргодическая)

стояния, отвечающего малым значениям σ , не зависит от p , а ширина σ^c эргодической области уменьшается с ростом замороженного беспорядка. Сравнивая рис. 5.8а и 5.8б, видим, что поведение самоорганизующейся системы весьма чувствительно к выбору параметра ангармонизма w , рост которого уменьшает области неупорядоченной и эргодической фаз. На рис. 5.9 приведена соответствующая

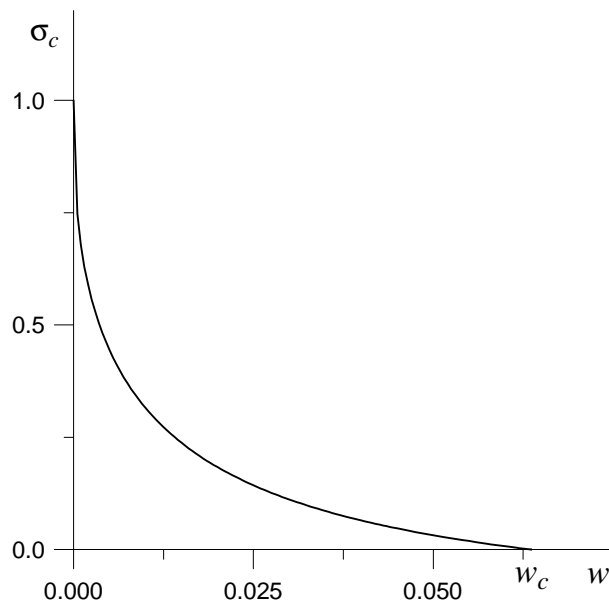


Рис. 5.9. Зависимость интенсивности термического беспорядка σ_c , отвечающей точке упорядочения, от параметра ангармонизма w

зависимость $\sigma_c(w)$ для параметра термического беспорядка, отвечающего упорядочению. При $w = 0$ реализуется максимальное значение $\sigma_c = 1$, рост w приведет 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. 5.10. 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 [32], включение эффективного притяжения, обусловленного замороженным беспорядком, приводит к расширению областей упорядочения и потери эргодичности.

Значение параметра неэргодичности определяется решением уравнений (5.159) – (5.162). При постоянной интенсивности замороженного беспорядка p (рис. 5.11а) возможны три режима. При малых p макроскопическая восприимчивость χ_0 для любых значений σ превышает микроскопическую величину $\chi(\sigma)$ (см. рис. 5.7), и система всегда находится в эргодическом состоянии. С достижением значений p , превышающих порог p_c , отвечающий условию $\chi_0(p_c) = \chi(\sigma^c)$, пара-

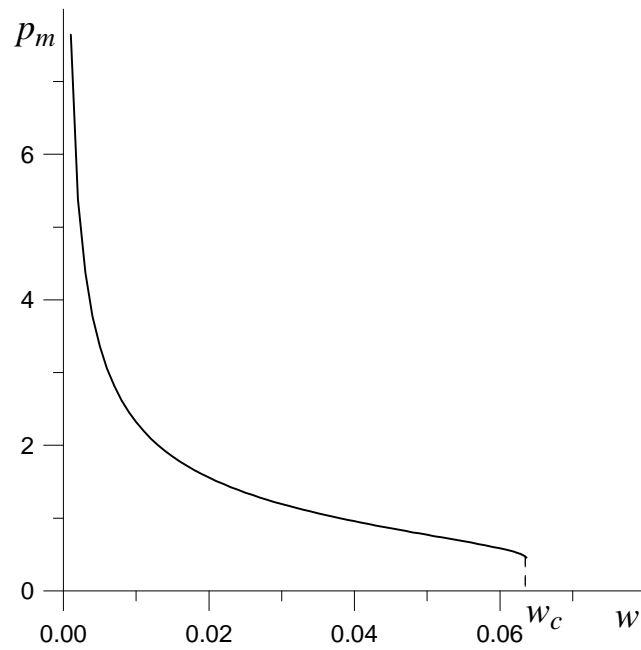


Рис. 5.10. Зависимость максимальной интенсивности p_m замороженного беспорядка на границе эргодической области от параметра ангармонизма w

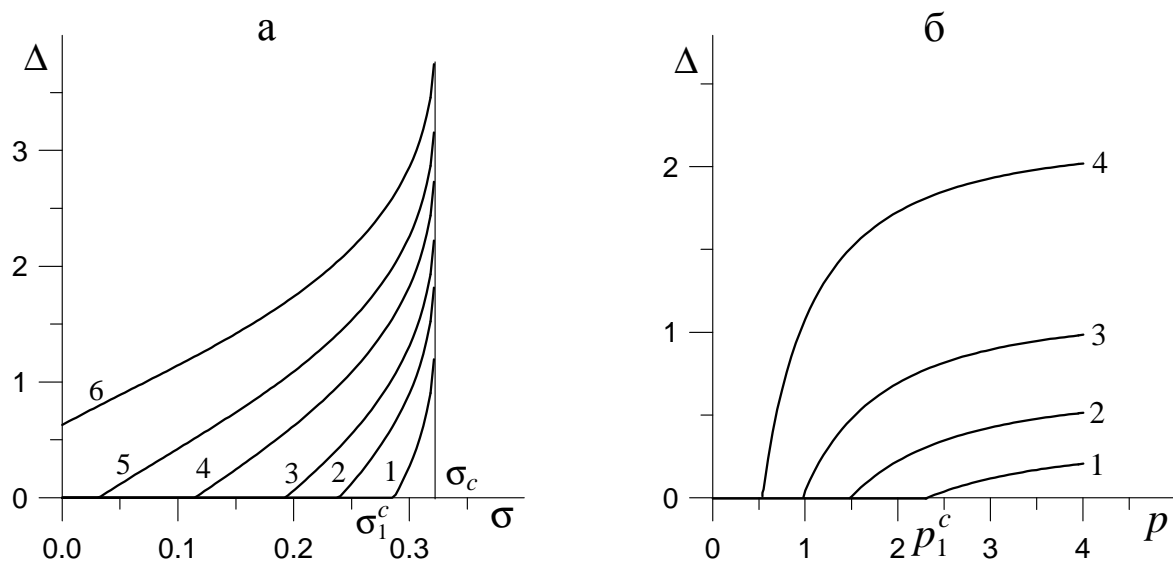


Рис. 5.11. Зависимость параметра неэргодичности Δ : а — от интенсивности термического беспорядка σ (кривые 1 — 6 отвечают $p = 0.6; 0.8; 1.0; 1.4; 2.0; 4.0$ соответственно); б — от интенсивности замороженного беспорядка p (кривые 1 — 4 отвечают $\sigma = 0.0; 0.1; 0.2; 0.3$ соответственно). Параметр ангармонизма $w = 0.01$

метр неэргодичности $\Delta = \chi - \chi_0$ принимает ненулевые значения только в области $\sigma > \sigma^c$. Начиная со значения p_m , 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. 5.11б) 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 (5.159) $0 < \sigma - \sigma^c \ll \sigma^c$, $\chi = \chi_0 + \Delta$, $\Delta \ll \chi$, в первом порядке по малым величинам $(\sigma - \sigma^c)/\sigma^c$, Δ/χ с учетом (5.161) находим

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

$$B \equiv \left[2 + \frac{2\chi_0}{q_0} + \left(\frac{\chi_0}{q_0} \right)^2 \right] \left[(1 - \sigma^c) - \frac{2}{\chi_0} - \frac{3}{q_0} - \frac{4\chi_0}{3q_0^2} \right]^{-2}. \quad (5.164)$$

Значение коэффициента $B(p)$ расходится в точке, отвечающей расходимости производной $d\chi/d\sigma$ при $\sigma = \sigma_c$ (см. рис. 5.7). При фиксированной величине термического беспорядка следует провести разложение по $q_0^c - q_0$ в равенстве (5.161). Тогда с учетом зависимости (5.160) в линейном приближении получаем

$$\Delta = q_0^c \left[(p/p^c)^{2/3} - 1 \right], \quad (5.165)$$

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

5.4. Синергетическое представление фазовых переходов с комплексным параметром порядка и между режимами транспортного потока

5.4.1. Переход второго рода с комплексным параметром порядка

В последнее время заметно возрос интерес к кинетике фазовых переходов, в частности, описываемых комплексным параметром порядка (см. [208, 209] и имеющиеся там ссылки). Очевидно, что для изучения особенностей кинетики фазового перехода с комплексным параметром порядка перспективным представляется использование комплексной модели Лоренца. Согласно действительной синергетической системе Лоренца, фазовый переход реализуется в результате взаимно согласованного поведения трех степеней свободы: параметра порядка $\eta(t)$, сопряженного поля $h(t)$ и управляющего параметра $S(t)$ [1, 34]. Однако в ряде случаев, использование этой схемы не представляется возможным, поскольку величины η и h являются комплексными, и учитывается частота их изменения. В частности, такая ситуация реализуется при описании генерации когерентного излучения в лазере, двухслойной модели бароклинической неустойчивости, а также бистабильной оптической системы двух уровней атомов. Очевидно данный пробел можно восполнить, используя комплексные уравнения Лоренца, в которых η и h имеют комплексный вид. Таким образом, задача этого пункта состоит в исследовании возможных сценариев течения фазового перехода второго рода в рамках комплексной модели Лоренца [68]. При этом отдельный интерес представляет изучение влияния величины разности частот изменения параметра порядка и сопряженного поля на кинетику фазового превращения.

Система комплексных уравнений Лоренца имеет вид [206]:

$$\dot{\eta} = -(\tau_{\eta}^{-1} + i\omega_{\eta})\eta - igh, \quad (5.166)$$

$$\dot{h} = -(\tau_h^{-1} + i\omega_h)h + ig\eta S, \quad (5.167)$$

$$\dot{S} = (S_e - S)/\tau_S - 4g\text{Im}(h\bar{\eta}), \quad (5.168)$$

где точка означает дифференцирование по времени t ;

η и h — комплексные параметр порядка и сопряженное поле соответственно;

S — управляющий параметр;

ω_η, ω_h ($\tau_\eta, \tau_h, \tau_S$) — частоты (времена релаксации) соответствующих величин;

S_e — параметр внешнего воздействия;

g — положительная константа связи.

Первые слагаемые описывают релаксацию системы к стационарным значениям $\eta = 0, h = 0, S = S_e$ и колебания величин η, h , вторые — связь между различными гидродинамическими модами. Отрицательный знак перед нелинейным слагаемым (5.168) отражает отмеченную выше отрицательную обратную связь параметра порядка и сопряженного поля с управляющим параметром, плюс перед ηS в (5.167) — положительную обратную связь η и S с h , являющуюся причиной самоорганизации.

Система (5.166) — (5.168) сводится к уравнениям типа Максвелла—Блоха и получена в полуклассическом приближении для описания генерации излучения в одномодовом лазере. Для данного случая η — безразмерная комплексная амплитуда моды электромагнитного поля, $\omega_\eta(\tau_\eta^{-1})$ — частота (константа релаксации) моды; h — безразмерная поляризация (недиагональный элемент матрицы плотности); S — инверсия населенностей атомных уровней; ω_h — частота атомных переходов; S_e — параметр, характеризующий интенсивность накачки; g — константа связи между частицами и полем; $\tau_h^{-1}(\tau_S^{-1})$ — поперечная (продольная) константа релаксации.

Используя масштабы

$$\eta_m = (2g\tau_h)^{-1}, h_m = iS^0/2, S^0 = (\tau_\eta\tau_h g^2)^{-1}, \tau_h \quad (5.169)$$

для измерения параметра порядка, сопряженного поля, управляющего параметра

и времени и переходя к представлению взаимодействия, приходим к системе

$$\dot{\eta} = \sigma[-(1 + i\Delta)\eta + h], \quad (5.170)$$

$$\dot{h} = -(1 - i\Delta + i\rho)h + (r + i\rho)\eta + \eta S, \quad (5.171)$$

$$\dot{S} = -b^{-1}S - \text{Re}(\eta\bar{h}). \quad (5.172)$$

Здесь проведена замена $S - r$ на S , введены параметры

$$\sigma = \tau_h/\tau_\eta, \quad b = \tau_S/\tau_h, \quad r = S_e/S^0, \quad \rho > 0, \quad (5.173)$$

и величина

$$\Delta = (\omega_\eta - \omega_h)/(\tau_\eta^{-1} + \tau_h^{-1}) \quad (5.174)$$

представляет расстройку частоты [209]. Поскольку $\eta(t)$ и $h(t)$ комплексные функции ($\eta = \eta_1 + i\eta_2$, $h = h_1 + ih_2$), то система (5.170)–(5.172) состоит из пяти уравнений для действительных переменных η_1 , η_2 , h_1 , h_2 , S .

В адиабатическом приближении τ_h , $\tau_S \ll \tau_\eta$ получаем равенства:

$$h = \frac{b^{-1}(r + i\rho)(1 + i\Delta - i\rho)\eta + i\rho\eta|\eta|^2}{[1 + (\Delta - \rho)^2]b^{-1} + |\eta|^2}, \quad (5.175)$$

$$S = \frac{[\rho(\Delta - \rho) - r]|\eta|^2}{(1 + (\Delta - \rho)^2)b^{-1} + |\eta|^2}, \quad (5.176)$$

выражающие сопряженное поле и управляющий параметр через параметр порядка. В случае $r < \rho(\Delta - \rho)$ зависимость $S(|\eta|)$ монотонно возрастает от значения r при $|\eta| = 0$, а когда $r > \rho(\Delta - \rho)$ — имеет монотонно убывающий вид.

В области $|\eta| \ll 1$ функция $|h|(|\eta|)$ носит линейный характер, характеризуемый восприимчивостью $\chi = [1 + (\Delta - \rho)^2]^{-1/2}(r^2 + \rho^2)^{1/2}$. Эта зависимость при $\rho = 0$ имеет максимум в точке $|\eta| = \sqrt{b^{-1}(1 + \Delta^2)}$. После достижения максимума она асимптотически спадает до значения $|h| = 0$. В случае $\rho = \Delta$ вид зависимости $|h|(|\eta|)$ определяется соотношением параметров r и Δ . При $r < 3^{3/2}\Delta$ она имеет монотонно возрастающий вид. В точке $r = 3^{3/2}\Delta$ появляется плато. При $r > 3^{3/2}\Delta$ функция $|h|(|\eta|)$ возрастает на промежутке $|\eta| \in \left(0, \left[\frac{2}{\sqrt{3}}\frac{br}{\Delta} \cos\left(\frac{\alpha}{3} - \frac{2\pi}{3}\right) - b\right]^{1/2}\right)$, $\cos \alpha = -3^{3/2}\Delta/r$, а затем убывает до точки $|\eta| = \left(\frac{2}{\sqrt{3}}\frac{br}{\Delta} \cos\frac{\alpha}{3} - b\right)^{1/2}$, после чего снова монотонно возрастает.

Подставляя (5.175) в (5.170), приходим к уравнению типа Ландау–Халатникова

$$\tau \dot{\eta} = -\frac{\partial V}{\partial \bar{\eta}}, \quad \tau = \sigma^{-1}[1 + i(\Delta - \rho)]^{-1}, \quad (5.177)$$

где синергетический потенциал имеет вид

$$V = |\eta|^2 - b^{-1}[r - \rho(\Delta - \rho)] \ln\{[1 + (\Delta - \rho)^2]b^{-1} + |\eta|^2\}. \quad (5.178)$$

Если параметр S_e не больше критического значения

$$S_c = S^0[1 + \Delta(\Delta - \rho)], \quad (5.179)$$

то зависимость $V(|\eta|)$ имеет монотонно возрастающий вид с минимумом в точке $\eta^{st} = 0$. При этом сопряженное поле и управляющий параметр принимают стационарные значения $h^{st} = 0$ и $S^{st} = 0$, а система не упорядочивается, что отвечает спонтанному излучению в лазере. В закритической области $S_e > S_c$ синергетический потенциал приобретает минимум при ненулевом значении параметра порядка

$$\eta_1^{st} = b^{-1/2}[r - 1 - \Delta(\Delta - \rho)]^{1/2}, \quad \eta_2^{st} = 0. \quad (5.180)$$

Теперь стационарные значения сопряженного поля и управляющего параметра определяются равенствами:

$$h_1^{st} = \eta_1^{st}, \quad h_2^{st} = \Delta \eta_1^{st}, \quad (5.181)$$

$$S^{st} = 1 + \Delta(\Delta - \rho) - r. \quad (5.182)$$

Это означает, что при резком переходе системы в область характеризуемую значением параметра $S_e > S_c$, она за время

$$\tau_{ef} = \tau[1 + (\Delta - \rho)^2][r - 1 - \Delta(\Delta - \rho)]^{-1} \quad (5.183)$$

приобретает стационарное значение параметра порядка (5.180) (происходит когерентное излучение света — генерация в лазере). При этом зависимость $\eta(t)$ имеет обычный дебаевский вид

$$\eta = \eta_1^{st}[1 - \exp(-t/\tau_{ef})]. \quad (5.184)$$

Проведенное исследование показывает [68], что система комплексных уравнений Лоренца (5.166) – (5.168) позволяет представить основные особенности фазового перехода второго рода, характеризуемого комплексным параметром порядка. Термодинамическое описание достигается использованием зависимости $V(|\eta|)$ синергетического потенциала от величины параметра порядка. Эта зависимость имеет вид (5.178), и ее характер определяется управляющим параметром S_e : при $S_e < S_c$ имеем монотонно возрастающую зависимость $V(|\eta|)$ с минимумом в точке $\eta^{st} = 0$, а при $S_e > S_c$ минимум отвечает упорядоченной фазе, характеризуемой параметром порядка (5.180).

Подобно рассмотрению, изложенному в подразделе 2.4, кинетическая картина фазового перехода представляется фазовыми портретами и временной зависимостью пути, пройденного точкой по траектории. Фазовый портрет имеет при $S_e < S_c$ притягивающий узел D , отвечающий неупорядоченной фазе; при $S_e > S_c$ появляется дополнительный узел/фокус O , соответствующий упорядоченной фазе.

При несоизмеримости времен релаксации $\tau_\eta, \tau_h, \tau_S$ можно выделить шесть характерных режимов: а) $\tau_h \ll \tau_S \ll \tau_\eta$, б) $\tau_\eta \ll \tau_S \ll \tau_h$, в) $\tau_S \ll \tau_h \ll \tau_\eta$, г) $\tau_S \ll \tau_\eta \ll \tau_h$; д) $\tau_h \ll \tau_\eta \ll \tau_S$, е) $\tau_\eta \ll \tau_h \ll \tau_S$. Как показывает проведенный анализ, в случаях (а)–(г) по истечении короткого времени траектория системы выходит на универсальный участок ("русло большой реки") (см. подраздел 2.4) [152]. Как видно из фазовых портретов [68], "русло большой реки" расположено в параметрическом пространстве η, h, S таким образом, что при проектировании на плоскости $\text{Re } \eta - \text{Im } \eta$ и $\text{Re } h - \text{Im } h$ оно имеет вид спирали. Из фазовых портретов можно видеть, что при указанной несоизмеримости времен релаксации в режимах (а)–(г) выход на универсальный участок происходит по почти прямолинейным траекториям, практически параллельным осям, соответствующим меньшим временам релаксации. Так, в режиме (а) точка сначала очень быстро движется по прямой, параллельной оси S , со скоростью в τ_η/τ_S раз превышающей скорость последующего движения по универсальному участку. При соотношении времен релаксации, отвечающем случаям

(д), (е), система испытывает затухающие колебания в плоскостях, соответствующих двум наибольшим их значениям. Характерно, что для обоих этих случаев наибольшее значение имеет время τ_S , отвечающее управляющему параметру. При всех соотношениях времен релаксации различие частот изменения параметра порядка и сопряженного поля ($\Delta \neq 0$) приводит к возникновению осцилляционного режима поведения параметров в комплексных плоскостях этих величин.

Как известно [164, 175, 209], замечательное свойство комплексной системы Лоренца состоит в том, что она описывает появление странного (хаотического) аттрактора при росте управляющего параметра S_e выше критического значения S^c . Термином "странный аттрактор" называется сложная структура, каждая траектория которой экспоненциально неустойчива. Очевидно, что в случаях (д), (е) следует ожидать переход от затухающих колебаний в режим странного аттрактора в трехмерном ($\text{Re } \eta - \text{Re } h - S$) или пятимерном ($\text{Re } \eta - \text{Im } \eta - \text{Re } h - \text{Im } h - S$) пространстве комплексной системы Лоренца. Таким образом, этот переход возможен при выполнении условий $\tau_h \sim \tau_\eta \ll \tau_S$.

Описанные фазовые портреты могут быть использованы для прогнозирования режимов генерации излучения в одномодовом лазере, в частности, в зависимости от расстройки частоты Δ . В качестве примера такого анализа можно привести сопоставление теории [209] с результатами эксперимента с CO_2 лазером с однородно уширенной линией излучения [210], в котором удалось превысить порог S^c устойчивости равновесного состояния (5.180). Согласно [209], при малых отстройках $\Delta \approx 0$ хаотический аттрактор образуется даже при параметре $S_e \gtrsim S^c$, и с ростом Δ после каскада удвоений периода система не проявляет хаотический режим даже при $S_e \approx (10 - 20)S^c$.

5.4.2. Переход между режимами транспортного потока

В последнее время проблемы дорожного движения привлекают значительное внимание [164, 203]. Для описания коллективных характеристик транспорт-

ного потока применяется много подходов. Переход между режимами транспортного потока (свободным движением и затором машин) обнаруживается при моделировании дорожного движения и наблюдается в действительности. В частности, показано [211], что такой переход имеет свойства обычного фазового перехода жидкость—пар, где свободное и сгущенное движение автомобилей отвечает паровой и жидкой фазам соответственно. Этот переход происходит, когда плотность машин достигает критического значения. Транспортный поток с увеличенной плотностью и неустойчивой однородной частью сопровождается образованием затора на дороге. Таким образом, при данном фазовом переходе неупорядоченное состояние соответствует свободному движению автомобилей с интервалом h , а упорядоченное (двухфазное) — "пробке" на дороге, когда свободное движение машин с малой плотностью сосуществует с затором (большая плотность автомобилей).

В рамках термодинамического рассмотрения [211] переход между режимами транспортного потока представляется как фазовый переход первого рода, характер которого определяется расстоянием между машинами $\Delta x(t)$, играющим роль объема или плотности, и обратным временем задержки (временем разгона/торможения) $1/\tau$, соответствующим температуре. Для его описания используется уравнение движения n -го автомобиля:

$$dx_n/d(t + \tau) = V(\Delta x_n(t)). \quad (5.185)$$

Здесь задается оптимальная скорость $V(\Delta x_n(t))$, которая удовлетворяет следующим требованиям: во—первых, $V(\Delta x_n)$ — монотонно возрастающая функция, во—вторых, имеет верхний предел и, в—третьих, при интервале между машинами, равном критическому значению h_c , имеет точку настройки (изменения). Таким требованиям соответствует функция, которую использовал Бандо (Bando) [212]:

$$V(\Delta x) = (v_{max}/2)\{\text{th}(\Delta x - h_c) + \text{th}(h_c)\}. \quad (5.186)$$

Получено уравнение Гинзбурга—Ландау—Халатникова для данной модели. Доказано, что линия сосуществования фаз и линия спинодали, а также критиче-

ская точка описывается производными от термодинамического потенциала таким же образом, как и для обычных фазовых переходов и критических явлений. Подобно фазовому переходу первого рода, метастабильная область находится между линиями сосуществования фаз и спинодали.

В ходе исследования данной модели получено условие устойчивости, согласно которому при появлении малого возмущения в однородном потоке автомобилей он остается стабильным, если обратное время задержки удовлетворяет неравенству

$$1/\tau > 2V'(h), \quad (5.187)$$

где $V'(h) = dV(\Delta x_n) / d\Delta x_n |_{\Delta x_n=h}$.

Цель данного пункта состоит в самосогласованном аналитическом описании перехода типа транспортной "пробки" в результате самоорганизации системы. Для этого используется синергетическая концепция фазового перехода, который реализуется в результате взаимно согласованного поведения трех степеней свободы: параметра порядка, сопряженного поля и управляющего параметра.

Для простейшей модели следующих друг за другом автомобилей величины

$$\eta \equiv \Delta x - h, \quad v \equiv \Delta \dot{x} - h/t_0 + v_0 \quad (5.188)$$

отклонений интервала между машинами и скорости его изменения от соответствующих оптимальных значений h и $h/t_0 - v_0$ (t_0 — характерный временной интервал) играют роль параметра порядка и сопряженного поля соответственно. Таким образом, наш подход означает, что поведение транспортного потока параметризуется величинами η , v и временем разгона/торможения τ , которое сводится к управляющему параметру. Пусть указанные величины являются диссипативными и их релаксация к равновесным значениям описывается уравнением Дебая. Основой синергетического подхода является то обстоятельство, что положительная обратная связь переменных η и τ с v может привести к самоорганизации системы, которая является причиной перехода между режимами транспортного потока. С другой стороны, чтобы обеспечить стабильность системы введем отрицательную обра-

тную связь η и v с τ . Полученные в результате уравнения формально совпадают с системой Лоренца в безразмерном виде (5.11) – (5.13) [1, 34], где горизонтальная и вертикальная компоненты скорости песка u и v сводятся к отклонениям интервала между машинами η и скорости его изменения v от соответствующих оптимальных значений, а наклон поверхности S — к времени разгона/торможения τ .

Уравнения (5.11) – (5.13) представляют основу самосогласованного описания модели следующих друг за другом автомобилей. Отличительной особенностью этой системы является то обстоятельство, что в (5.12), (5.13) входят нелинейные слагаемые с различными знаками, в то время как уравнение (5.11) — линейное. Последнее обусловлено тем, что отклонение скорости v есть производная отклонения интервала η по времени. В стационарном состоянии $\dot{\eta} = 0$ решение (5.11) определяет обычную линейную связь $\eta = v$, так как отклонение интервала между машинами пропорционально скорости его изменения. Второе слагаемое в правой части (5.12) описывает положительную обратную связь отклонения интервала и времени разгона/торможения с отклонением скорости, в результате которой увеличивается значение v , что является причиной образования транспортного затора. Кинетическое уравнение для величины τ отличается тем, что ее релаксация происходит не до нуля, а до конечного значения τ_e , которое представляет время, необходимое машине для достижения характерной скорости (характеристика автомобиля). Знак минус перед последним слагаемым в правой части уравнения (5.13) можно рассматривать как проявление принципа Ле–Шателье, поскольку уменьшение времени разгона/торможения τ приводит к образованию устойчивого течения машин. При этом рост величин η и v препятствует возрастанию τ и, как следствие, формированию дорожной "пробки".

Покажем далее, что для объяснения релаксационного перехода к транспортному затору достаточно использовать адиабатическое приближение, в рамках которого следует положить времена релаксации отклонения скорости и времени разгона/торможения $t_v = 0, t_\tau = 0$. В связи с этим будем исходить не из уравнений

(5.12), (5.13), а из более простых выражений

$$v = \eta\tau, \quad \tau = \tau_e - \eta v, \quad (5.189)$$

получающихся в стационарном случае $\dot{v} = 0$, $\dot{\tau} = 0$ из (5.12), (5.13) соответственно. Равенства (5.189) имеют ясный физический смысл: увеличение отклонения интервала η и времени разгона/торможения τ приводит к росту отклонения скорости v , в то время как увеличение отклонений интервала между машинами η и скорости v обуславливает уменьшение времени разгона/торможения τ по сравнению с характерным временем при отсутствии нарушения транспортного потока.

Как описано в пункте 5.1.1, при $\tau_e < 1$ зависимость эффективного потенциала E от η (5.16) в уравнении Ландау–Халатникова (5.15) является монотонно возрастающей и имеет единственное стационарное значение $\eta = 0$, т.е. в этом случае интервал между машинами постоянен. Если параметр τ_e превышает критическое значение $\tau_e = 1$, на зависимости $E(\eta)$ появляется минимум, отвечающий ненулевому стационарному значению отклонения интервала $\eta_e = (\tau_e - 1)^{1/2}$, и соответствующее значение времени разгона/торможения $\tau_0 = 1$. Изложенный выше случай представляет суперкритический режим образования затора транспорта и соответствует фазовому переходу второго рода, что легко видеть из разложения эффективного потенциала в ряд по степеням $\eta^2 \ll 1$.

Недостаток проведенного рассмотрения состоит в том, что он не учитывает субкритический режим самоорганизации, который является причиной появления транспортного затора и аналогичен фазовому переходу первого, а не второго рода. Таким образом, необходимо преобразовать изложенный выше подход, принимая, что время релаксации отклонения интервала t_η возрастает с увеличением η и определяется простейшей аппроксимацией (5.17) [34]. Тогда поведение стационарных величин η_0 , η^m и τ_0 в зависимости от τ_e аналогично представленному на рис. 2.3, 2.4, где под напряжением σ и температурой T_e следует понимать отклонение интервала η и время τ_e соответственно.

Согласно представленной выше картине, образование транспортного затора

характеризуется хорошо выраженным гистерезисом [164]. Первоначально автомобили движутся с оптимальным интервалом, отклонение от которого наблюдается в том случае, если характерное время разгона/торможения машины τ_e превышает предельное значение (5.20), тогда как время τ_e^0 (5.23), необходимое для установления однородного потока машин меньше, чем τ_e . Рассматривая поведение системы при условии $t_\tau/t_\eta \rightarrow 0$, видно, что петля гистерезиса сужается с ростом параметра адиабатичности $\delta = t_\tau/t_\eta$. Адиабатическое приближение предполагает, что вместе со значением δ , мало также отношение $t_v/t_\eta \equiv \epsilon$. Последнее представляется не реальным для рассматриваемых систем, поскольку в общем случае $t_v \approx t_\eta$. Следовательно, определенный интерес имеет рассмотрение влияния конечного значения ϵ на полученные результаты. Анализ, проведенный в заключение пункта 5.1.1, позволяет сделать вывод, что конечность ϵ не влияет качественно на полученные выше результаты для адиабатического приближения.

Согласно проведенному рассмотрению, диссипативная динамика транспортного потока для однородной модели следующих друг за другом автомобилей может быть представлена в рамках схемы Лоренца. При этом отклонения интервала между машинами и скорости его изменения η и v играют роль параметра порядка и сопряженного поля соответственно, а время разгона/торможения τ сводится к управляющему параметру. Исследование показало, что затор транспорта на дороге образуется, если характерное время автомобиля τ_e больше критического значения τ_c . Поэтому к данному переходу предрасположены системы с малым временем релаксации t_τ и большими величинами t_v и t_η . Согласно подразделу 2.4, в противоположном случае $t_\tau \gtrsim t_\eta, t_v$, система ведет себя колебательным или стохастическим образом [34].

Отметим, что изложенная выше синергетическая схема позволяет объяснить коллективное явление образования затора транспорта, т.е. задачу многих тел (машин) $N \rightarrow \infty$. В связи с этим возникает вопрос: почему именно три переменные (отклонения интервала и скорости η и v , а также время разгона/торможения τ) дают возможность описать нетривиальное поведение большого количества тел (ма-

шин) $N \rightarrow \infty$? Ответ на данный вопрос предоставляет теорема Рюэля и Такенса: нетривиальное коллективное поведение системы многих тел (типа странного аттрактора) может быть представлено только в том случае, когда число переменных не менее трех [1]. Простейшее объяснение этого факта следующее: первая из степеней свободы интерпретируется как путь вдоль фазовой траектории, вторая соответствует отрицательному показателю Ляпунова, обеспечивающему притяжение к этой траектории, третья описывает отталкивание. В нашем случае процесса самоорганизации, вторая v и третья τ степени свободы обеспечивают положительную и отрицательную обратные связи в уравнениях (5.12), (5.13).

5.5. Выводы

1. Проведено синергетическое исследование эволюции стохастической системы, которая протекает самоподобным образом, в связи с чем ее функция распределения имеет степенную асимптотику. 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. Показано, что учет условия самоподобия требует дробного характера обратных связей в схеме Лоренца.

2. Исследован механизм взрывной кристаллизации в аморфных пленках. Наше рассмотрение основывается на результатах экспериментов с ультрадисперсными порошками германия. Использование модели Лоренца 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. Найдена временная зависимость

вероятности спонтанной кристаллизации в тонких пленках.

3. Поскольку поведение сильно неравновесных систем определяется как одиночными возбуждениями фермиевского типа, так и коллективными — бозевского, изложена микроскопическая теория таких систем, носящая суперсимметричный характер. Проведена микроскопическая интерпретация модели Лоренца. Показано, что она отвечает простейшему выбору гамильтониана бозон—фермионной системы фрелиховского типа. Представлен суперсимметричный лагранжев формализм, позволяющий воспроизвести уравнения подобные по математической структуре системе Лоренца, в которых роль управляющего параметра играет энтропия. Использование корреляционной техники 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, неупорядоченной, эргодической и неэргодической фаз.

4. Проведенное исследование показывает, что система комплексных уравнений Лоренца (5.166) — (5.168) позволяет представить основные особенности фазового перехода второго рода, характеризуемого комплексным параметром порядка. Термодинамическое описание достигается использованием зависимости синергетического потенциала от величины параметра порядка. Кинетическая картина фазового перехода представляется фазовыми портретами, на которых обнаружен универсальный участок.

5. Согласно проведенному рассмотрению, диссипативная динамика транспортного потока для однородной модели следующих друг за другом автомобилей может быть представлена в рамках схемы Лоренца. Исследование показало, что затор транспорта на дороге образуется, если время, необходимое машине для достижения характерной скорости, больше критического значения. Поэтому к данному переходу предрасположены системы с малым временем релаксации време-

ни разгона/торможения и большими временами релаксации отклонения интервала между машинами и скорости его изменения от соответствующих оптимальных значений.

Результаты, представленные в данном разделе, опубликованы в работах [33, 49, 64–70]. Личный вклад соискателя в соответствующих работах состоит в следующем: [64, 65] — принимал участие в обсуждении и интерпретации экспериментальных результатов, определении условий взрывной кристаллизации и представлении ее как режима СОК; [66, 67] — принимал участие в построении суперсимметричного лагранжевого формализма и корреляционной техники для описания самоорганизующейся системы; [69] — провел исследование зависимостей стационарных значений основных параметров в случае фазовых переходов первого и второго родов, построил фазовые портреты системы; [70] — выполнил анализ основных уравнений эволюции, провел исследование влияния зависимости времени релаксации параметра порядка от его величины на исследуемый фазовый переход.

РАЗДЕЛ 6

ТЕОРИЯ ПОВЫШЕННОЙ ПЛАСТИЧНОСТИ НАНО– И СУБМИКРОКРИСТАЛЛОВ

6.1. Анализ экспериментальных данных

В последнее время получен и активно исследуется новый класс металлических материалов с СМК–структурой (см. [121, 124, 128] и имеющиеся там ссылки). В отличие от НК с размером зерна 10–100 нм они не обладают пористостью и имеют зерно 0.1–1 мкм. Как правило, столь малый размер достигается в результате больших пластических деформаций с последующей фиксацией начальных стадий рекристаллизации. В сравнении с обычными поликристаллами как НК, так и СМК характеризуются пониженными значениями температуры Дебая и упругих постоянных, аномально большими величинами коэффициента диффузии, низкотемпературной сверхпластичностью и т.д. Принципиально важная особенность этих систем состоит в наличии аномальной пограничной области, которая окружает межкристаллитные границы [107, 126, 128, 213]. Если последние имеют обычную толщину порядка межатомного расстояния, то указанная область простирается на несколько десятков ангстрем, и в этом смысле можно говорить о зернограничной фазе [124, 213]. Хотя ее кристаллическое строение не отличается от обычного, атомы зернограничной фазы обладают "более высокой динамической активностью" (см. [71, 124] и ниже), с чем собственно и связаны аномальные свойства НК и СМК. Природа этих свойств до настоящего времени остается не понятой.

На рис. 6.1 показана микроструктура и дифракционные картины сплава Al–4% Cu–0.5% Zr с размером зерна ~ 0.2 мкм. В исходном сильно деформированном состоянии (степень логарифмической деформации $\varepsilon = 6$) отчетливо видны контуры экстинкции внутри зерен, указывающие на значительные упругие напряжения вблизи границ зерен (рис. 6.1a). Кроме того, в исходном состоянии отсутствует полосчатый контраст, присущий электронно–микроскопическим фотогра-

фиям в темном поле (ТЭМ). Он появляется, если образец подвергнуть двухчасовому отжигу при 413 К (рис. 6.1б). При этом также исчезают экстинкционные контуры, и возникают отчетливые кикучи—линии на дифракционной картине, полученной с отдельного зерна.

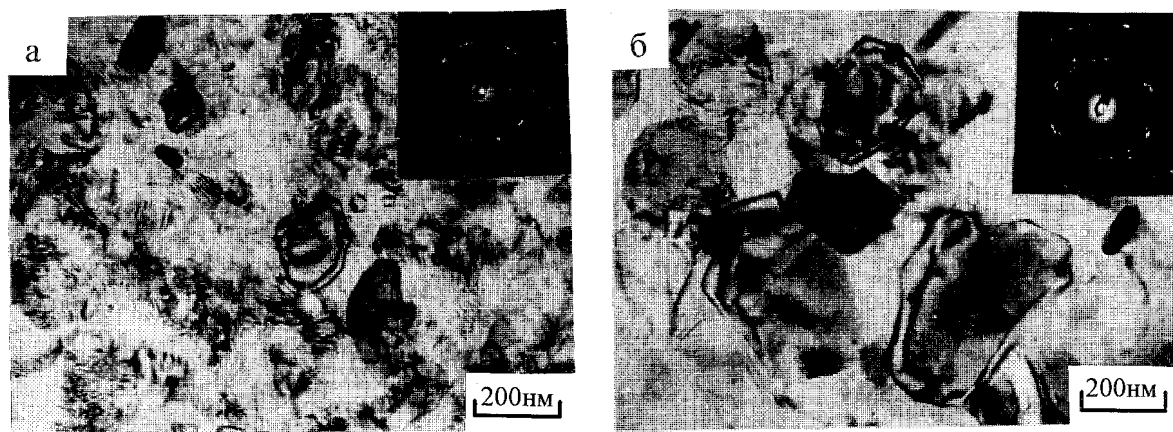


Рис. 6.1. Микроструктура, наблюдаемая в ТЭМ, и дифракционные картины сплава Al–4% Cu–0.5% Zr: а — после деформации $\varepsilon = 6$ при комнатной температуре; б — после той же деформации и отжига при 413 К в течение 2ч [124]

Отсутствие характерного полосчатого контраста на микрофотографии деформированного образца (рис. 6.1а) свидетельствует о том, что его исходное состояние принципиально отличается от отожженного. Наличие упругих напряжений в деформированном состоянии и появление кикучи—линий в отожженном указывают на сильно неравновесный характер первого. Поскольку в исследуемом образце отсутствуют дислокации и другие дефекты, то можно заключить, что неравновесность системы обусловлена состоянием самой границы зерна. Этот вывод подтверждается данными по исследованию температуры Дебая Θ , полученной из температурной зависимости мессбауэровских спектров [124]. Оказалось, что в исходном состоянии значение Θ на $\sim 10\%$ меньше, чем в равновесном. Учитывая связь $u \propto \Theta^{-1}$ температуры Дебая Θ со среднеквадратичным смещением атомов u [214], приходим к выводу, что в деформированном состоянии атомы обладают большей амплитудой колебаний. Очевидно, что такое повышение динамической активности

атомов обусловлено сильной неравновесностью системы.

Принципиально важными оказываются результаты мессбауэровских исследований, выполненных на чистом железе при комнатной температуре [213]. Как видно из рис. 6.2 и табл. 6.1, мессбауэровские спектры представляют суперпозицию составляющих 1 и 2, существенно различающихся параметрами электрической и магнитной сверхтонкой структуры. Это свидетельствует о наличии двух различных

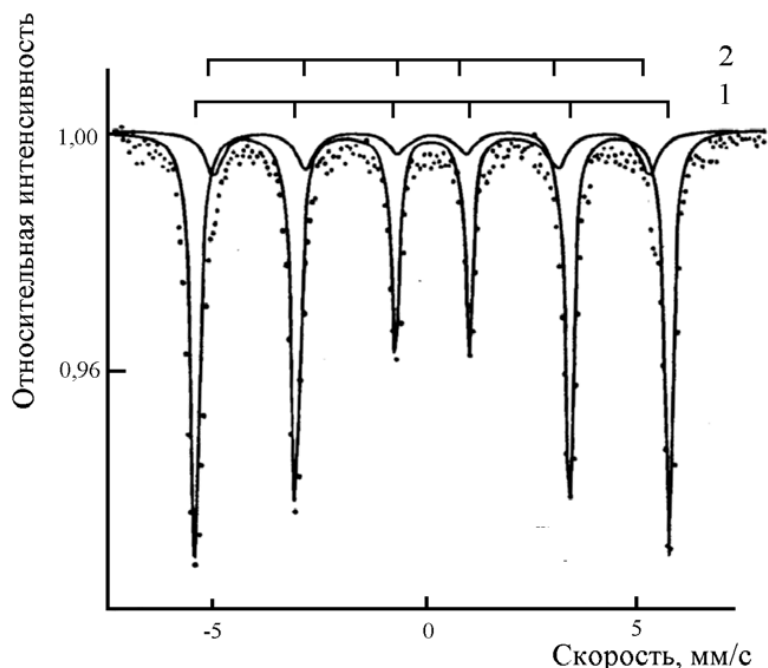


Рис. 6.2. Мессбауэровский спектр (изотоп ^{57}Co в Cr) СМК–железа (размер зерна 0.22 мкм) при комнатной температуре. Точки отвечают экспериментальным данным, линии — разложению на составляющие [213]

состояний атомов железа. Параметры более интенсивной составляющей 1 практически совпадают с параметрами крупнозернистого α -Fe. Наличие составляющей 2, очевидно, связано с возбужденным состоянием атомов вблизи границ зерен. Из таблицы видно, что при радиусе зерна $R \approx 0.06$ мкм доля таких атомов $p = (22 \pm 2)\%$. Отсюда, используя связь $p \approx 3d/R$, находим полутолщину пограничного слоя $d = (4.4 \pm 0.4)$ нм. Столь большие, по сравнению с атомным масштабом, значения $2d$ позволяют говорить не только о геометрической границе зерна, но и о наличии зернограничной фазы, расположенной в приграничном слое зерна

(рис. 6.3). Структурные исследования не обнаруживают различий в расположении атомов в исходной зеренной и зернограничной фазах [124]. Однако, как видно из предыдущего, атомы зернограничной фазы характеризуются повышенными значениями среднеквадратичного смещения, что собственно и отличает зернограничную фазу от зеренной.

Таблица 6.1

Результаты мессбауэровских исследований чистого железа

Средний размер зерен $2R$, мкм	Подспектр	Относительная интегральная интенсивность (объемная доля зернограничной фазы p отвечает подспектру 2)	Эффективное магнитное поле, кЭ	Ширина внешних пиков спектра на $1/2$ высоты, мм/с
0.12	1	0.78 ± 0.02	331 ± 5	0.32 ± 0.05
	2	0.22 ± 0.02	301 ± 5	0.32 ± 0.05
0.23	1	0.91 ± 0.02	331 ± 5	0.33 ± 0.05
	2	0.09 ± 0.02	301 ± 5	0.54 ± 0.05
0.23	1	0.87 ± 0.02	329 ± 5	0.33 ± 0.05
	2	0.13 ± 0.02	299 ± 5	0.35 ± 0.05
0.26	1	0.93 ± 0.02	331 ± 5	0.34 ± 0.05
	2	0.07 ± 0.02	299 ± 5	0.38 ± 0.05
0.65	1	0.95 ± 0.02	330 ± 5	0.30 ± 0.05
	2	0.05 ± 0.02	302 ± 5	0.40 ± 0.05

Таким образом, различия деформированного и отожженного состояний образца, проявляющиеся на рис. 6.1, обусловлены неравновесностью зерна, характеризующейся наличием зернограничной фазы. При этом следует иметь в виду, что изначальной причиной неравновесности является, по-видимому, не массив-

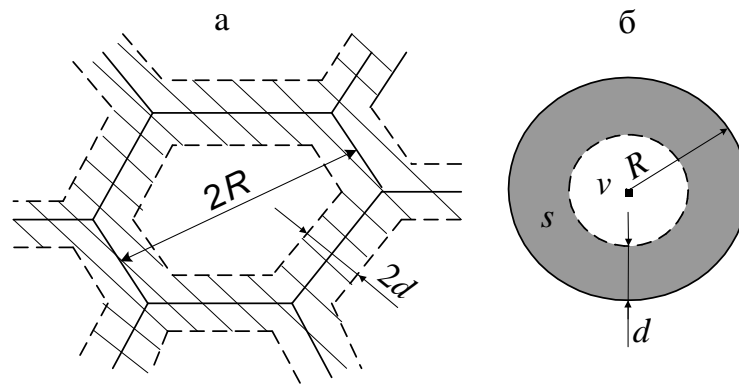


Рис. 6.3. Картина распределения фаз в НК и СМК (а) (область зернограничной фазы заштрихована) и сферическая модель распределения фаз в отдельном зерне (б)

ная зернограничная фаза, а геометрическая граница зерна. В пользу такого предположения говорит тот факт [124], что возбужденное состояние СМК достигается не сразу после холодной деформации, а лишь в результате последующего отжига, который, не меняя размер зерна, приводит к оформлению хорошо выраженных границ зерен. При этом протекают такие процессы как фрагментация, вращение зерен как целого, динамическая рекристаллизация и т.д. [107, 215]. Все они обеспечиваются интенсивным переходом решеточных дислокаций в границы зерен. В результате последняя переходит в возбужденное состояние, наличие которого приводит к дальнедействующей компоненте упругого поля: согласно [216], при удалении x от границы зерна она спадает по закону $x^{-1/2}$. Поскольку электронно-микроскопические исследования (см. рис. 6.1) указывают на локализацию поля деформации в приграничной области зернограничной фазы, то можно полагать, что последняя обеспечивает экранирование дальнедействующего поля возбужденной границы зерна на расстояниях порядка $d \leq 10$ нм.

Очевидно, такого рода неравновесное состояние должно быть отделено в фазовом пространстве от равновесного барьером конечной высоты Q . При нагреве до температур T , соизмеримых с величиной Q , должна происходить деградация системы, сопровождаемая релаксацией упругих напряжений. В самом деле, как

видно из микрофотографий на рис. 6.4, отжиг предварительно деформированного СМК–сплава Al–4% Cu–0.5% Zr при 343–353 К приводит лишь к слабому (на 20–30%) уменьшению числа экстинкционных контуров, а полосчатый контраст не проявляется вообще. Это означает, что несмотря на релаксацию 20–30% упругих напряжений граница зерна осталась при этом в неравновесном состоянии. С увеличением температуры нагрева до 363 К около трети зерен приобретают полосчатый контраст, т.е. переходят в равновесное состояние. Экстинкционные контуры, связанные с напряжениями, пропадают, однако рост зерен при этой температуре еще не происходит. Он начинается только при $T = 373$ К, когда за 30 мин достигается размер 0.17 мкм, а 80–90% зерен, приходя в равновесное состояние, приобретают полосчатый контраст.

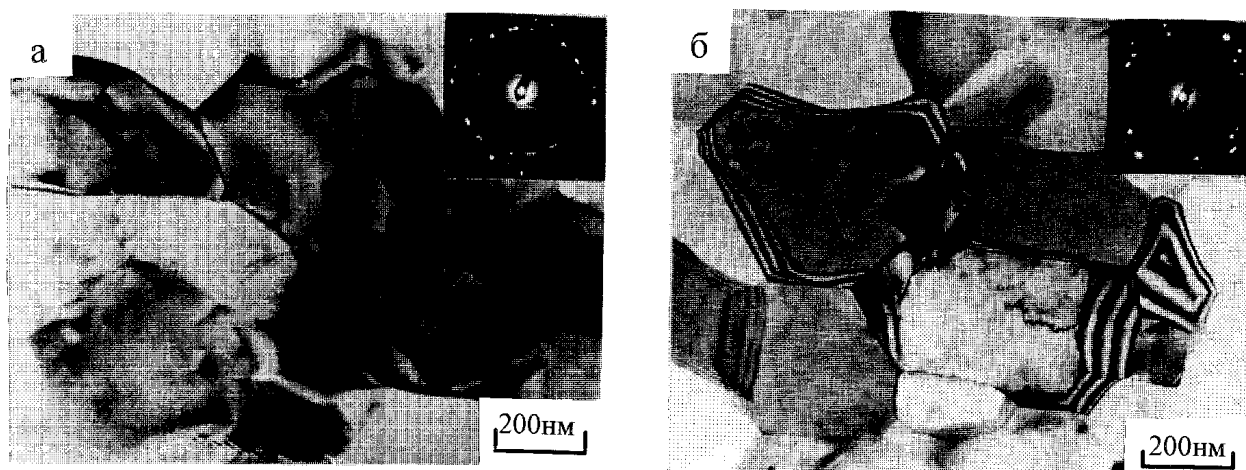


Рис. 6.4. Микроструктура и дифракционные картины сплава Al–4% Cu–0.5% Zr: а — деформация + отжиг при 353 К; б — деформация + отжиг при 363 К

Поскольку, согласно электронно–микроскопическим данным (рис. 6.1), упругие напряжения являются неотъемлемым атрибутом возбужденного состояния зерна, то принципиально важную роль играют данные об искажениях решетки, обусловленных этими напряжениями [217]. На рис. 6.5 приведены кинетические кривые, полученные в результате дилатометрических исследований сплава Al–4% Cu–0.5% Zr. Видно, что при переходе СМК в равновесное состояние наблюдается сжатие, не превышающее (при постоянном размере зерна) величи-

ны $\Delta l/l \sim 2 \cdot 10^{-4}$. Поскольку объемная доля зернограничной фазы $p \approx 3d/R$ при толщине прослоек $d \leq 10$ нм и радиусе зерен $R \sim 5 \cdot 10^2$ нм не превышает 10%, то можно заключить, что деформация δ , обусловленная переходом зернограничной фазы в равновесное состояние и связанная с дилатацией выражением $\Delta l/l = p\delta$, составляет незначительную величину $\delta \sim 10^{-3}$. По-видимому, столь малое увеличение межатомного расстояния в зернограничной фазе не может быть причиной значительных упругих искажений, приводящих к столь сильно развитому экстинкционному контуру на рис. 6.1. Действительно, высокоразрешающие электронно-микроскопические исследования [218, 219] дают деформацию решетки в зернограничной фазе не менее 3–5%, что более чем на порядок превосходит значение $\delta \sim 0.1\%$, обусловленное расширением решетки.

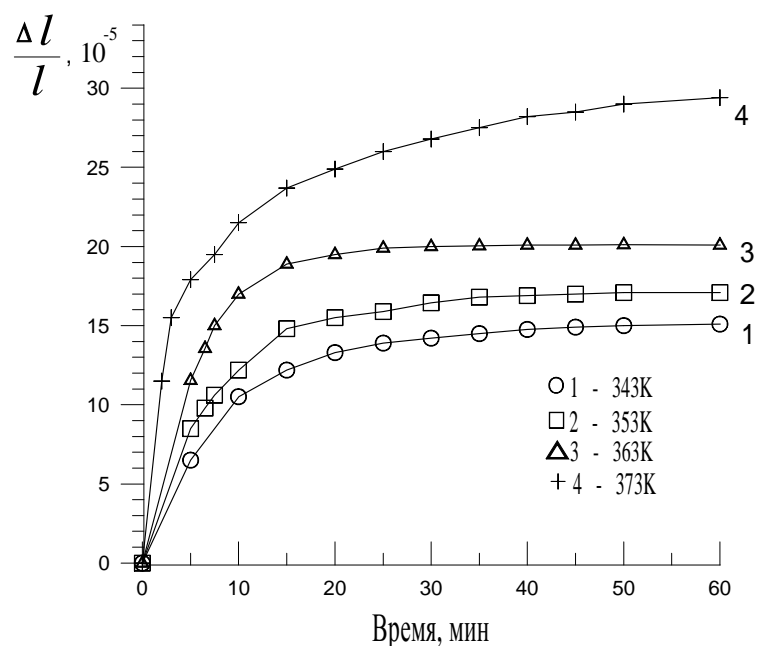


Рис. 6.5. Временная зависимость относительного сжатия СМК-образца Al–4% Cu–0.5% Zr в процессе отжига при различных температурах

Используя вид временной зависимости дилатации $\Delta l/l$ (рис. 6.5), легко оценить высоту барьера Q , разделяющего равновесное и неравновесное состояния системы. С этой целью аппроксимируем начальный участок этой зависимости дебаевской экспонентой $\exp(-t/\tau)$, где время релаксации задается соотношением Ар-

рениуса $\tau \propto \exp(Q/T)$. По углу наклона получающейся зависимости $\ln \tau(T^{-1})$ находим значение $Q = 4.3 \cdot 10^3$ К. Оно составляет около половины энергии активации процесса граничной самодиффузии в алюминии [220].

Таким образом, в результате развитой пластической деформации и предварительного отжига решеточные дислокации поглощаются границами зерен, которые переходят при этом в неравновесное состояние, характеризуемое наличием дальнедействующего упругого поля [107]. Во избежание макроскопического вклада в термодинамический потенциал, вблизи границ зерен образуется прослойка зернограничной фазы, экранирующая это поле. Устойчивость упруго-напряженной гетерофазной структуры обеспечивается наличием барьера Q , отделяющего возбужденное СМК-состояние от равновесного. Правомерность такой картины подтверждается следующим экспериментом. Если деформированный образец предварительно отжечь при 373 К в течение 30 мин и охладить до комнатной температуры, то при повторном нагреве до 363 К он не проявляет характерного дилатометрического поведения (рис. 6.5). Очевидно, это связано тем, что в ходе предварительного отжига при 373 К система преодолела барьер Q и необратимо перешла в равновесное состояние.

На существование зернограничной фазы указывает также аномальное поведение таких физических свойств, как температура Кюри T_c , намагниченность насыщения I_s , гистерезисные свойства магнетиков, теплоемкость и т.д. [124]. Так, в чистом Ni переход в СМК возбужденное состояние приводит к понижению T_c на 30–40 К, значение I_s спадает на величину $\sim 10\%$. Поскольку обе величины T_c и I_s представляют структурно-нечувствительные характеристики, то такое поведение указывает на микроскопические изменения при появлении зернограничной фазы. Действительно, как видно из дилатометрических измерений, образование зернограничной фазы приводит к росту межатомных расстояний, что обуславливает уменьшение интеграла перекрытия и, как следствие, спадание величин T_c , I_s .

Принципиально важным обстоятельством является размягчение модуля упругости СМК, происходящее при уменьшении размера зерна (рис. 6.6) [124].

Оно может быть понято, если рассматривать упругую среду как гетерофазную смесь зеренной и зернограничной фаз, первая из которых обладает обычным модулем упругости λ_v , а вторая — пониженным значением λ_s . Тогда в аддитивном приближении, отвечающем суммированию вкладов полей деформаций, среда, содержащая объемную долю p зернограничной фазы и оставшуюся часть $1 - p$ обычной зеренной фазы, характеризуется эффективным модулем упругости

$$\lambda^{-1} = (1 - p)\lambda_v^{-1} + p\lambda_s^{-1}, \quad \lambda_s < \lambda_v. \quad (6.1)$$

Оценки экспериментальных данных [124], основанные на этом приближении, дают значения λ_s , составляющие десятки процентов от обычного λ_v . Так, в НК палладии $\lambda/\lambda_v \approx 0.34$ [124]. Исследование СМК-образцов никеля в возбужденном и невозбужденном состояниях показало [126], что подобно податливости λ^{-1} в (6.1) ведет себя и намагниченность I_s .

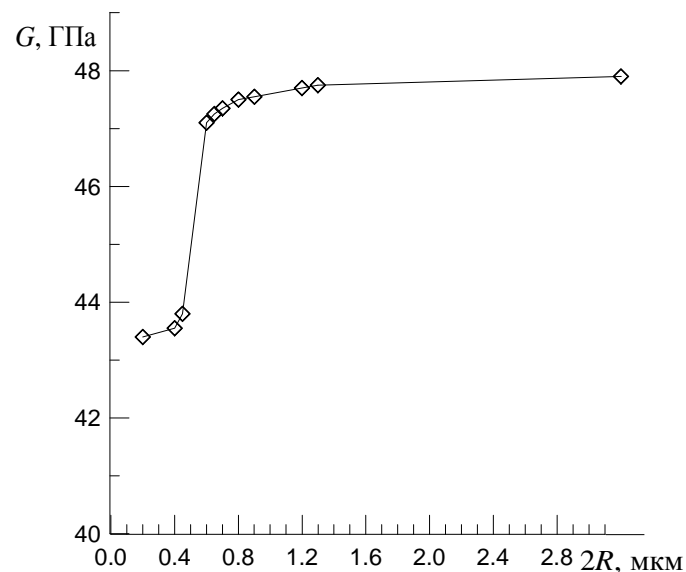


Рис. 6.6. Зависимость модуля сдвига СМК-меди от размера зерна [124]

Приведем в заключение другие данные, подтверждающие наличие зернограничной фазы в неравновесном состоянии [124]. На рис. 6.7 показаны кривые деформации магниевого сплава, обладающего СМК-структурой. Оказалось, что в возбужденном (деформированном) состоянии критическое напряжение течения σ_y

примерно на 10% выше, чем в равновесном (в сталях повышение σ_y , обусловленное возбуждением границ зерен, достигало 50%). В зависимости от радиуса зерна R величина этого напряжения аппроксимируется известной зависимостью Холла–Петча (1.3) [127]. Как видно из рис. 6.8, она резко меняет свой наклон при характерном размере зерна $2R_c \approx 0.5$ мкм. Именно при этом размере происходит и размягчение упругого модуля СМК (рис. 6.6).

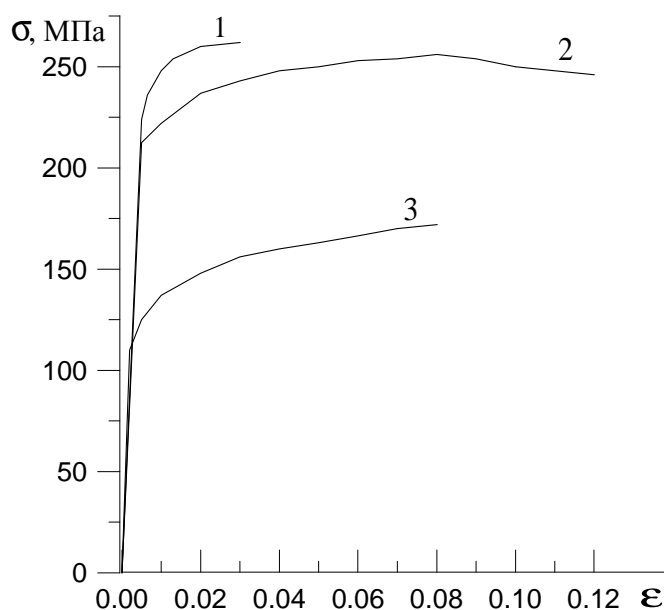


Рис. 6.7. Зависимость упругих напряжений σ от деформации ϵ СМК магниевого сплава МА8 при комнатной температуре и скорости деформации $\dot{\epsilon} = 5 \cdot 10^{-4} \text{ с}^{-1}$ (1 — возбужденная СМК-структура с размером зерна 0.3 мкм; 2 — отожженная СМК-структура с тем же размером зерна; 3 — сплав с размером зерна 10 мкм) [124]

Описанные выше эффекты еще в большей степени проявляются при переходе от СМК к НК, где уменьшение размера зерна приводит к повышению объемной доли зернограничной фазы до значений $p \leq 100\%$. Согласно [221], при этом усиливается расщепление мессбауэровского спектра, существенно понижается температура Дебая, сильнее проявляется размягчение модулей упругости. Неравновесный характер системы является причиной примерно 100-кратного повышения коэффициента D зернограничной диффузии НК [218, 221] (в СМК его кратность

понижается до нескольких десятков раз [124]). Используя соотношения Эйнштейна $D \propto \eta^{-1}$, отсюда можно заключить, что зернограничная фаза представляет жидкоподобную прослойку (с кристаллической структурой!), обладающую пониженным значением коэффициента сдвиговой вязкости η [107]. Это обуславливает, с одной стороны, сверхпластические свойства СМК и НК при пониженных температурах, а с другой — высокие демпфирующие свойства и вязкость [124, 218, 221].

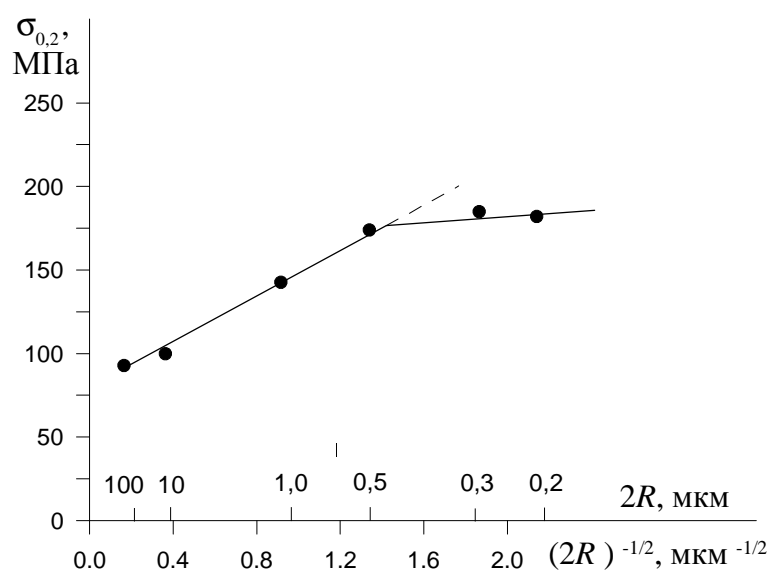


Рис. 6.8. Зависимость предела текучести $\sigma_{0,2}$ от размера зерна магниевых сплавов МА8 при комнатной температуре [124]

Проведенный анализ экспериментальных данных позволяет заключить, что аномальное поведение НК и СМК связано с ростом среднеквадратичного смещения атомов зернограничной фазы, которое, в свою очередь, обусловлено размягчением межатомных связей. Исходя из этой предпосылки, в подразделе 6.3 проводится термодинамический анализ устойчивости упруго-напряженной гетерофазной смеси, состоящей из зернограничной и обычной кристаллической фаз (распределение упругих полей такой смеси исследуется в подразделе 6.2 и приложении Б). Микроскопическая природа зернограничной фазы исследуется в подразделе 6.4 на основе концепции о перестраиваемом потенциальном рельефе [72, 222]. Показано, что подобно смешанному состоянию сверхпроводника второго рода возбужде-

ние границы зерна в НК и СМК приводит к образованию прослойки зернограничной фазы, которая экранирует дальнедействующее поле напряжений возбужденной границы зерна [71].

6.2. Распределение упругих полей

Приведенные в подразделе 6.1 экспериментальные данные показывают, что существенный вклад в термодинамику НК и СМК дают упругие напряжения. Однако, согласно дилатометрическим данным, среднее по зерну статическое изменение межатомного расстояния составляет $\delta a \leq 10^{-3}a$ и, таким образом, не может обеспечить достаточный уровень этих напряжений. Однако при более подробном рассмотрении ситуация оказывается не столь простой и требует дополнительного анализа.

Во-первых, рассмотрим поле деформации $\varepsilon_b(\mathbf{r})$, создаваемое возбужденной границей зерна [216]. Для обычной границы, моделируемой эквидистантным распределением дислокаций, упругие напряжения спадают с удалением x от нее по экспоненциальному закону $\sigma_0(x) \propto \exp(-x/w)$, где w — микроскопический масштаб, определяемый расстоянием между зернограничными дислокациями [223]. При возбуждении границ зерен за счет поглощения решеточных дислокаций происходит разброс расстояний между зернограничными, и на экспоненциальную компоненту $\sigma_0(\mathbf{r})$ накладывается стохастическая $\sigma(\mathbf{r})$ [216]. Она является знакопеременной в направлении параллельном границе зерна, так что среднее по объему $\bar{\sigma}(\mathbf{r}) = 0$. Дисперсия поля $\sigma(\mathbf{r})$ спадает при удалении x от границы зерна как $\delta/x^{1/2}$, где δ — дисперсия расстояний между граничными дислокациями. Таким образом, учитывая, что образование жидкоподобной прослойки зернограничной фазы экранирует упругое поле границы зерна на толщине d , приходим к выводу: возбуждение границы зерна приводит к появлению знакопеременного (в направлениях, параллельных границе зерна), слабо изменяющегося по толщине зернограничной фазы поля деформации $\varepsilon_b(\mathbf{r})$, среднее значение которого $\bar{\varepsilon}_b(\mathbf{r}) \approx 0$ на расстояниях $x > w$.

Кроме указанной компоненты, обусловленной возбуждением границы зерна, имеются две другие, связанные с появлением зернограничной фазы (согласно подразделу 6.1, последнее проявляется в размягчении упругих модулей и уменьшении температуры Дебая). С микроскопической точки зрения такое поведение объясняется изменением атомного потенциального рельефа $U(\mathbf{r})$ (рис. 6.9). Действительно, поскольку упругий модуль λ и кривизна параболы $U = cr^2/2$, сводящаяся к жесткости пружинки c , моделирующей межатомную связь, связаны равенством $c = \lambda a$, a — межатомное расстояние, то размягчение упругого модуля λ означает уменьшение кривизны зависимости $U(\mathbf{r})$. Как видно из рис. 6.9, при заданном уровне возбуждения (температуре T) это приводит к росту смещения от значения u_v , присущего зеренной фазе, до значения u_s в зернограничной фазе. В рамках теории Дебая такое возрастание следует из формулы [214]

$$u^2 = 9\hbar^2 T / (m\Theta^2) \quad (6.2)$$

за счет уменьшения дебаевской температуры Θ (здесь температуры T , Θ выражены в энергетических единицах, m — масса атома, \hbar — постоянная Планка). Как известно [214], при температуре плавления T_m эффективная деформация $\varepsilon_d = u/a$ оценивается значением Линдемана $\varepsilon_m \approx 0.2$, и при умеренных температурах $T \approx 0.1T_m$ формула (6.2) дает значение $\varepsilon_v \geq 5\%$. Оно характеризует исходную зеренную фазу. Для определения эффективной деформации ε_s , присущей зернограничной фазе, воспользуемся условием (см. рис. 6.9) $(c_v/2)u_v^2 = (c_s/2)u_s^2 = T$, откуда следует $\varepsilon_s = u_s/a = (c_v/c_s)^{1/2}(u_v/a) = (\lambda_v/\lambda_s)^{1/2}\varepsilon_v$. Согласно [124], максимальное значение отношения упругих модулей $\lambda_v/\lambda_s \approx 3$, так что разница деформаций $\tilde{\varepsilon} \equiv \varepsilon_s - \varepsilon_v \sim 5\%$. Именно такое значение наблюдалось в высокоразрешающем электронно—микроскопическом эксперименте [218, 219]. В результате приходим к важному выводу: упругие напряжения в гетерофазной СМК—структуре обусловлены не только статическими искажениями решетки $\varepsilon_b(\mathbf{r})$, связанными с возбуждением границ зерен, но и разницей амплитуд колебаний атомов в зернограничной и зеренной фазах.

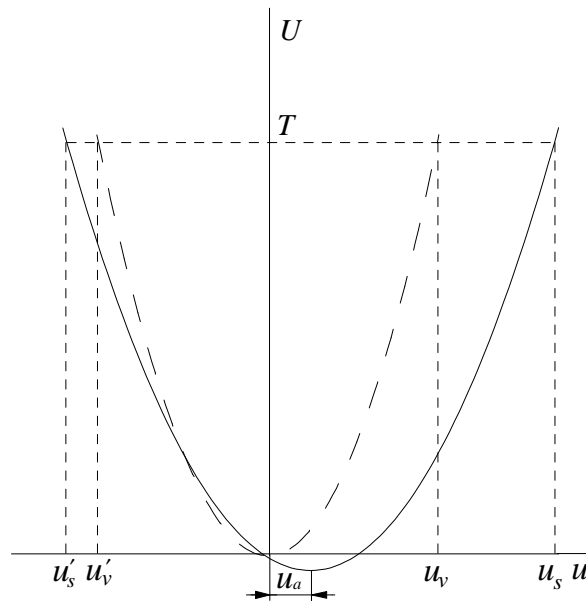


Рис. 6.9. Вид зависимости потенциального рельефа в зеренной (штриховая линия) и зернограничной фазах (сплошная). Смещение по оси абсцисс определяет статическую деформацию (6.9), а по оси ординат — изменение потенциальной энергии атома при переходе в возбужденное состояние

Оценим уровень этих напряжений по заданному размягчению $\Delta\lambda$ модуля упругости зернограничной фазы. Согласно [214], $\Delta\lambda$ приводит к росту числа акустических фононов $\bar{n}_{\mathbf{k}}$ в состоянии, задаваемом волновым вектором \mathbf{k} , на величину

$$|\Delta\bar{n}_{\mathbf{k}}| \approx |\Delta(T/s\hbar k)| \approx (T/\hbar s^2 k)\Delta s \propto (\Delta\lambda)^{1/2}, \quad (6.3)$$

где $s = (\lambda/\rho)^{1/2}$ — скорость звука;

ρ — плотность среды.

В результате между областями зернограничной и зеренной фаз возникает градиент плотности фононов $|\nabla\nu_{\mathbf{k}}| \sim \Delta\bar{n}_{\mathbf{k}}/VR$, V — объем, приводящий к диффузионному потоку

$$j_{\mathbf{k}} = D |\nabla\nu_{\mathbf{k}}| \sim (D/R) (\Delta\bar{n}_{\mathbf{k}}/V), \quad (6.4)$$

направленному от периферии зерна, где локализована зернограничная фаза, к центральной части ($D \sim sl$ — коэффициент диффузии, определяемый длиной свободного пробега фонона l). Поскольку компоненты тензора упругих напряжений $\sigma_{\mathbf{k}}$

представляют поток импульса фононов $\hbar\mathbf{k}$ [224], то можно заключить, что установление стационарного потока (6.4) означает появление компоненты упругого поля

$$\sigma_{\mathbf{k}} = \hbar\mathbf{k}\mathbf{j}_{\mathbf{k}} \sim \frac{\hbar s k l}{V R} \Delta \bar{n}_{\mathbf{k}}. \quad (6.5)$$

В результате суммарное (по волновому вектору \mathbf{k}) упругое поле определяется оценкой

$$\sigma_d \sim \frac{T l \Delta s}{\Omega R s} \leq \frac{T}{\Omega} \left(\frac{\Delta \lambda}{\lambda} \right)^{1/2}, \quad (6.6)$$

где Ω — атомный объем и принято, что длина свободного пробега фонона l ограничена размером зерна R . Таким образом, с размягчением модуля $\Delta\lambda$ упругие напряжения σ_d возрастают корневым образом.

Равенству (6.6) можно придать стандартный вид зависимости $\sigma_d(\varepsilon_d)$ упругого поля от эффективной деформации $\varepsilon_d = u/a$, обусловленной среднеквадратичным смещением u атома при его колебаниях. С этой целью запишем соотношение [214]

$$u^2 = \sum |U_{\mathbf{k}}|^2, \quad |U_{\mathbf{k}}|^2 \cong \frac{\hbar \bar{n}_{\mathbf{k}}}{N m s k}, \quad \bar{n}_{\mathbf{k}} \gg 1 \quad (6.7)$$

между среднеквадратичным смещением u , фурье-образом поля смещений $U_{\mathbf{k}}$ и числом фононов $\bar{n}_{\mathbf{k}}$ в состоянии с волновым вектором \mathbf{k} (N — число атомов). Определяя отсюда число фононов $\bar{n}_{\mathbf{k}}$, из формулы (6.5) находим

$$\sigma_d \sim \lambda(l/R) (\varepsilon_s^2 - \varepsilon_v^2) \sim \lambda \bar{\varepsilon}_d \tilde{\varepsilon}_d, \quad \varepsilon_d^2 = \sum_{\mathbf{k}} \mathbf{k}^2 |U_{\mathbf{k}}|^2, \quad (6.8)$$

где принято $l \sim R$ и учтена связь $s^2 = \lambda\Omega/m$ скорости звука s с упругим модулем λ , атомным объемом Ω и массой m ; локальное значение динамической деформации ε_d задается формулой типа (6.7); величина $\bar{\varepsilon}_d = (\varepsilon_v + \varepsilon_s)/2$ определяет средний по зерну уровень деформации; $\tilde{\varepsilon}_d = \varepsilon_s - \varepsilon_v$ — ее дисперсию.

В согласии с проведенным анализом уменьшение дебаевской температуры Θ в области зернограничной фазы обуславливает рост смещений (6.2) и, следовательно, приводит к упругим напряжениям (6.6), (6.8). Характерно, что в отличие от стандартного закона Гука они пропорциональны не первой степени удельных деформаций ε_v , ε_s , а разности их квадратов. Однако поскольку источником поля

является по сути дела дисперсия деформации $\tilde{\varepsilon}_d$, то можно считать, что линейное соотношение $\sigma_d = \lambda_{ef}\tilde{\varepsilon}_d$ по-прежнему остается в силе, хотя эффективный модуль упругости $\lambda_{ef} \sim \lambda\bar{\varepsilon}_d$ уменьшен по сравнению с исходным λ наличием средней деформации $\varepsilon_d \leq 10\%$.

Проводя параллель между статическим полем $\varepsilon_b(\mathbf{r})$, обусловленным возбуждением границ зерен, и динамической компонентой $\tilde{\varepsilon}_d(\mathbf{r})$, связанной с ростом амплитуды колебаний атомов в области зернограничной фазы, отметим, что обе эти составляющие представляют, по сути дела, дисперсию случайного поля смещений. Однако, если в первом случае стохастический характер проявляется в попеременном изменении знака зависимости $\varepsilon_b(\mathbf{r})$ на мезоскопических расстояниях $\sim w$, то во втором — в изменении за время $\sim (m/c)^{1/2}$ смещений атомов в процессе их колебаний в изменяющемся потенциальном рельефе $U(\mathbf{r})$. Если это изменение симметрично относительно узлов решетки, то компоненты $\varepsilon_b(\mathbf{r})$, $\tilde{\varepsilon}_d(\mathbf{r})$ исчерпывают полный набор составляющих поля деформации. Однако можно полагать, что при перестройке рельефа $U(\mathbf{r})$ окажутся важными эффекты ангармонизма, характеризующиеся постоянной Грюнайтзена γ [214]. Тогда, кроме динамической составляющей $\tilde{\varepsilon}_d(\mathbf{r})$, образование зернограничной фазы приведет к наличию статических искажений (см. рис. 6.9)

$$\varepsilon_a = -\Delta\gamma\frac{\Delta\Theta}{\Theta}, \quad (6.9)$$

определяемых совместными изменениями $\Delta\Theta$, $\Delta\gamma$ температуры Дебая и постоянной Грюнайтзена. Согласно данным, приведенным в подразделе 6.1, типичное значение $|\Delta\Theta/\Theta| \sim 0.1$. Что касается величины $\Delta\gamma$, то следует учесть, что она определяет не сам ангармонизм, характеризующийся значением $\gamma \approx 2$ [214], а степень его изменения при перестройке рельефа $U(\mathbf{r})$. Поэтому можно ожидать, что $\Delta\gamma \ll \gamma \sim 1$, и использовать оценку $\varepsilon_a \ll 10^{-1}$. Она подтверждается приведенным в подразделе 6.1 результатом дилатометрических исследований.

Таким образом, суммарное поле искажений неравновесной гетерофазной структуры зерна, обладающего возбужденной границей зерна, определяется ра-

венством

$$\varepsilon^2 = (\varepsilon_b + \varepsilon_a)^2 + (\varepsilon_s^2 - \varepsilon_v^2). \quad (6.10)$$

Структура данного равенства задается обсуждавшимся выше стохастическим характером компонент полного поля $\varepsilon(\mathbf{r})$: поскольку вклад возбужденной границы зерна $\varepsilon_b(\mathbf{r})$ и ангармоническая составляющая $\varepsilon_a(\mathbf{r})$ поля, связанного с перестройкой атомного рельефа зернограничной фазы, носят статический характер, то складываются сами их величины; что касается динамической компоненты $\varepsilon_d(\mathbf{r})$, определяемой значениями ε_s в зернограничной фазе и ε_v в зеренной фазе, то для нее аддитивны лишь моменты второго порядка. С ростом степени неравновесности границ зерен, определяемой дисперсией расстояний между зернограничными дислокациями, компонента $\varepsilon_b \propto \delta$ увеличивается. С другой стороны, для обеспечения экранировки возросших напряжений $\sigma(\mathbf{r})$, размытие потенциального рельефа $U(\mathbf{r})$ в области зернограничной фазы должно возрасть [222], приводя к увеличению разности смещений $u_s - u_v$, а, следовательно, и разности квадратов эффективных деформаций $\varepsilon_s^2 - \varepsilon_v^2$. По той же причине может возрасть и ангармонический вклад ε_a . В результате происходит увеличение полной деформации ε . Отвечающая ей упругая энергия гетерофазной структуры зерна определена в рамках приближения упруго-изотропного континуума в приложении Б.

6.3. Термодинамика фазового равновесия зернограничной и зеренной фаз

Будем считать все зерна одинаковыми сферами радиуса R . Зернограничная фаза полагается в виде сферического слоя, расположенного на периферии зерна и имеющего полутолщину d (см. рис. 6.3б). Тогда объемная доля зернограничной фазы p определяется выражением

$$p = 1 - (1 - d/R)^3. \quad (6.11)$$

Условие термодинамического равновесия фаз [110]

$$\mu_v(P_v, T) = \mu_s(P_s, T) + E \quad (6.12)$$

определяется вкладом E упругого поля (см. формулу (Б.14) в приложении Б) и зависимостью химпотенциалов μ_s, μ_v от давлений P_s, P_v в объемах зеренной и зернограничной фаз соответственно (температуры T разных фаз, естественно, одинаковы). Поскольку зеренная фаза ограничена двумя поверхностями (см. рис. 6.3б), то величина давления P_v отличается от внешнего P лапласовским давлением $P_{L0} = 2\sigma_0/R$, обусловленным поверхностным натяжением границ зерен σ_0 , и аналогичной составляющей $P_L = 2\sigma/(R-d)$, связанной с наличием межфазной границы с поверхностным натяжением σ . В результате для зеренной фазы обычным образом [110] получаем

$$\mu_v(P_v) = \mu_{v0} + 2\sigma_0\Omega/R + 2\sigma\Omega/(R-d), \quad (6.13)$$

где Ω — атомный объем; $\mu_{v0} = \mu_v(P)$.

Поскольку лапласовское давление P_{L0} , обусловленное границей зерна, действует и на зернограничную фазу, то второе слагаемое правой части (6.13) появляется и для химпотенциала $\mu_s(P_s)$. Здесь вместо (6.13) имеем

$$\mu_s(P_s) = \mu_{s0} + 2\sigma_0\Omega/R, \quad (6.14)$$

где $\mu_{s0} = \mu_s(P)$, а само условие равновесия фаз (6.12) принимает вид

$$\mu_{v0} + 2\sigma\Omega/(R-d) = \mu_{s0} + E. \quad (6.15)$$

Неравновесный характер зернограничной фазы выражается условием $\mu_{v0} < \mu_{s0}$.

Для анализа уравнения (6.15) введем безразмерный параметр

$$\alpha = \frac{\mu_{s0} - \mu_{v0}}{(\Lambda/2)\varepsilon^2\Omega}, \quad (6.16)$$

определяющий отношение термодинамической выгоды зеренной фазы в сравнении с зернограничной фазой к упругой энергии, задаваемой упругим модулем Λ и деформацией ε (см. (Б.12), (6.10)). Введем также характерный размер

$$\rho = \frac{2\sigma}{(\Lambda/2)\varepsilon^2}, \quad (6.17)$$

задаваемый соотношением между поверхностной и упругой составляющими. С учетом (Б.14), (6.16), (6.17) условие (6.15) принимает вид

$$p = \rho/(R - d) - \alpha. \quad (6.18)$$

Отсюда следует, что с уменьшением зерна образование зернограничной фазы происходит, начиная с размеров меньше критического

$$R_c \equiv \rho/\alpha = 2\sigma\Omega/(\mu_{s0} - \mu_{v0}). \quad (6.19)$$

Как и следовало ожидать, термодинамически устойчивая зернограничная фаза реализуется в материалах с большими значениями σ коэффициента поверхностного натяжения межфазной границы (не путать с зернограничным натяжением σ_0), а также малыми значениями упругой деформации (6.10) и разности $\mu_{s0} - \mu_{v0}$ химических потенциалов фаз (слабо неравновесная зернограничная фаза). По-видимому, эти условия достаточно легко реализуются в металлических материалах.

Найденная зависимость (6.18) качественным образом согласуется с результатами мессбауэровской спектроскопии, приведенными в таблице 6.1, где величина p дается относительной интенсивностью площади подспектра 2 на рис. 6.2. Зависимость объемной доли зернограничной фазы p от радиуса зерна R имеет вид сплошной кривой на рис. 6.10. При этом параметры (6.17), (6.19) принимают значения

$$\rho \approx 16 \text{ нм}, \quad R_c \approx 0.4 \text{ мкм}, \quad (6.20)$$

а величина относительной дисперсии экспериментальных и подгоночных данных составляет 6%. Параметр ρ определяет характерную толщину зернограничной фазы, R_c — критический размер зерна, начиная с которого неравновесная зернограничная фаза становится устойчивой.

Таким образом, проведенный термодинамический анализ показывает, что в СМК и НК возможно образование устойчивой зернограничной фазы, толщина d которой растет с уменьшением размера зерна R . Решение системы уравнений (6.11), (6.18) приводит к зависимости $d_\rho(R)$, вид которой приведен на рис. 6.11. Его

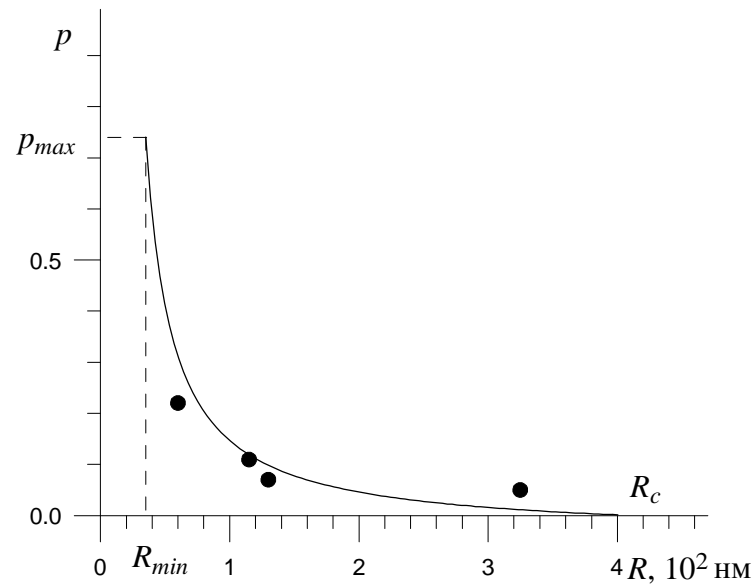


Рис. 6.10. Зависимость объемной доли зернограничной фазы от радиуса зерна (6.18) при $\alpha=0.04$, $d=14.5$ нм (точки отвечают экспериментальным данным, приведенным в таблице)

характерная особенность состоит в том, что с уменьшением радиуса зерна объемная доля достигает максимального значения

$$p_{\max} = (3 - \alpha)/4, \quad (6.21)$$

которое всегда меньше единицы. Это говорит о том, что даже в НК не все зерно переходит в возбужденное состояние. Для СМК в экспериментально наблюдаемой области, по-видимому, всегда $\rho \ll R$, и реализуется линейно спадающая зависимость вида

$$d \approx (\rho/3)(1 - R/R_c). \quad (6.22)$$

Для НК, где $d \sim R \sim \rho$, зависимость $d(R)$ нелинейна, и толщина зернограничной фазы нарастает с уменьшением R значительно быстрее, достигая точки, в которой минимальный радиус зерна составляет $R_{\min} = 3^{-1} 4^{4/3} (1 + \alpha)^{4/3} \rho \approx 2.20\rho$, а максимальная толщина зернограничной фазы $d_{\max} = \{1 - (1 + \alpha)/4^{1/3}\} R_{\min} \approx 0.37 R_{\min} \approx 0.78\rho$.

С ростом степени неравновесности системы все три параметра ε , $\mu_{s0} - \mu_{v0}$, σ

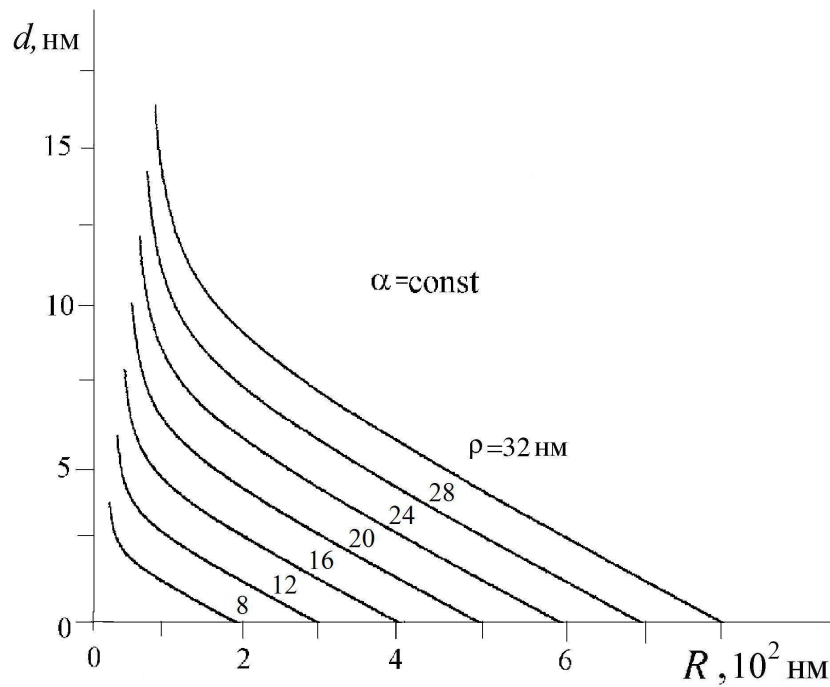


Рис. 6.11. Зависимость толщины прослойки зернограничной фазы от радиуса зерна при $\alpha = 0.04$

возрастают, и поведение величин ρ , α , R_c , задающих вид зависимостей $p(R)$, $d(R)$, является неопределенным. Однако, как видно из рис. 6.11 и предельной зависимости (6.22), с возбуждением системы параметр ρ может только расти, поскольку это способствует увеличению толщины зернограничной фазы d . Если с той же интенсивностью увеличивается и параметр α , то критический радиус R_c не изменяется, и зависимость $d_\rho(R)$ имеет вид, представленный на рис. 6.12. В обратном случае, когда слабо изменяется параметр α , возбуждение границ зерен способствует одновременному нарастанию величин ρ и R_c , и реализуется зависимость $d_\rho(R)$ типа показанной на рис. 6.11. В действительности, по-видимому, имеет место первая из указанных ситуаций ($R_c \approx \text{const}$). При этом возбуждение системы слабо сказывается на величине упругой энергии $\sim \Lambda \varepsilon^2$ и приводит к одинаковому росту степени неравновесности зернограничной фазы $\mu_{s0} - \mu_{v0}$ и поверхностного натяжения σ на границе фаз. В пользу такого утверждения говорит тот факт, что рассмотрение условий фазового равновесия в рамках схемы Гинзбурга–Ландау (см., например, раздел 8.2 в [138] и работу [72]) дает связь $\sigma \propto \mu_{s0} - \mu_{v0}$.

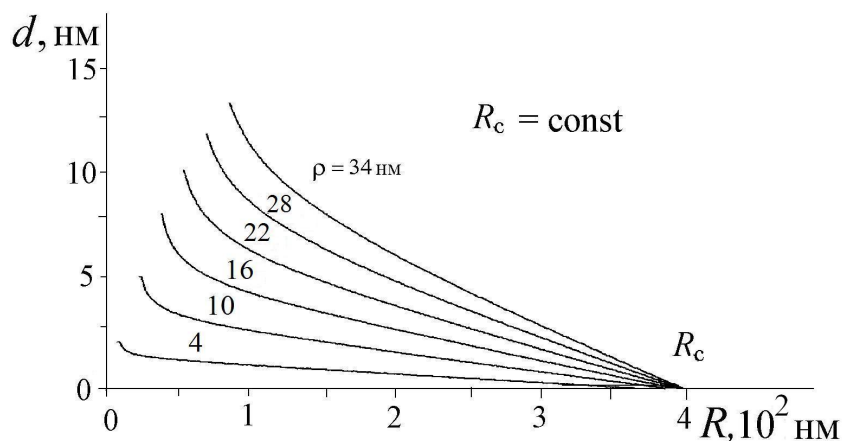


Рис. 6.12. Зависимость толщины прослойки зернограничной фазы от радиуса зерна при $R_c = 4 \cdot 10^2$ нм

6.4. Обсуждение микроскопической природы гетерофазной структуры зерна

Изложенный термодинамический анализ основывается на предположении, согласно которому аномальная область кристалла, образующаяся вблизи границы зерна, рассматривается как термодинамическая фаза, которая хотя и неравновесна, но может находиться в устойчивом метастабильном состоянии. Для обоснования такого предположения необходимо ответить на вопрос: какова микроскопическая природа отличия возбужденной зернограничной от обычной зеренной фазы? Иными словами, следует выяснить физический смысл параметра "порядка" η , различающего эти фазы. Согласно анализу экспериментальных данных (подраздел 6.1), указанное отличие состоит лишь в степени возбуждения (динамической активности) атомов, в связи с чем более уместно называть величину η параметром возбуждения¹⁶.

На первый взгляд, может показаться, что роль параметра возбуждения играет величина типа разности $u_s - u_v$ между характерными значениями среднеквадрат-

¹⁶Следует иметь в виду, что изначальной причиной неравновесности НК и СМК является возбуждение границ зерен, обусловленное поглощением решеточных дислокаций. Поэтому возбуждение зернограничной фазы является, строго говоря, вторичным.

тичных смещений атомов в зернограничной и зеренной фазе. Однако из рис. 6.9 видно, что эта разность обусловлена изменением потенциального рельефа атомов $U(\mathbf{r})$, в связи с чем величина $u_s - u_v$ представляет лишь вторичный параметр возбуждения (типа искажений решетки твердого раствора при его упорядочении [138]). Изначальной же причиной возбуждения атомов зернограничной фазы следует, по-видимому, считать изменение координатной зависимости $U(\mathbf{r})$ потенциальной энергии атомов относительно исходной зависимости $U_0(\mathbf{r})$, присущей равновесной зеренной фазе¹⁷.

Приведем схему [3, 72, 222, 225], позволяющую по изменению атомного потенциального рельефа $U(\mathbf{r})$ определить параметр возбуждения η . Если набор полей $\{U(\mathbf{r})\}$, реализуемый при разных степенях воздействия Θ , в результате которого образуется возбужденная граница зерна, не является стохастическим, то имеем

$$\eta = \frac{\overline{|\Delta U(\mathbf{r})|^2}}{|\Delta U(\mathbf{r})|_{\max}^2}, \quad \Delta U(\mathbf{r}) = U(\mathbf{r}) - U_0(\mathbf{r}), \quad (6.23)$$

где черта означает усреднение по объему зернограничной фазы. Очевидно, такое определение подразумевает, что ансамбль потенциальных рельефов $\{U(\mathbf{r})\}$ обладает распределением вероятности $P\{U(\mathbf{r})\} = \delta\{U(\mathbf{r}) - U_0(\mathbf{r})\}$ микроканонического типа.

Однако неравновесный характер системы заставляет полагать, что по мере роста параметра возбуждения Θ , δ -образное распределение $P\{U(\mathbf{r})\}$ размывается, принимая квазигиббсовский вид [3, 72, 225]

$$P\{U(\mathbf{r})\} \propto \exp\left(-\Theta^{-1} \int V(U(\mathbf{r})) d\mathbf{r}\right), \quad (6.24)$$

где $V(U(\mathbf{r}))$ — синергетический потенциал [226]. При этом детерминистическое определение (6.23) становится неправомерным, и вместо него следует использо-

¹⁷Хотя понятие потенциального рельефа атомов $U(\mathbf{r})$ широко используется и интуитивно очевидно, учитывая его принципиальную важность для дальнейшего, укажем, что формально зависимость $U(\mathbf{r})$ определяется как вариационная производная от термодинамического потенциала системы по функции пространственного распределения атомов [222]. Из этого определения, в частности, следует, что по аналогии с электростатикой $U(\mathbf{r})$ можно понимать как потенциальную энергию "пробного атома", под действием суммарного потенциала реальных и внешнего полей.

вать стохастическое [72, 222]

$$|\eta|^2(\mathbf{r}) = \lim_{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|\rightarrow\infty} \frac{\langle \delta U(\mathbf{r})\delta U(\mathbf{r}') \rangle}{\langle |\delta U(\mathbf{r})|^2 \rangle}, \quad (6.25)$$

$$\delta U(\mathbf{r}) = U(\mathbf{r}) - \langle U(\mathbf{r}) \rangle,$$

где угловые скобки означают усреднение по распределению (6.24). В рамках такого подхода метастабильная система может быть исследована по аналогии с термодинамически равновесными, испытывающими фазовый переход по мере изменения параметра возбуждения Θ [226].

С целью наглядного представления определений (6.23), (6.25) на рис. 6.13 показаны пространственное распределение параметра возбуждения вдоль оси r , проходящей через центр зерна, и вид соответствующих координатных зависимостей $U(\mathbf{r})$ потенциального рельефа¹⁸. Условия $\bar{U}(\mathbf{r}) = \text{const}$, $\langle U(\mathbf{r}) \rangle = \text{const}$, отвечающие постоянному уровню отсчета зависимостей $U(\mathbf{r})$ на рис. 6.13б, в, означают отсутствие статической деформации решетки [139]. Детерминистическая ситуация, отвечающая рис. 6.13б, реализуется, очевидно, в термически невозбужденных системах, в которых изменение потенциального рельефа, связанное с размягчением межатомных связей, имеет чисто механический характер. При этом параметр возбуждения (6.23) определяется уменьшением высоты U_0 потенциального рельефа, которое и приводит к росту коэффициента D зернограничной диффузии (см. подраздел 6.1).

В действительности, по—видимому, реализуется стохастическое распределение рельефов $\{U(\mathbf{r})\}$, показанное на рис. 6.13в. Такая система находится в термически неравновесном состоянии, определяемом параметром Θ , величина которого задает уровень энергии, запасаемой границей зерна в ходе предварительной обработки образца. Как и в случае механической перестройки рельефа (рис. 6.13б), здесь происходит уменьшение эффективной высоты потенциального рельефа, что также приводит к росту величины D . Однако, если в первом случае среда являе—

¹⁸Отметим, что функция $U(\mathbf{r})$ претерпевает быстрые изменения на межатомных расстояниях и плавные на мезоскопических. Последние и обуславливают огрубленную координатную зависимость $\eta(\mathbf{r})$ параметра возбуждения, описывающую гетерофазный характер системы.

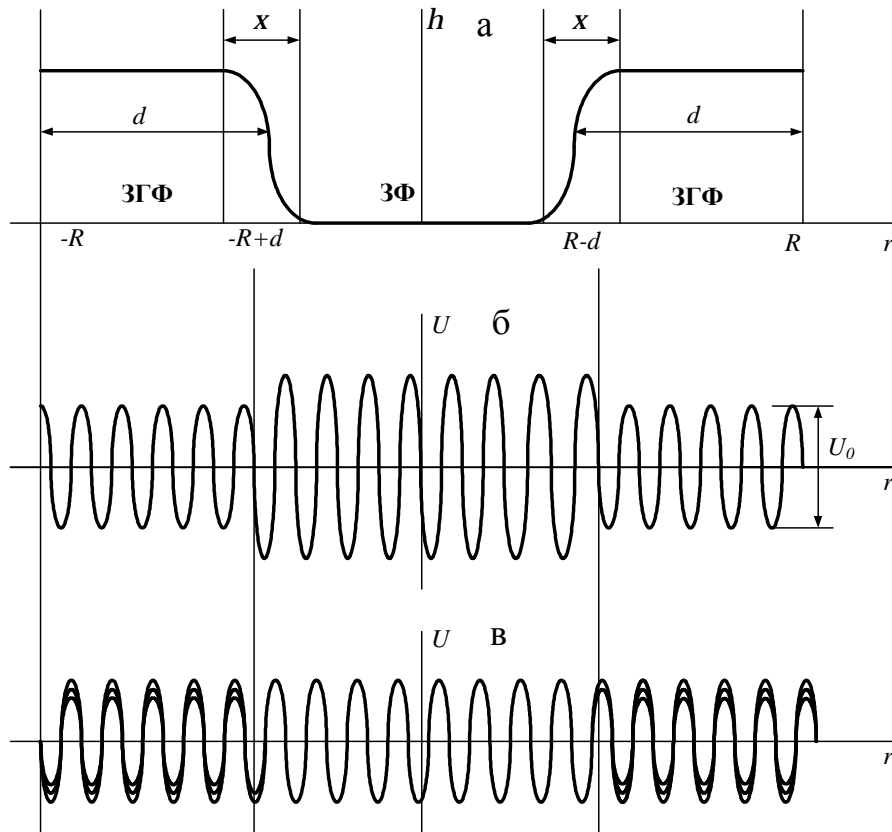


Рис. 6.13. Вид координатной зависимости параметра возбуждения гетерофазной структуры зерна (а) (ЗГФ и ЗФ — зернограничная и зеренная фазы) и соответствующий потенциальный рельеф (б, в) для параметров (6.23), (6.25) соответственно

тятся идеально упругой, т.е. сдвиговая вязкость $\eta = \infty$, то флуктуации рельефа во втором обусловлены, очевидно, процессами вязкого течения в среде с $\eta < \infty$ [139]. Именно эти процессы обеспечивают экранировку дальнего действующего поля возбужденной границы зерна [216] в приповерхностном объеме зернограничной фазы. С другой стороны, они обуславливают и сверхпластические свойства.

Таким образом, при описании НК и СМК следует отдать предпочтение модели термически неравновесной системы, для которой реализуется флуктуирующий ансамбль рельефов вида рис. 6.13в, а параметр возбуждения определяется равенством (6.25).

Введение параметра возбуждения позволяет представить неравновесное состояние НК и СМК по аналогии с гетерогенным состоянием в полупроводниковых

системах, претерпевающих фазовое превращение [227, 228]. Здесь, несмотря на проигрыш в поверхностной энергии, неоднородное состояние фиксируется благодаря тому, что в одной из фаз энергия носителей заряда меньше, чем в другой. Поэтому происходит их перераспределение, но чтобы не возникла огромная кулоновская энергия, размеры областей фаз должны быть ограничены длиной λ экранирования электростатического поля. В результате системе оказывается выгодным разбиться на чередующиеся прослойки фаз толщиной $\sim \lambda$ с повышенной и пониженной концентрациями носителей.

Как видно из картины, изложенной в подразделе 6.2, в нашем случае роль носителей поля играют фононы, плотность которых в области зернограничной фазы выше, чем в зеренной фазе. Размер зерна R , естественным образом ограничивающий область распространения упругого поля, отвечает длине экранирования λ . Эти обстоятельства позволяют представить неравновесную систему НК и СМК как гетерогенное состояние, обусловленное распределением плотности фононов. Однако по сравнению с полупроводниковыми системами имеется ряд важных различий, не позволяющих непосредственно перенести формализм [227, 228] на наш объект. Прежде всего это связано с геометрией задачи: если в полупроводниковых системах наиболее низкоэнергетическим является одномерное распределение полей, то в нашем случае симметрия является сферической. Это приводит к появлению лапласовского давления, которое, как видно из подраздела 6.3, принципиальным образом сказывается на термодинамике. Кроме того, если в полупроводниковых системах полное число носителей поля сохраняется, то в нашем случае число фононов изменяется с температурой [214]. Поэтому становится беспредметным вопрос о фазовой диаграмме, на которой можно указать область существования гетерогенного состояния¹⁹.

¹⁹Следует отметить, что такое состояние принципиальным образом отличается от обычной смеси фаз тем, что последние нельзя отделить друг от друга, как это имеет место для обычной многофазной системы. Быстро чередующееся пространственное распределение термодинамических фаз и силовых полей в гетерогенном состоянии позволяет понизить его термодинамический потенциал по сравнению со значениями, отвечающими отдельным фазам или их обычной смеси.

Примером такого состояния, связанного с упругим полем, является полевая модель дефекта кристаллического строения [222], в рамках которой дислокация и дисклинация представляются по аналогии с вихрем Абрикосова в смешанном состоянии сверхпроводника второго рода. Характерно, что при этом ядро дефекта, отвечающее возбужденной зернограничной фазе, имеет размер порядка толщины межфазной границы. Иными словами, дефект представляет топологическую особенность (солитон), размер которого практически не зависит от внешних условий. По-видимому, именно такая ситуация реализуется для гетерогенного состояния в НК и СМК. Действительно, из таблицы 6.1 видно, что с изменением радиуса зерна R значительно меняется лишь объемная доля p зернограничной фазы, тогда как ее толщина d остается практически постоянной. Отсюда можно заключить, что аномальные свойства НК и СМК обусловлены наличием смешанного состояния зеренной и зернограничной фаз, последняя из которых экранирует дальнедействующее упругое поле, создаваемое возбужденной границей зерна.

Представленное гетерогенное состояние СМК и НК исследовано в подразделе 6.3 в рамках простейшего макроскопического приближения. Однако, как и в случае полупроводниковых систем [227], оно не позволяет ответить на вопрос: какой должна быть разница плотностей фононов в зернограничной и зеренной фазах, необходимая для стабилизации гетерогенного состояния?²⁰ Очевидно, дальнейшее прояснение ситуации может быть достигнуто в рамках полевого подхода типа Гинзбурга—Ландау (см. [72, 228]).

6.5. Выводы

1. Анализ экспериментальных данных показывает, что аномальное сочетание твердости и пластичности НК и СМК обусловлено наличием жидкоподобной прослойки, формирующейся вблизи границы зерна. Зерно НК и СМК представ-

²⁰Очевидно, в рамках макроскопического приближения, развитого в подразделе 6.3, ответ на этот вопрос позволил бы установить соотношение между характерными масштабами ρ и R_c , т.е. величину параметра α , определенного равенством (6.16).

ляет гетерогенное состояние, состоящее из центральной области с идеальной кристаллической решеткой и сферического зернограничного слоя с размытым атомным потенциальным рельефом.

2. Исследование распределения упругих полей позволяет сделать вывод, что упругие напряжения в гетерофазной НК– и СМК–структуре обусловлены не только статическими искажениями решетки, связанными с возбуждением границ зерен, изменением температуры Дебая и эффектами ангармонизма, но и разницей амплитуд колебаний атомов в зернограничной и зеренной фазах. Таким образом, аномальное поведение НК и СМК связано с возрастанием среднеквадратичного смещения атомов зернограничной фазы, которое, в свою очередь, обусловлено размягчением межатомных связей и уменьшением дебаевской температуры.

3. Исследование термодинамики равновесия зеренной и зернограничной фаз показывает, что последняя реализуется только при радиусе зерна меньше критического значения. Зернограничная фаза может существовать при большом значении коэффициента поверхностного натяжения межфазной границы и малом значении разности химических потенциалов возбужденной и невозбужденной фаз. Увеличение модуля упругости НК и СМК приводит при прочих равных условиях к уменьшению объемной доли зернограничной фазы.

4. Используя концепцию о перестраиваемом потенциальном рельефе, при помощи введения параметра возбуждения, определяемого степенью динамической активности атомов, представлена микроскопическая природа отличия возбужденной зернограничной от зеренной фазы. Введение параметра возбуждения позволяет интерпретировать неравновесное состояние НК и СМК по аналогии с гетерогенным состоянием в полупроводниковых системах, претерпевающих фазовое превращение. Показано, что флуктуации потенциального рельефа обусловлены процессами вязкого течения в среде с пониженной вязкостью, которые обеспечивают экранировку дальнедействующего поля возбужденной границы зерна в приповерхностном объеме зернограничной фазы и пластические свойства.

Результаты, представленные в данном разделе, опубликованы в работах

[71, 72]. Личный вклад соискателя в соответствующих работах состоит в следующем: [71] — принимал участие в анализе экспериментальных данных и по поставленной задаче выполнил аналитическое и численное исследование термодинамики фазового равновесия зеренной и зернограничной фаз НК и СМК, построил зависимости объемной доли и толщины зернограничной фазы от радиуса зерна; [72] — принимал участие в описании влияния размытого атомного потенциального рельефа.

ОСНОВНЫЕ ВЫВОДЫ

В диссертации приведены результаты исследований, полученных при разработке научной проблемы "Самоорганизация и формирование низкоразмерных систем при удалении от равновесия", которые позволили установить и углубить модельные представления о механизмах, статистической картине и кинетике фазовых превращений, происходящих в низкоразмерных системах под влиянием внешних факторов. Развита модель, с помощью которой можно описать эффекты, наблюдаемые при трении атомарно—гладких твердых поверхностей, разделенных ультратонким слоем смазки. Результаты работы позволяют расширить представления о физике трения наноразмерных объектов, когда обычные законы, типа закона Амонтона, не выполняются. Исследование ИПД в рамках теории фазовых переходов предсказывает возможность возникновения новых режимов фрагментации и соответственно получения материалов с заданными свойствами. Предложены модели, которые позволяют описать процессы самоорганизации низкоразмерных систем и образование стационарных гетерофазных наноструктур в неравновесных конденсированных средах. Проведенные комплексные исследования дали возможность развить схему термодинамических превращений на открытые системы и сделать следующие выводы.

1. Плавление ультратонкой пленки смазки при трении между атомарно—гладкими твердыми поверхностями представлено как результат действия спонтанно появившихся сдвиговых напряжений, которое вызывается внешним сверхкритическим нагреванием. На основе уравнения Гинзбурга—Ландау—Халатникова описаны пространственные распределения напряжений, деформации и температуры в пленке смазки. Критическая температура поверхностей трения, при которой происходит плавление, увеличивается с ростом характерного значения сдвиговой вязкости и уменьшается с ростом модуля сдвига смазки линейным образом. Показано, что прерывистый режим трения (stick—slip) реализуется, если время релаксации температуры смазки намного превышает его значение для сдви-

говых напряжений и деформации. Описан гистерезис зависимостей стационарных напряжений от стационарной деформации и температуры поверхностей трения. Исследовано плавление смазки при температурных зависимостях вязкости, описываемых соотношением Фогеля—Фулчера и степенным выражением, которые наблюдаются экспериментально. Показано, что существует критическая температура поверхностей трения, при превышении которой происходит плавление пленки смазки. Определены значения характерных параметров, необходимые для уменьшения трения.

2. Учен аддитивный некоррелированный шум сдвиговых напряжений и деформации, а также температуры пленки смазки. Построены фазовые диаграммы, где интенсивности флуктуаций деформации и температуры смазки, а также температура поверхностей трения определяют области жидкостного, прерывистого и сухого трения. Показано, что увеличение интенсивности шума деформации приводит к плавлению пленки смазки даже при низких температурах поверхностей трения. При численном анализе уравнения Ланжевена для различных областей диаграммы построены временные зависимости напряжений, которые позволяют объяснить эксперименты по трению, где наблюдается прерывистое движение. Рассмотрено плавление смазки за счет диссипативного разогрева поверхностей трения и дано объяснение экспериментально определенным временным зависимостям силы трения.

3. Исследовано плавление ультратонкой пленки смазки с учетом флуктуаций ее температуры, которые описываются процессом Орнштейна—Уленбека. Показано, что возникают три прерывистых режима движения, характеризующиеся переходами между сухим, метастабильным и устойчивым жидкостными режимами трения.

4. В рамках теории фазовых переходов Ландау исследована фрагментация твердых тел в процессе ИПД. Построена фазовая диаграмма, где первые два инварианта упругой части тензора деформации определяют области реализации различных типов предельных структур. Установлено, что с увеличением упругих де-

формаций размер зерен в предельных структурах уменьшается. Найдены условия формирования двух предельных структур, что отвечает режиму, при котором существует смесь зерен различного размера. Проведен учет аддитивного некоррелированного шума основных параметров и построена фазовая диаграмма в осях интенсивность шума температуры и второй инвариант тензора деформации.

5. Исследована простейшая синергетическая модель формирования лавины при движении песка по наклонной плоскости (модель *sandpile*). С учетом аддитивных некоррелированных флуктуаций скорости течения песка и наклона его поверхности построена фазовая диаграмма, определяющая области формирования лавины, равновесного и смешанного состояния.

6. На основе анализа результатов экспериментального исследования взрывной кристаллизации ультрадисперсных аморфных пленок германия показано, что при малых толщинах пленки кристаллизация инициируется локальным тепловым воздействием, а при больших — протекает спонтанно. Показано, что в отличие от обычного режима кристаллизации взрывная обусловлена неустойчивостью теплового характера, которая представлена схемой Лоренца. В результате взрывная кристаллизация сводится к явлению СОК, при котором распространение фронта представляется диффузией в ультраметрическом пространстве иерархически соподчиненных лавин. Получены выражения для стационарных распределений теплоты кристаллизации и теплового потока.

7. Проведено суперсимметричное исследование самоорганизующейся системы, лагранжиан которой представлен полями параметра порядка, амплитуды флуктуаций сопряженного поля и пары грассмано-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. Найдены характерные численные значения интенсивности термического беспорядка, при которых происходят потеря эргодичности и упорядочение.

8. В рамках комплексной модели Лоренца исследован фазовый переход вто-

рого рода, описываемый комплексными параметром порядка и сопряженным полем, а также управляющим параметром. На фазовых портретах обнаружен универсальный притягивающий участок. Установлено, что различие частот изменения параметра порядка и сопряженного поля приводит к колебательному поведению параметров в комплексных плоскостях указанных величин.

9. На основе анализа экспериментальных данных о структуре и физико-механических свойствах НК и СМК сделан вывод, что их аномальный характер обусловлен переходом границ зерен в возбужденное состояние, который сопровождается появлением дальнедействующих упругих полей. В этих условиях системе термодинамически выгодно перейти в гетерогенное состояние, в котором поле границ зерна экранируется прослойкой, характеризуемой вязкостью. Не отличаясь структурно от остальной части зерна, она обладает всеми атрибутами термодинамической фазы, что позволяет провести стандартный анализ фазового равновесия этой прослойки с центральной частью зерна. Полученные результаты объясняют экспериментально найденную зависимость объемной доли прослойки от размера зерна.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

1. Хакен Г. Синергетика / Хакен Г.; [пер. с англ. В. Емельянов]. - М.: Мир, 1980. - 404 с.
2. Хакен Г. Информация и самоорганизация. Макроскопический подход к сложным системам / Хакен Г.; [пер. с англ. Ю. Данилов]. - М.: УРСС, 2005. - 245 с.
3. Olemskoi A.I. Theory of structure transformations in non-equilibrium condensed matter / Olemskoi A.I. - New-York: NOVA Science, 1999. - 285 p.
4. Persson B.N.J. Sliding friction. Physical principles and applications / Persson B.N.J. - Berlin: Springer-Verlag, 2000. - 515 p.
5. Bowden F.P. The friction and lubrication of solids / F.P. Bowden, D. Tabor. - Oxford: Clarendon Press, 1986. - 381 p.
6. Gee M.L. Liquid to solidlike transitions of molecularly thin films under shear / M.L. Gee, P.M. McGuiggan, J.N. Israelachvili // Journal of Chemical Physics. - 1990. - Vol. 93, № 3. - P. 1895-1906.
7. Yoshizawa H. Fundamental mechanisms of interfacial friction. 1. Relation between adhesion and friction / H. Yoshizawa, Y.-L. Chen, J. Israelachvili // Journal of Physical Chemistry. - 1993. - Vol. 97, № 16. - P. 4128-4140.
8. Yoshizawa H. Fundamental mechanisms of interfacial friction. 2. Stick-slip friction of spherical and chain molecules / H. Yoshizawa, J. Israelachvili // Journal of Physical Chemistry. - 1993. - Vol. 97, № 43. - P. 11300-11313.
9. Luengo G. Generalized effects in confined fluids: new friction map for boundary lubrication / G. Luengo, J. Israelachvili, S. Granick // Wear. - 1996. - Vol. 200. - P. 328-335.
10. Tshiprut Z. Tuning diffusion and friction in microscopic contacts by mechanical excitations / Z. Tshiprut, A.E. Filippov, M. Urbakh // Physical Review Letters. - 2005. - Vol. 95. - P. 016101 (4).

11. Torque and twist against superlubricity / A.E. Filippov, M. Dienwiebel, J.W.M. Frenken [et al.] // *Physical Review Letters*. - 2008. - Vol. 100, № 4. - P. 046102 (4).
12. Структура и свойства порошковых покрытий, нанесенных высокоскоростной плазменной струей / А.Д. Погребняк, Ю.А. Кравченко, Д.Л. Алонцева [и др.] // *Трение и износ*. - 2005. - Т. 26, № 5. - С. 507-516.
13. Формирование многослойных покрытий TiN/Mo вакуумно-дуговым методом с использованием ВЧ заряда / В.М. Береснев, А.Д. Погребняк, О.М. Швец [и др.] // *Вісник Харківського університету. Серія фізична "Ядра, частинки, поля"*. - 2007. - № 777. - вип. 2(34). - С. 93-96.
14. Gorobets Yu.I. Influence of the parameters of material onto surface spin wave refraction in two-axis ferromagnetic media / Yu.I. Gorobets, S.A. Reshetnyak // *International Journal of Nanotechnology*. - 2006.- Vol. 3, № 1.- P. 140-147.
15. Gorobets Yu.I. Reflection of spin waves from a ferromagnetic multilayer with interfacial coupling of finite strength (reflection of spin waves from multilayer) / Yu.I. Gorobets, S.A. Reshetnyak // *Central European Journal of Physics*. - 2008. - Vol. 6, № 1. - P. 7-13.
16. Горобець Ю.І. Відбиття та загасання об'ємних спінових хвиль у одновісній багатосферній ферромагнітній структурі / Ю.І. Горобець, С.О. Решетняк, Т.А. Хоменко // *Український фізичний журнал*. - 2008. - Т. 53, № 6. - С. 552-556.
17. Метлов Л.С. Термодинамика интенсивных пластических деформаций / Л.С. Метлов // *Металлофизика и новейшие технологии*. - 2007. - Т. 29, № 3. - С. 335-345.
18. Bak P. How nature works: the science of self-organized criticality / Bak P. - Oxford: Oxford University Press, 1997. - 212 p.
19. Jensen H.J. Self-organized criticality. Emergent complex behavior in physical and biological systems / Jensen H.J. - Cambridge: Cambridge University Press, 1998. - 167 p.
20. Turcotte D.L. Self-organized criticality / D.L. Turcotte // *Reports on Progress in*

- Physics. - 1999. - Vol. 62. - P. 1377-1429.
21. Parzusi M. Avalanche dynamics in evolution, growth, and depinning models / M. Parzusi, S. Maslov, P. Bak // Physical Review E. - 1996. - Vol. 53, № 1. - P. 414-443.
 22. Bak P. Self-organized criticality: an expansion of $1/f$ noise / P. Bak, C. Tang, K. Wiesenfeld // Physical Review Letters. - 1987. - Vol. 59, № 4. - P. 381-384.
 23. Bak P. Punctuated equilibrium and criticality in a simple model of evolution / P. Bak, K. Sneppen // Physical Review Letters. - 1993. - Vol. 71, № 24. - P. 4083-4086.
 24. Halpin-Healy T. Kinetic roughening phenomena, stochastic growth, directed polymers and all that. Aspects of multidisciplinary statistical mechanics / T. Halpin-Healy, Y.-C. Zhang // Physics Reports. - 1995. - Vol. 254, № 4-6. - P. 215-414.
 25. Hwa T. Avalanches, hydrodynamics, and discharge events in models of sandpiles / T. Hwa, M. Kardar // Physical Review A. - 1992. - Vol. 45, № 10. - P. 7002 - 7023.
 26. Gil L. Landau-Ginzburg theory of self-organized criticality / L. Gil, D. Sornette // Physical Review Letters. - 1996. - Vol. 76, № 21. - P. 3991-3994.
 27. Vespignani A. How self-organized criticality works: a unified mean-field picture / A. Vespignani, S. Zapperi // Physical Review E. - 1998. - Vol. 57, № 6. - P. 6345-6362.
 28. Олемской А.И. Самоорганизация самоподобных стохастических систем / А.И. Олемской, Д.О. Харченко. - М. : Ин-т компьют. исслед. ; Ижевск : РХД, 2007. - 296 с.
 29. Bak P. Self-organized criticality and punctuated equilibria / P. Bak, S. Boettcher // Physica D. - 1997. - Vol. 107, № 2-4. - P. 143-150.
 30. Zinn-Justin J. Quantum field theory and critical phenomena / Zinn-Justin J. - Oxford: Clarendon Press, 1993. - 914 p.
 31. Олемской А.И. Теория пространственно-временной эволюции неравновесной термодинамической системы / А.И. Олемской, И.В. Коплык // Успехи физических наук. - 1995. - Т. 165, № 10. - С. 1105-1144.

32. Олемской А.И. Суперсимметричная теория неравновесной стохастической системы в приложении к неупорядоченным гетерополимерам / А.И. Олемской // УФН. - 2001. - Т. 171, № 5. - С. 503-538.
33. Олемской А.И. Синергетика конденсированной среды: учебное пособие / А.И. Олемской, А.В. Хоменко - Сумы: Изд-во СумГУ, 2002. - 373 с.
34. Олемской А.И. Трехпараметрическая кинетика фазового перехода / А.И. Олемской, А.В. Хоменко // Журнал экспериментальной и теоретической физики. - 1996. - Т. 110, вып. 6(12). - С. 2144-2167.
35. Khomenko A.V. Solid-liquid transition of ultrathin lubricant film / A.V. Khomenko, O.V. Yushchenko // Physical Review E. - 2003. - Vol. 68, № 3. - P. 036110 (6).
36. Khomenko A.V. Synergetic theory of ultrathin lubricant film melting / A.V. Khomenko, O.V. Yushchenko // Вісник Львівського університету. Серія фізична. - 2005. - вип. 38. - С. 18-29.
37. Khomenko A.V. Stochastic models of ultrathin lubricant film melting / A.V. Khomenko // Вісник Львівського університету. Серія фізична. - 2006. - вип. 39. - С. 23-35.
38. Khomenko A. Solid-liquid transition of ultrathin lubricant film with noise and spatial heterogeneity / A. Khomenko // ЕВРИКА-2004: Міжнародна конференція студентів і молодих науковців з теоретичної та експериментальної фізики, 19-21 травня 2004 р.: тези доповідей. - Львів, 2004. - С. 46-47.
39. Метлов Л.С. Термодинамическая теория плавления ультратонкой пленки смазки / Л.С. Метлов, А.В. Хоменко, Я.А. Ляшенко // Фізико-хімічні основи формування і модифікації мікро- та наноструктур: Збірник наукових праць Міжнародної наукової конференції, 8-10 жовтня 2008 р. - Харків, 2008. - С. 206-209.
40. Хоменко А.В. Синергетическая кинетика граничного трения / А.В. Хоменко, Н.В. Проданов // Вісник Сумського державного університету. Серія Фізика, математика, механіка. - 2006. - № 6(90). - С. 74-84.

41. Хоменко А.В. Синергетическая кинетика плавления ультратонкой пленки смазки / А.В. Хоменко, Н.В. Проданов // Физика и техника высоких давлений. - 2006. - Т. 16, № 4. - С. 164-179.
42. Хоменко А.В. Гистерезисные явления при плавлении ультратонкой пленки смазки / А.В. Хоменко, Я.А. Ляшенко // Физика твердого тела. - 2007. - Т. 49, вып. 5. - С. 886-890.
43. Khomenko A.V. Hysteresis phenomena at ultrathin lubricant film melting in the case of first-order phase transition / A.V. Khomenko, I.A. Lyashenko // Physics Letters A. - 2007. - Vol. 366, № 1-2. - P. 165-173.
44. Хоменко О.В. Фазова динаміка тонкої плівки мастила між твердими поверхнями при деформаційному дефекті модуля зсуву / О.В. Хоменко, Я.О. Ляшенко // Журнал фізичних досліджень. - 2007. - Т. 11, № 3. - С. 268-278.
45. Khomenko A.V. Synergetics of boundary friction / A.V. Khomenko // Statistical Physics 2006: Theory and Applications: International conference, 12-15 September 2006: abstracts. - Kharkiv, 2006. - P. 152.
46. Khomenko A.V. Temperature dependence effect of viscosity on ultrathin lubricant film melting / A.V. Khomenko, I.A. Lyashenko // Condensed Matter Physics. - 2006. - Vol. 9, № 4(48). - P. 695-702.
47. Khomenko A.V. Noise influence on solid-liquid transition of ultrathin lubricant film / A.V. Khomenko // Physics Letters A. - 2004. - Vol. 329, № 1-2. - P. 140-147.
48. Khomenko A.V. Synergetics of friction and boundary lubrication / A.V. Khomenko // XVII International School-Seminar "Spectroscopy of molecules and crystals". Beregove, Crimea, 20-26 September 2005: abstracts. - Kyiv, 2005. - P. 153.
49. Olemskoi A.I. Self-organized criticality within fractional Lorenz scheme / A.I. Olemskoi, A.V. Khomenko, D.O. Kharchenko // Physica A. - 2003. - Vol. 323. - P. 263-293.
50. Хоменко А.В. Плавление ультратонкой пленки смазки за счет диссипативно-

- го разогрева поверхностей трения / А.В. Хоменко, Я.А. Ляшенко // Журнал технической физики. - 2007. - Т. 77, вып. 9. - С. 137-140.
51. Хоменко А.В. Стохастическая теория прерывистого режима плавления ультратонкой пленки смазки / А.В. Хоменко, Я.А. Ляшенко // Журнал технической физики. - 2005. - Т. 75, № 11. - С. 17-25.
 52. Хоменко А.В. Фазовая кинетика внутреннего трения ультратонкой пленки смазки / А.В. Хоменко, Я.А. Ляшенко // Вісник Сумського державного університету. Серія Фізика, математика, механіка. - 2005. - № 8(80). - С. 68-77.
 53. Хоменко А.В. Влияние флуктуаций температуры поверхностей трения на динамическую фазовую диаграмму / А.В. Хоменко // Вісник Сумського державного університету. Серія Фізика, математика, механіка. - 2004. - № 10(69). - С. 15-28.
 54. Хоменко А.В. Влияние корреляций температуры на самоподобное поведение ультратонкой пленки смазки / А.В. Хоменко, Я.А. Ляшенко // Вісник Сумського державного університету. Серія Фізика, математика, механіка. - 2005. - № 4(76). - С. 70-87.
 55. Хоменко А.В. Влияние коррелированных флуктуаций температуры на фазовую динамику ультратонкой пленки смазки / А.В. Хоменко // Журнал технической физики. - 2007. - Т. 77, № 3. - С. 29-37.
 56. Khomenko A.V. Influence of temperature correlations on phase kinetics of boundary friction / A.V. Khomenko, I.A. Lyashenko // Вісник Львівського університету. Серія фізична. - 2007. - вип. 40. - С. 71-85.
 57. Khomenko A.V. Phase dynamics and kinetics of thin lubricant film driven by correlated temperature fluctuations / A.V. Khomenko, I.A. Lyashenko // Fluctuation and Noise Letters. - 2007. - Vol. 7, № 2. - P. L111-L133.
 58. Khomenko A.V. Influence of temperature correlations on phase dynamics and kinetics of boundary friction / A.V. Khomenko // ЕВРИКА-2005: Міжнародна конференція студентів і молодих вчених з теоретичної та експериментальної фізики, 24-26 травня 2005 р.: тези доповідей. - Львів, 2005. - С. 32.

59. Khomenko A.V. Synergetics of phase dynamics of ultrathin lubricant film / A.V. Khomenko // Statistical Physics 2005: Modern Problems and New Applications: International conference, 28-30 August 2005: abstracts. - Lviv, 2005. - P. 102.
60. Хоменко А.В. Фазовая динамика и кинетика интенсивной пластической деформации / А.В. Хоменко, Я.А. Ляшенко, Л.С. Метлов // Металлофизика и новейшие технологии. - 2008. - Т. 30, № 6. - С. 859-872.
61. Хоменко А.В. Термодинамика интенсивной пластической деформации с учетом шума / А.В. Хоменко, Я.А. Ляшенко, Л.С. Метлов // Вісник Сумського державного університету. Серія Фізика, математика, механіка. - 2008. - № 1. - С. 5-21.
62. Khomenko A.V. Noise effect on thermodynamics of fragmentation at severe plastic deformation / A.V. Khomenko, I.A. Lyashenko, L.S. Metlov // Functional Materials - ICFM'2007: International conference. Crimea, Partenit, 1 - 6 october 2007. - Simferopol, 2007. - P. 279.
63. Олемской А.И. Синергетика пластической деформации (обзор) / А.И. Олемской, А.В. Хоменко // Успехи физики металлов. - 2001. - Т. 2, № 3. - С. 189-263.
64. Olemskoi A.I. Explosive crystallization of ultradisperse amorphous film / A.I. Olemskoi, A.V. Khomenko, V.P. Koverda // Physica A. - 2000. - Vol. 284, № 1-4. - P. 79-96.
65. Olemskoi A.I. Theory of explosive crystallization for ultradisperse amorphous film / A.I. Olemskoi, A.V. Khomenko // Middle European Cooperation in Statistical Physics. Lutherstadt Wittenberg, Germany, 8-10 March 1999. - Lutherstadt Wittenberg, Germany, 1999. - P. 29.
66. Olemskoi A.I. Field theory of self-organization / A.I. Olemskoi, A.V. Khomenko, D.A. Olemskoi // Physica A. - 2004. - Vol. 332. - P. 185-206.
67. Olemskoi A.I. Supersymmetric theory of self-organizing system / A.I. Olemskoi, A.V. Khomenko // XVI International School-Seminar "Spectroscopy of

- molecules and crystals". Sevastopol, 25 May - 1 June 2003: abstracts. - Kyiv, 2003. - P. 55.
68. Хоменко А.В. Синергетический фазовый переход второго рода с комплексным параметром порядка / А.В. Хоменко // Вісник Сумського державного університету. Серія Фізика, математика, механіка. - 2004. - № 8(67). - С. 5-15.
69. Olemskoi A.I. Synergetic theory for a jamming transition in traffic flow / A.I. Olemskoi, A.V. Khomenko // Physical Review E. - 2001. - Vol. 63, № 3. - P. 036116(4).
70. Хоменко А.В. Синергетическая теория перехода между режимами транспортного потока / А.В. Хоменко, О.В. Ющенко // Вісник Сумського державного університету. Серія Фізика, математика, механіка. - 2000. - № 1(17). - С. 20-26.
71. Олемской А.И. О возбужденном состоянии границы зерна в нано- и субмикрорекристаллах / А.И. Олемской, Р.З. Валиев, А.В. Хоменко // Металлофизика и новейшие технологии. - 1999. - Т. 21, № 4. - С. 43-58.
72. Olemskoi A.I. Field theory of crystal defect structure // Proceedings of the NATO Advanced Study Institute on Thermodynamics, Microstructures and Plasticity: articles / A.I. Olemskoi, A.V. Khomenko; eds. A. Finel, D. Maziere, M. Veron. - Dordrecht: Kluwer Academic Publishers. - 2003. - P. 363-373.
73. Van Alsten John. Molecular tribometry of ultrathin liquid films / John Van Alsten, Steve Granick // Physical Review Letters. - 1988. - Vol. 61, № 22-28. - P. 2570-2573.
74. Тюрин Ю.Н. Влияние дуплексной обработки на свойства поверхности изделий / Ю.Н. Тюрин, А.Д. Погребняк // Трение и износ. - 2002. - Т. 23, № 2. - С. 207-214.
75. Carlson J.M. Constitutive relation for the friction between lubricated surfaces / J.M. Carlson, A.A. Batista // Physical Review E. - 1996. - Vol. 53, № 4. - P. 4153-4165.
76. Aranson I.S. Stick-slip friction and nucleation dynamics of ultra-thin liquid fi-

- lms / I.S. Aranson, L.S. Tsimring, V.M. Vinokur // *Physical Review B*. - 2002. - Vol. 65, № 12. - P. 125402 (7).
77. Stevens M.J. Shear melting of colloids: a nonequilibrium phase diagram / M.J. Stevens, M.O. Robbins, J.F. Belak // *Physical Review Letters*. - 1991. - Vol. 66, № 23. - P. 3004-3007.
78. Thompson P.A. Shear flow near solids: Epitaxial order and flow boundary conditions / P.A. Thompson, M.O. Robbins // *Physical Review A*. - 1990. - Vol. 41, № 12. - P. 6830-6837.
79. Thompson P.A. Origin of stick-slip motion in boundary lubrication / P.A. Thompson, M.O. Robbins // *Science*. - 1990. - Vol. 250, № 4982. - P. 792-794.
80. Interfacial alkane films / T.K. Xia, Jian Ouyang, M.W. Ribarsky, Uzi Landman // *Physical Review Letters*. - 1992. - Vol. 69, № 13. - P. 1967-1970.
81. Braun O.M. Nanotribology: Microscopic mechanisms of friction / O.M. Braun, A.G. Naumovets // *Surface Science Reports*. - 2006. - Vol. 60. - P. 79-158.
82. Filippov A.E. Confined molecules under shear: from a microscopic description to phenomenology / A.E. Filippov, J. Klafter, M. Urbakh // *Physical Review Letters*. - 2001. - Vol. 87, № 27. - P. 275506 (4).
83. Chemical control of friction. Mixed lubricant monolayers / O.K. Dudko, A. Filippov, J. Klafter, M. Urbakh // *Tribology Letters*. - 2002. - Vol. 12, № 4. - P. 217-227.
84. Filippov A.E. Friction through dynamical formation and rupture of molecular bonds / A.E. Filippov, J. Klafter, M. Urbakh // *Physical Review Letters*. - 2004. - Vol. 92, № 13. - P. 135503 (4).
85. Thompson P.A. Phase transitions and universal dynamics in confined films / P.A. Thompson, G.S. Grest, M.O. Robbins // *Physical Review Letters*. - 1992. - Vol. 68, № 23. - P. 3448-3451.
86. Baumberger T. Physical analysis of the state- and rate dependent friction law. II. Dynamic friction / T. Baumberger, P. Berthoud, C. Caroli // *Physical Review B*. -

1999. - Vol. 60, № 6. - P. 3928-3939.
87. Дедков Г.В. Нанотрибология: экспериментальные факты и теоретические модели / Г.В. Дедков // Успехи физических наук. - 2000. - Т. 170, № 6. - С. 585-618.
88. Tomanek D. Calculation of an atomically modulated friction force in atomic-force microscopy / D. Tomanek, W. Zhong, H. Thomas // Europhysics Letters. - 1991. - Vol. 15. - P. 887-892.
89. Israelachvili J. Adhesion forces between surfaces in liquids and condensable vapours / J. Israelachvili // Surface Science Reports. - 1992. - Vol. 14, № 3. - P. 109-159.
90. Israelachvili J.N. Intermolecular and surface forces / Israelachvili J.N. - [2nd ed.] - London: Academic Press, 1998. - 450 p.
91. Israelachvili J.N. Techniques for direct measurements of forces between surfaces in liquids at the atomic scale / J.N. Israelachvili // Chemtracts: Analytical and Physical Chemistry. - 1989. - Vol. 1. - P. 1-12.
92. Israelachvili J.N. Measurement of forces between two mica surfaces in aqueous electrolyte solutions in the range 0-100 nm / J.N. Israelachvili, G.E. Adams // Journal of Chemical Society. Faraday Trans. I. - 1978. - Vol. 74. - P. 975-1001.
93. Pashley R.M. Hydration forces between mica surfaces in aqueous electrolyte solutions / R.M. Pashley // Journal of Colloid and Interface Science. - 1981. - Vol. 80, № 1. - P. 153-162.
94. Pashley R.M. DLVO and hydration forces between mica surfaces in Li⁺, Na⁺, K⁺ and Cs⁺ electrolyte solutions: A correlation of double-layer and hydration forces with surface cation exchange properties / R.M. Pashley // Journal of Colloid and Interface Science. - 1981. - Vol. 83, № 2. - P. 531-546.
95. Horn R.G. Surface forces and viscosity of water measured between silica sheets / R.G. Horn, D.T. Smith, W. Haller // Chemical Physics Letters. - 1989. - Vol. 162, № 4-5. - P. 404-408.
96. Horn R.G. Direct measurement of surface forces between sapphire crystals in

- aqueous solutions / R.G. Horn, D.R. Clarke, M.T. Clarkson // *Journal of Materials Research*. - 1988. - Vol. 3, № 3. - P. 413-416.
97. Ploehn H.J. Interactions between colloidal particles and soluble polymer / H.J. Ploehn, W.B. Russel // *Advances in Chemical Engineering*. - 1990. - Vol. 15. - P. 137-228.
98. Israelachvili J.N. Forces between surfaces in liquids / J.N. Israelachvili, P.M. McGuiggan // *Science*. - 1988. - Vol. 241, № 4867. - P. 795-800.
99. Lee C.S. Changing activity of ribonuclease a during adsorption: A molecular explanation / C.S. Lee, G. Belfort // *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*. - 1989. - Vol. 86, № 21. - P. 8392 - 8396.
100. Parker J.L. Measurements of the forces between a metal surface and mica across liquids / J.L. Parker, H.K. Christenson // *Journal of Chemical Physics*. - 1988. - Vol. 88, № 12. - P. 8013-8014.
101. Rabinowicz E. Friction and wear of materials / Rabinowicz E. - [2nd ed.] - New York, London: John Wiley, 1995. - 336 p.
102. Carlson J.M. Mechanical model of an earthquake fault / J.M. Carlson, J.S. Langer // *Physical Review A*. - 1989. - Vol. 40, № 11. - P. 6470-6484.
103. Robbins M.O. Critical velocity of stick-slip motion / M.O. Robbins, P.A. Thompson // *Science*. - 1991. - Vol. 253, № 5022. - P. 916.
104. Luan B. Effect of inertia and elasticity on stick-slip motion / B. Luan, O.M. Robbins // *Physical Review Letters*. - 2004. - Vol. 93, № 3. - P. 036105(4).
105. Granick S. Motions and relaxations of confined liquids / S. Granick // *Science*. - 1991. - Vol. 253. - P. 1374-1379.
106. Ma W.-J. A molecular dynamics study of freezing in a confined geometry / W.-J. Ma, J.R. Banavar, J. Koplik // *Journal of Chemical Physics*. - 1992. - Vol. 97, № 1. - P. 485-493.
107. Чувильдеев В.Н. Неравновесные границы зерен в металлах. Теория и приложения / Чувильдеев В.Н. - М.: Физматлит, 2004. - 304 с.

108. Avalanche behavior in yield stress fluids / Philippe Coussot, Q.D. Nguyen, H.T. Huynh, Daniel Bonn // Physical Review Letters. - 2002. - Vol. 88, № 17. - P. 175501 (4).
109. Coexistence of liquid and solid phases in flowing soft-glassy materials / P. Coussot, J.S. Raynaud, F. Bertrand [et al.] // Physical Review Letters. - 2002. - Vol. 88, № 21. - P. 218301 (4).
110. Ландау Л.Д. Теоретическая физика: учебное пособие: в 10 т. / Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. - М.: Наука, 1995. - Т. 5: Статистическая физика. Ч.1. Изд. 4. - 1995. - 608 с.
111. Persson B.N.J. Theory of friction and boundary lubrication / B.N.J. Persson // Physical Review B. - 1993. - Vol. 48, № 24. - P. 18140-18158.
112. Pipkin A.C. Lectures in viscoelastic theory / Pipkin. A.C. - New York: Springer-Verlag, 1972. - 180 p.
113. Попов В.Л. Термодинамика и кинетика плавления сдвигом тонкого слоя смазки, заключенного между твердыми телами / В.Л. Попов // Журнал технической физики. - 2001. - Т. 71, № 5. - С. 100-110.
114. Persson B.N.J. Theory of friction: the role of elasticity in boundary lubrication / B.N.J. Persson // Physical Review B. - 1994. - Vol. 50, № 7. - P. 4771-4786.
115. Олемской А.И. Теория аморфного состояния / А.И. Олемской, Е.А. Торопов // Физика металлов и металловедение. - 1991. - № 9. - С. 5-29.
116. Havranek A. Glass transition in inorganic glasses, polymers, and crystals / A. Havranek, M. Marvan // Ferroelectrics. - 1996. - Vol. 176. - P. 25-32.
117. Jackle J. Models of the glass transition / J. Jackle // Reports on Progress in Physics. - 1986. - Vol. 49, № 2. - P. 171-231.
118. Tuning friction with noise and disorder / Y. Braiman, H.G.E. Hentschel, F. Family [et al.] // Physical Review E. - 1999. - Vol. 59, № 5. - P. R4737-R4740.
119. Sokoloff J.B. Effects of defects on the friction between film and substrate in a microbalance experiment / J.B. Sokoloff // Physical Review B. - 1995. - Vol. 51, № 21. - P. 15573-15574.

120. Kawaguchi T. Static and dynamic properties of frictional phenomena in a one-dimensional system with randomness / T. Kawaguchi, H. Matsukawa // *Physical Review B*. - 1997. - Vol. 56, № 7. - P. 4261-4265.
121. Валиев Р.З. Наноструктурные материалы, полученные интенсивной пластической деформацией / Р.З. Валиев, И.В. Александров. - М.: Логос, 2000. - 272 с.
122. Особенности низкотемпературной рекристаллизации никеля и меди / Н.А. Смирнова, В.И. Левит, В.П. Пилюгин [и др.] // *Физика металлов и металловедение*. - 1986. - Т. 62, № 3. - С. 566-570.
123. Valiev R.Z. Plastic deformation of alloys with submicro-grained structure / R.Z. Valiev, N.A. Krasilnikov, N.K. Tsenev // *Materials Science and Engineering A*. - 1991. - Vol. 137. - P. 35-40.
124. Валиев Р.З. Структура и свойства металлических материалов с субмикроструктурной структурой / Р.З. Валиев, А.В. Корзников, Р.Р. Мулюков // *Физика металлов и металловедение*. - 1992. - № 4. - С. 70-86.
125. Винтовая экструзия - процесс накопления деформаций / [Я.Е. Бейгельзимер, В.Н. Варюхин, Д.В. Орлов, С.Г. Сынков]. - Донецк: ТЕАН, 2003. - 87 с.
126. Гусев А.И. Эффекты нанокристаллического состояния в компактных металлах и соединениях / А.И. Гусев // *Успехи физических наук*. - 1998. - Т. 168, № 1. - С. 55-83.
127. *Физическое металловедение: в 3 т.: [под ред. Р.У. Кана и П. Хаазена; пер. с англ. Б.А. Гнесин, А.П. Жуков, В.П. Коржов, О.Н. Сеньков]. - М.: Металлургия, 1987. - Т. 3: Физико-механические свойства металлов и сплавов. - 1987. - 663 с.*
128. Малыгин Г.А. Пластичность и прочность микро- и нанокристаллических материалов / Г.А. Малыгин // *Физика твердого тела*. - 2007. - Т. 49, № 6. - С. 961-982.
129. Структурные изменения в алюминиевых сплавах при интенсивной пластической деформации / А.А. Мазилкин, Б.Б. Страумал, С.Г. Протасова [и др.] //

- Физика твердого тела. - 2007. - Т. 49, № 5. - С. 824-829.
130. Малыгин Г.А. Анализ деформационного упрочнения кристаллов при больших пластических деформациях / Г.А. Малыгин // Физика твердого тела. - 2001. - Т. 43, № 10. - С. 1832-1838.
131. Beygelzimer J.E. Grain refinement versus voids accumulation during severe plastic deformations of polycrystals: a mathematical simulation / J.E. Beygelzimer // Mechanics of Materials. - 2005. - Vol. 37, № 7. - P. 753-767.
132. Низкотемпературная деформация нанокристаллического ниобия / В.В. Шпейзман, В.И. Николаев, Б.И. Смирнов [и др.] // Физика твердого тела. - 2000. - Т. 42, № 6. - С. 1034-1037.
133. Влияние отжига на свойства стали X18H10T, деформированной квазигидроэкструзией при 77 К / А.С. Кальченко, А.В. Мац, И.М. Неклюдов [и др.] // Металлофизика и новейшие технологии. - 2005. - Т. 27, № 5. - С. 585-593.
134. Малыгин Г.А. Процессы самоорганизации дислокаций и пластичность кристаллов / Г.А. Малыгин // Успехи физических наук. - 1999. - Т. 169, № 9. - С. 979-1010.
135. Малыгин Г.А. Кинетический механизм образования фрагментированных дислокационных структур при больших пластических деформациях / Г.А. Малыгин // Физика твердого тела. - 2002. - Т. 44, № 11. - С. 1979-1986.
136. Лифшиц Е.М. Теоретическая физика: учебное пособие: в 10 т. / Е.М. Лифшиц, Л.П. Питаевский. - М.: Наука, 1979. - Т. 10: Физическая кинетика. - 1979. - 528 с.
137. Ландау Л.Д. Об аномальном поглощении звука вблизи точек фазового перехода второго рода / Л.Д. Ландау, И.М. Халатников // Доклады Академии наук СССР. - 1954. - Т. 96. - С. 469-473.
138. Кацнельсон А.А. Микроскопическая теория неоднородных структур / А.А. Кацнельсон, А.И. Олемской. - М.: Изд-во МГУ, 1987. - 336 с.
139. Барьяхтар В.Г. Теория вязкоупругого перехода бесструктурной конденсированной среды / В.Г. Барьяхтар, А.И. Олемской // Физика твердого тела. -

1991. - Т. 33, № 9. - С. 2705-2710.
140. Качанов Л.М. Основы теории пластичности / Качанов Л.М. - М.: Наука, 1969. - 420 с.
141. Реология: Теория и приложения / Под ред. Ф. Эйриха; [пер. с англ. под общей ред. Ю.Н. Работнова, П.А. Ребиндера]. - М.: Иностр. лит., 1962. - 824 с.
142. Ландау Л.Д. Теоретическая физика: учебное пособие: в 10 т. / Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. - М.: Наука, 1987. - Т. 7: Теория упругости. Изд. 4. - 1987. - 248 с.
143. Олемской А.И. Феноменологические уравнения стеклования жидкости / А.И. Олемской, А.В. Хоменко // Журнал технической физики. - 2000. - Т. 70, вып. 6. - С. 6-9.
144. Олемской А.И. Синергетическая теория стеклования жидкости / А.И. Олемской, А.В. Хоменко // Журнал технической физики. - 2000. - Т. 70, вып. 6. - С. 10-15.
145. Олемской А.И. Феноменологическая теория стеклования жидкости / А.И. Олемской, А.В. Хоменко // Вісник Сумського державного університету. - 1997. - № 1(7). - С. 35-47.
146. Olemskoi A.I. Synergetic theory of a liquid-glass transition / A.I. Olemskoi, A.V. Khomenko // Журнал фізичних досліджень. - 1998. - Т. 2, № 2. - С. 167-174.
147. Stick to slip transition and adhesion of lubricated surfaces in moving contact / G. Reiter, A.L. Demirel, J. Peanasky [et al.] // Journal of Chemical Physics. - 1994. - Vol. 101, № 3. - P. 2606-2615.
148. Demirel A.L. Transition from static to kinetic friction in a model lubricating system / A.L. Demirel, S. Granick // Journal of Chemical Physics. - 1998. - Vol. 109, № 16. - P. 6889-6897.
149. The solid-like state of a confined liquid lubricant: deformation and time effects // NATO Advanced Science Institute Series, Physics of sliding friction: articles / G. Reiter, A.L. Demirel, J. Peanasky [et al.]; eds. B.N.J. Persson, E. Tosatti. -

- Dordrecht: Kluwer, 1995. - P. 119-138.
150. Filippov A.E. Fluctuating field near spinodal / A.E. Filippov / *Physics Letters A*. - 1998. - Vol. 243. - P. 229-235.
151. Андронов А.А. Теория колебаний / А.А. Андронов, А.А. Витт, С.Э. Хайкин. - М.: Наука, 1981. - 568 с.
152. Зельцер А.С. Автоблокировка зародышеобразования и универсальность кинетических явлений при фазовых переходах первого рода / А.С. Зельцер, Т.К. Соболева, А.Э. Филиппов // *Журнал экспериментальной и теоретической физики*. - 1995. - Т. 108, № 1. - С. 356-372.
153. Brener E.A. Frictional shear cracks / E.A. Brener, V.I. Marchenko // *Journal of Experimental and Theoretical Physics Letters*. - 2002. - Vol. 76, № 4. - P. 211-214.
154. Smith E.D. Friction on adsorbed monolayers / E.D. Smith, M.O. Robbins, M. Cieplak // *Physical Review B*. - 1996. - Vol. 54, № 11. - P. 8252-8260.
155. Krim J. Nanotribology of a Kr monolayer: quartz-crystal microbalance study of atomic-scale friction / J. Krim, D.H. Solina, R. Chiarello // *Physical Review Letters*. - 1991. - Vol. 66, № 2. - P. 181-184.
156. Time-resolved studies of stick-slip friction in sheared granular layers / S. Nasuno, A. Kudrolli, A. Bak, J.P. Gollub // *Physical Review E*. - 1998. - Vol. 58, № 2. - P. 2161-2171.
157. Granular shear flow dynamics and forces: Experiment and continuum theory / L. Bocquet, W. Losert, D. Schalk [et al.] // *Physical Review E*. - 2001. - Vol. 65, № 1. - P. 011307 (19).
158. Aranson I.S. Continuum theory of partially fluidized granular flows / I.S. Aranson, L.S. Tsimring // *Physical Review E*. - 2002. - Vol. 65. - P. 061303 (20).
159. Мелвин-Хьюз Э.А. Физическая химия. Ч. 1 / Мелвин-Хьюз Э.А.; [пер. с англ. Е. Еремин и др.]. - М.: Иностран. лит., 1962. - 520 с.
160. Олемской А.И. Теория стохастических систем с сингулярным мультиплика-

- тивным шумом / А.И. Олемской // Успехи физических наук. - 1998. - Т. 168, № 3. - С. 287-321.
161. Торопов Е.А. Влияние шума на характер поведения синергетической системы / Е.А. Торопов, Д.О. Харченко // Известия вузов. Физика. - 1996. - № 4. - С. 75-82.
162. Risken H. The Fokker-Planck equation / Risken H. - Berlin-Heidelberg: Springer, 1989. - 474 p.
163. Romero A.H. First passage time statistics for systems driven by long range correlated gaussian noises / A.H. Romero, J.M. Sancho, K. Lindenberg // Fluctuation and Noise Letters. - 2002. - Vol. 2, № 2. - P. L79-L100.
164. Braun O.M. Traffic jams and hysteresis in driven one-dimensional systems / O.M. Braun, B. Hu, A. Filippov, A. Zeltser // Physical Review E. - 1998. - Vol. 58, № 3. - P. 1311-1324.
165. Гардинер К.В. Стохастические методы в естественных науках / Гардинер К.В.; [пер. с англ. А. Доброславский и др.]. - М.: Мир, 1986. - 528 с.
166. Numerical recipes in C++: the art of scientific computing / [W.H. Press, S.A. Teukolsky, W.T. Vetterling, B.P. Flannery] - [2nd ed.] - New York: Cambridge University Press, 1992. - 972 p.
167. Amit D.J. Field theory, the renormalization group, and critical phenomena / Amit D.J. - New York: McGraw-Hill, Inc., 1978. - 336 p.
168. Khomenko A.V. Jamming transition with fluctuations of characteristic acceleration/braking time / A.V. Khomenko, D.O. Kharchenko, O.V. Yushchenko // Вісник Львівського університету. Серія фізична. - 2004. - вип. 37. - С. 44-56.
169. Shapiro V.E. Systems near a critical point under multiplicative noise and the concept of effective potential / V.E. Shapiro // Physical Review E. - 1993. - Vol. 48, № 1. - P. 109-120.
170. Olemskoi A.I. Phase transitions induced by noise cross-correlations / A.I. Olemskoi, D.O. Kharchenko, I.A. Knyaz' // Physical Review E. - 2005. -

Vol. 71, № 4. - P. 041101 (12).

171. Харченко Д.О. Фазові переходи у стохастичній системі з реактивно-дисипативним режимом / Д.О. Харченко // Український фізичний журнал. - 1999. - Т. 44. № 5. - С. 647-654.
172. Ющенко О.В. Синергетическое представление коллективного поведения сложных систем: дис. ... кандидата физ.-мат. наук: 01.04.02 / Ющенко Ольга Владимировна. - Сумы, 2004. - 147 с.
173. Ван Кампен Н.Г. Стохастические процессы в физике и химии / Ван Кампен Н.Г.; [пер. с англ. Г.А. Хоменко]. - М.: Высшая школа, 1990. - 376 с.
174. Lorenz E.N. Deterministic nonperiodic flow / E.N. Lorenz // Journal of Atmospheric Science. - 1963. - Vol. 20. - P. 130-141.
175. Sparrow C. The Lorenz equations: bifurcations, chaos and strange attractors / Sparrow C. - New-York: Springer-Verlag, 1982. - 269 p.
176. Метлов Л.С. Особенности разрушения квазихрупких тел / Л.С. Метлов, А.Ф. Морозов // Физика и техника высоких давлений. - 2001. - Т. 11, № 2. - С. 93-103.
177. Метлов Л.С. Качественная термодинамическая модель фрагментации твердых тел при интенсивной пластической деформации / Л.С. Метлов // Деформация и разрушение материалов. - 2007. - № 2. - С. 40-43.
178. Метлов Л.С. Фрагментация твердых тел / Л.С. Метлов // Вестник Донецкого университета, Сер. А: Естественные науки. - 2006. - № 1. - С. 269-274.
179. Малыгин Г.А. Самоорганизация дислокаций и локализация скольжения в пластически деформируемых кристаллах / Г.А. Малыгин // Физика твердого тела. - 1995. - Т. 37, № 1. - С. 3-42.
180. Базаров И.П. Термодинамика / Базаров И.П. - М.: Высшая школа, 1991. - 376 с.
181. Метлов Л.С. Предельные структуры ИПД. Температурные аспекты / Л.С. Метлов // Вестник Донецкого университета, Сер. А: Естественные науки. - 2006. - № 2. - С. 169-174.

182. Edwards S.F. The surface statistics of a granular aggregate / S.F. Edwards, D.R. Wilkinson // Proceedings of the Royal Society of London Series A. - 1982. - Vol. 381. - P. 17-31.
183. Mehta A. The dynamics of sand / A. Mehta, G.C. Barker // Reports on Progress in Physics. - 1994. - Vol. 57. - P. 383-416.
184. A model for the dynamics of sandpiles / J.-P. Bouchaud, M.E. Cates, J.R. Prakash, S.F. Edwards // Journal de Physique I (France). - 1994. - Vol. 4, № 10. - P. 1383-1411.
185. Haderer K.P. Dynamical models for granular matter / K.P. Haderer, C. Kuttler // Granular Matter. - 1999. - Vol. 2, № 1 - P. 9-18.
186. Absorbing-state phase transitions in fixed-energy sandpiles / A. Vespignani, R. Dickman, M.A. Muñoz, S. Zapperi // Physical Review E. - 2000. - Vol. 62, № 4. - P. 4564-4582.
187. Dhar D. Exactly solved model of self-organized critical phenomena / D. Dhar, R. Ramaswamy // Physical Review Letters. - 1989. - Vol. 63, № 16. - P. 1659 - 1662.
188. Pietronero L. Renormalization approach to the self-organized critical behavior of sandpile models / L. Pietronero, A. Vespignani, S. Zapperi // Physical Review E. - 1995. - Vol. 51, № 3. - P. 1711-1724.
189. Scaling and universality in avalanches / L.P. Kadanoff, S.R. Nagel, L. Wu, S. Zhu // Physical Review A. - 1989. - Vol. 39, № 12. - P. 6524-6537.
190. Скрипов В.П. Спонтанная кристаллизация переохлажденных жидкостей / В.П. Скрипов, В.П. Коверда. - Москва: Наука, 1984. - 230 с.
191. Александров Л.Н. Кинетика кристаллизации и перекристаллизации полупроводниковых пленок / Александров Л.Н. - Новосибирск: Наука, 1985. - 224 с.
192. Коверда В.П. Метастабильные состояния и фазовый переход жидкость-кристалл в дисперсных системах / В.П. Коверда, В.П. Скрипов // Расплавы. - 1987. - Т. 1, вып. 4. - С. 3-27.
193. Самопроизвольная взрывная кристаллизация ультрадисперсного аморфного

- германия / Н.М. Богданов, В.П. Коверда, В.Н. Скоков [и др.] // Кристаллография. - 1988. - Т. 33, вып. 5. - С. 1251-1257.
194. Kurtze D.A. Stability of incomplete explosive crystal growth / D.A. Kurtze // Physical Review B. - 1986. - Vol. 34, № 3. - P. 1770-1774.
195. Шкловский В.А. Взрывная кристаллизация аморфных веществ / В.А. Шкловский, В.М. Кузьменко // Успехи физических наук. - 1989. - Т. 157, № 2. - С. 311-338.
196. Коверда В.П. Движение кристаллизационной волны в аморфной среде с зародышевыми кристаллами / В.П.Коверда // Журнал технической физики. - 1994. - Т. 64, вып. 3. - С. 62-72.
197. Федер Е. Фракталы / Федер Е.; [пер. с англ. Ю.А. Данилова, А. Шукурова] - М.: Мир, 1991. - 260 с.
198. Olemskoi A.I. Fractals in condensed matter physics / A.I. Olemskoi; [ed. I.M. Khalatnikov] // Physics Reviews. - 1995. - Vol. 18, Part 1. - P. 1-173.
199. Rammal R. Ultrametricity for physicist / R. Rammal, G. Toulouse, M.A. Vilaroso // Reviews of Modern Physics. - 1986. - Т. 58, № 3. - P. 765-778.
200. Olemskoi A.I. Theory of hierarchical coupling / A.I. Olemskoi, A.D. Kiselev // Physics Letters A. - 1998. - Vol. 247. - P. 221-226.
201. Михайлова Ю.В. Кинетика образования пор из пересыщенного раствора вакансий / Ю.В. Михайлова, Л.А. Максимов // Журнал экспериментальной и теоретической физики. - 1970. - Т. 59, вып. 10. - С. 1368-1377.
202. Гинзбург С.Л. Необратимые явления в спиновых стеклах / Гинзбург С.Л. - М.: Наука, 1989. - 152 с.
203. Chowdhury D. Statistical physics of vehicular traffic and some related systems / D. Chowdhury, L. Santen, A. Schadschneider // Physics Reports. - 2000. - Vol. 329, № 4-6. - P. 199-329.
204. Olemskoi A.I. Supersymmetric field theory of non-equilibrium thermodynamic system / A.I. Olemskoi, V.A. Brazhnyi // Physica A. - 1999. - Vol. 273, № 3-4. - P. 271-303.

205. Kurchan J. Supersymmetry in spin glass dynamics / J. Kurchan // Journal de Physique I. - 1992. - Vol. 2, № 7. - P. 1333-1352.
206. Haken H. Laser light dynamics / Haken H. - Amsterdam: North-Holland Phys. Publishing, 1985. - 354 p.
207. Гинзбург С.Л. Уравнение для необратимого отклика в спиновых стеклах / С.Л. Гинзбург // Журнал экспериментальной и теоретической физики. - 1983. - Т. 85, № 6(12). - С. 2171-2184.
208. Olemskoi A.I. The theory of spatiotemporal pattern in nonequilibrium systems / A.I.Olemskoi, V.F.Klepikov // Physics Reports. - 2000. - Vol. 338, № 6. - P. 571-677.
209. Kiselev A.D. Symmetry breaking and bifurcations in complex Lorenz model / A.D. Kiselev // Журнал фізичних досліджень. - 1998. - Т. 2, № 1. - С. 30 - 37.
210. Experimental evidence of subharmonic bifurcations, multistability, and turbulence in a Q-switched gas laser / F.T. Arrecchi, R. Meucci, G. Puccioni, J. Tredicce // Physical Review Letters. - 1982. - Vol. 49, № 17. - P. 1217-1220.
211. Nagatani T. Thermodynamic theory for jamming transition in traffic flow / T. Nagatani // Physical Review E. - 1998. - Vol. 53, № 4. - P. 4271-4276.
212. Dynamical model of traffic congestion and numerical simulation / M. Bando, K. Hasebe, A. Nakayama [et al.] // Physical Review E. - 1995. - Vol. 51, № 2. - P. 1035-1042.
213. О физической ширине межкристаллитных границ / Р.З. Валиев, Р.Р. Мулюков, В.В. Овчинников [и др.] // Металлофизика. - 1990. - Т. 12, № 5. - С. 124-126.
214. Займан Дж. Принципы теории твердого тела / Займан Дж. - М.: Мир, 1974. - 472 с.
215. Рыбин В.В. Большие пластические деформации и разрушение металлов / Рыбин В.В. - М.: Металлургия, 1986. - 224 с.
216. Дисклинация и ротационная деформация твердых тел: [сб. научн. трудов / под ред. А.Е. Романова]. - Ленинград: ФТИ им. А.Ф. Иоффе АН СССР, 1990. -

226 с.

217. Физико-химическое состояние покрытия из нержавеющей стали SUS316L, нанесенного на подложку из малоуглеродистой стали SS400 / А.Д. Погребняк, О.П. Кульменьева, В.С. Кшнякин [и др.] // Физика металлов и металловедение. - 2004. - Т. 97, № 5. - С. 1-9.
218. Diffusion and related phenomena in bulk nanostructured material / M.D. Bary, Yu.R. Kolobov, I.A. Ovid'ko [et al.] // Reviews on Advanced Materials Science. - 2001. - № 2. - P. 1 - 43.
219. Microstructures and hardness of ultrafine-grained Ni3Al / J. Languillaume, F. Chmelik, G. Kapelski [et al.] // Acta Metallurgica et Materiala. - 1993. - Vol. 41, № 10. - P. 2953-2962.
220. Physical Metallurgy / Eds. P. Haasen, B. L. Mordike. - [3 rd.] - Cambridge, New York, Melbourne: Cambridge University Press, 1996. - 415 p.
221. Birringer R. Encyclopedia of material science and engineering. Suppl. Vol.1. / R. Birringer, H. Gleiter; [ed. R.W. Cahn]. - Oxford: Pergamon Press, 1988. - P. 339-349.
222. Олемской А.И. Эволюция дефектной структуры твердого тела в процессе пластической деформации / А.И. Олемской, И.А. Скляр // Успехи физических наук. - 1992. - Т. 162, № 6. - С. 29-79.
223. Қосевич А.М. Физическая механика реальных кристаллов / Қосевич А.М. - Киев: Наукова Думка, 1981. - 328 с.
224. Олемской А.И. О негуковском характере упругого поля в нано- и субмикрокристаллах / А.И. Олемской // Известия вузов. Физика. - 1994. - № 4. - С. 119-121.
225. Олемской А.И. Перестойка конденсированного состояния атомов в условиях интенсивного внешнего воздействия / А.И. Олемской, В.А. Петрунин // Известия вузов. Физика. - 1987. - № 1. - С. 82-121.
226. Хорстхемке В. Индуцированные шумом переходы: Теория и применение в физике, химии и биологии / В. Хорстхемке, Р. Лефевр; [пер. с англ. Ю.А. Данилов,

- В.И. Емельянов]. - М.: Мир, 1987. - 400 с.
227. Кривоглаз М.А. Гетерогенные состояния вырожденных полупроводников в области фазового перехода первого рода / М.А. Кривоглаз, А.И. Карасевский // Журнал экспериментальной и теоретической физики. - 1975. - Т. 69, вып. 7. - С. 297-310.
228. Олемской А.И. Исследование гетерогенного состояния вырожденных полупроводников с легко меняющимся внутренним параметром методом Гинзбурга-Ландау / А.И. Олемской // Физика и техника полупроводников. - 1979. - Т. 13, № 11. - С. 2120-2128.
229. Olemskoi A.I. Axiomatic theory of self-organizing system / A.I. Olemskoi // Physica A. - 2002. - Vol. 310. - P. 223-233.

Приложение А

Определение связи синергетической системы Лоренца с полевыми уравнениями

Для придания полевым уравнениям (5.111) – (5.114) вида синергетической системы (5.103) – (5.105) умножим (5.113) на $\bar{\psi}$ слева, а (5.114) на ψ справа и сложим результаты. Тогда для величин

$$S = \bar{\psi}\psi, \quad \mathbf{j} = (\nabla\bar{\psi})\psi - \bar{\psi}\nabla\psi \quad (\text{A.1})$$

получаем уравнение непрерывности $\dot{S} + \nabla\mathbf{j} = 0$, которое, очевидно, выражает закон сохранения энтропии для консервативных систем; комбинации (А.1) грассмановых полей определяют энтропию S и ее поток \mathbf{j} . Характерно, что уравнения (5.113), (5.114) для грассманово сопряженных полей ψ , $\bar{\psi}$ 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 ψ , $\bar{\psi}$ это условие не выполняется: согласно (5.113), 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 (5.113), (5.114), которое отражает макроскопическую необратимость времени. С этой целью введем в правую часть (5.113) коэффициент $1 + \varepsilon$, который определяется параметром рассогласования $\varepsilon \ll 1$, обеспечивающим необратимость времени в уравнении баланса энтропии (А.3):

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

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 (А.2) определяется квадратом отношения времени квантовой флуктуации τ_0 к макроскопическому времени τ_η , на котором изменяется параметр порядка. 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

$$\dot{S} = (\tau_\eta / \tau_S) S_e - \varepsilon V_0''(\eta) S. \quad (\text{A.3})$$

Отсюда в стационарном режиме $\dot{S} = 0$ получаем равенство $S = (\tau_\eta / \varepsilon \tau_S) S_e / V_0''(\eta)$, которое сводится к виду (5.14) для затравочного потенциала

$$V_0 = \frac{\eta^2}{2} + \frac{\eta^4}{12}. \quad (\text{A.4})$$

Рассмотрим теперь уравнение (5.112) 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 (5.112) следует соотношение

$$\varphi = \frac{V_0'''(\eta) S}{V_0''(\eta) - (\xi/a)^2}, \quad (\text{A.5})$$

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 (А.5) можно опустить слагаемое $-(\xi/a)^2$. Указанное неравенство отвечает адиабатическому условию, которое, однако, связывает не временные, а пространственные масштабы.

В адиабатическом приближении уравнение (5.112) для амплитуды наиболее вероятной флуктуации $\varphi(t)$ принимает вид

$$\dot{\varphi} = V_0''(\eta)\varphi - V_0'''(\eta)S. \quad (\text{A.6})$$

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

$$S_c \equiv (\varepsilon/2)(\tau_S/\tau_\eta). \quad (\text{A.7})$$

Рассмотрим наконец уравнение (5.111) для поля параметра порядка $\eta(\mathbf{r}, t)$. Подставляя в него зависимость $\varphi(\eta)$, приходим к уравнению Гинзбурга–Ландау–Халатникова

$$\dot{\eta} - \nabla^2\eta = -\frac{\partial\tilde{V}}{\partial\eta}, \quad \tilde{V}(\eta) \equiv V_0(\eta) + \frac{\sigma}{2V_0''(\eta)}, \quad (\text{A.8})$$

которое отличается от (2.26) градиентным слагаемым. Для функции (A.4) синергетический потенциал принимает вид

$$\tilde{V}(\eta) = V_1(\eta) + \frac{\eta^4}{12}, \quad V_1(\eta) \equiv \frac{1}{2} \left[\eta^2 + \frac{\sigma}{1 + \eta^2} \right]. \quad (\text{A.9})$$

Зависимость $V_1(\eta)$ совпадает с полученной в рамках аксиоматического подхода в [229] и подразд. 1.3.3 в [33], что свидетельствует об эквивалентности изложенных лагранжевых полевых представлений. Отличие (2.27) и (A.9) 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 (5.111) принимает вид

$$\dot{\eta} = f + \varphi. \quad (\text{A.10})$$

Сравнивая (А.10) с (5.103), находим связь

$$h = \eta + f + \varphi \equiv [\eta - V_0'(\eta) + \nabla^2 \eta] + \varphi. \quad (\text{А.11})$$

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 (А.8), (А.6), (А.3) и уравнения Лоренца (5.103) – (5.105) совпадают только по своей структуре. Так, уравнение баланса энтропии (А.3) подобно уравнению (5.105) 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 (5.104) и $-V_0'''(\eta)S$ в (А.6) совпадают в случае затравочного потенциала (А.4) с точностью до знака. И наконец, полевое уравнение (А.8) для параметра порядка отличается от уравнения Ландау–Халатникова (2.26) 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 (5.111) – (5.114) 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 (А.11).

Приложение Б

Упругая энергия гетерофазного зерна

Будем исходить из формулы [138]

$$\epsilon = \frac{1}{2V} \int \int \hat{\mathbf{e}}(\mathbf{r}) : \hat{\lambda}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') : \hat{\mathbf{e}}(\mathbf{r}) \, d\mathbf{r} d\mathbf{r}', \quad (\text{Б.1})$$

определяющей энергию $\epsilon = NE$ в расчете на объем зерна $V = (4\pi/3)R^3$ ($N = V/\Omega$ — число атомов в этом зерне, E — энергия, приходящаяся на каждый из них, $\hat{\lambda}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ — диспергирующий модуль упругости среды, шляпка означает пару декартовых индексов, точка — свертку по паре таких индексов). Упругая составляющая $\hat{\mathbf{e}}(\mathbf{r})$ тензора полной деформации

$$\hat{u} = \frac{1}{2}(\nabla \mathbf{u} + \mathbf{u} \nabla) \quad (\text{Б.2})$$

связана с полем собственной деформации $\hat{\varepsilon}(\mathbf{r})$ равенством

$$\hat{\mathbf{e}}(\mathbf{r}) = \hat{\mathbf{u}}(\mathbf{r}) - \hat{\varepsilon}(\mathbf{r}). \quad (\text{Б.3})$$

При заданном источнике $\hat{\varepsilon}(\mathbf{r})$ равновесное поле смещений $\mathbf{u}(\mathbf{r})$ определяется условием минимума

$$\delta\epsilon/\delta\mathbf{u}(\mathbf{r}) = 0 \quad (\text{Б.4})$$

для функционала (Б.1). Проводя фурье–преобразования

$$\hat{\lambda}_k = \frac{1}{V} \int \hat{\lambda}(\mathbf{r}) \mathbf{e}^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} \, d\mathbf{r}, \quad \mathbf{u}_k = \frac{1}{V} \int \mathbf{u}(\mathbf{r}) \mathbf{e}^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} \, d\mathbf{r}, \quad \hat{\varepsilon}_k = \frac{1}{V} \int \hat{\varepsilon}(\mathbf{r}) \mathbf{e}^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} \, d\mathbf{r}, \quad (\text{Б.5})$$

получаем уравнение равновесия

$$\left(\mathbf{k} \cdot \hat{\lambda}_k \cdot \mathbf{k} \right) \mathbf{u}_k = -i\mathbf{k} \hat{\lambda}_k : \hat{\varepsilon}_k. \quad (\text{Б.6})$$

Решение находится с помощью тензора Грина $\hat{G}_k = k^{-2} \hat{\Omega}_k$, определяемого равенством

$$\mathbf{n} \cdot \hat{\lambda}_k \cdot \mathbf{n} = \hat{\Omega}_k^{-1}, \quad \mathbf{n} = \mathbf{k}/k. \quad (\text{Б.7})$$

Умножая обе части (Б.6) на \hat{G}_k , находим равновесную деформацию

$$\hat{u}_k = \mathbf{n} \hat{\Omega}_k \left(\mathbf{n} \cdot \hat{\lambda}_k : \hat{\varepsilon}_k \right), \quad (\text{Б.8})$$

подстановка которой в (Б.1) с учетом преобразований, обратных (Б.5), дает

$$\epsilon = \frac{V}{2} \sum_{\mathbf{k}} \hat{\varepsilon}_k^* : \hat{\Lambda}_k : \hat{\varepsilon}_k, \quad (\text{Б.9})$$

$$\hat{\Lambda}_k = \hat{\lambda}_k - \left(\hat{\lambda}_k \cdot \mathbf{n} \right) \hat{\Omega}_k \left(\mathbf{n} \cdot \hat{\lambda}_k \right). \quad (\text{Б.10})$$

Формула (Б.10) выражает эффективный упругий модуль $\hat{\Lambda}_k$ через исходный $\hat{\lambda}_k$.

Приведенные формулы применимы к описанию произвольной упругой среды. Для придания им конкретного вида воспользуемся приближением упруго-изотропного континуума, для которого тензор собственной деформации $\hat{\varepsilon}_k = \varepsilon_k \cdot \hat{I}_k$ пропорционален единичному \hat{I} , а уравнение (Б.7) решается в континуальном пределе $\mathbf{k} \rightarrow 0$, где декартовские компоненты функции Грина [142]

$$\Omega_n^{ij} = \frac{1}{G} \left(\delta_{ij} - \frac{n_i n_j}{2(1-\nu)} \right), \quad (\text{Б.11})$$

G, ν — модуль сдвига и коэффициент Пуассона. В результате упругая энергия (Б.9) принимает вид

$$\epsilon = \frac{V}{2} \Lambda \sum_{\mathbf{k}} |\varepsilon_{\mathbf{k}}|^2, \quad \Lambda = 4G(1+\nu)/(1-\nu). \quad (\text{Б.12})$$

Используем полученный результат применительно к гетерофазной модели зерна (рис. 6.3б). Здесь пространственная зависимость поля деформации имеет ступенчатый вид:

$$\varepsilon(\mathbf{r}) = \begin{cases} 0 & \text{при } 0 < r < R - d, \\ \varepsilon & \text{при } R - d < r < R, \end{cases} \quad (\text{Б.13})$$

где d — толщина сферической прослойки, занимаемой зернограничной фазой;

R — радиус зерна;

ε — деформация зернограничной фазы, задаваемая формулой (6.10).

Подставляя (Б.13) в последнее равенство (Б.5), а результат в (Б.12), для упругой энергии $E = \epsilon/N$, приходящейся на один атом, получаем

$$E = (\Lambda/2) \Omega \varepsilon^2 p, \quad (\text{Б.14})$$

где эффективный упругий модуль Λ задается второй формулой (Б.12);

Ω — атомный объем;

p — объемная доля зернограничной фазы, определяемая соотношением (6.11).