

ФЛЮКТУАЦІЙНІ ФАЗОВІ ПЕРЕХОДИ В СИНЕРГЕТИЧНІЙ СИСТЕМІ ДЕФЕКТІВ

Д. О. Харченко, І. О. Князь

Сумський державний університет

вул. Римського-Корсакова, 2, Суми, 40007, Україна

(Отримано 19 травня 2004 р.; в остаточному вигляді — 16 листопада 2004 р.)

Представлено теоретичний підхід до опису процесу перебудови дефектної структури при пластичній деформації. Запропоновано феноменологічну модель, яка дає змогу врахувати взаємне перетворення рухливих дислокацій і точкових дефектів, зв'язок між густиною дислокацій та макроскопічними характеристиками деформації, просторову неоднорідність розподілу точкових дефектів у кристалі та флюктуації деформації й густини дефектів. На основі кінетичного підходу показано, що кореляція між флюктуаціями може приводити до виникнення проміжних метастабільних фаз, що визначають появу дислокаційних кластерів з переорієнтованим вектором Бюргерса.

Ключові слова: фазові переходи, система дефектів, кореляція шумів.

PACS number(s): 03.65.Nk, 21.45.+v, 21.80.+a

I. ВСТУП

Відомо, що пластична деформація матеріалів є складним багатостадійним процесом, який відбувається на різних рівнях, кожний з яких характеризується певним типом структурного елемента [1–3]. У реальних матеріалах процес пластичної деформації супроводжується виникненням взаємозв'язку між елементами різних рівнів, який за певних умов приводить до виникнення дисипативних структур [4]. Типовим прикладом такої самоорганізації є формування дефектних структур з первісно однорідного матеріалу: слабкорозорієнтована комірчаста структура переходить до фрагментованої. Можливим є виникнення дислокаційних доменів з різнонаправленими векторами Бюргерса. Для опису таких перетворень методи фізики міцності та пластичності не завжди дають очікуваних результатів. Тому для розв'язання цієї задачі застосовуються підходи синергетики, в межах яких опис системи проводиться за колективними модами, що виникають у ході самоорганізації [5]. У процесі [6] показано, що мода, яка визначає когерентне поведіння ансамблю дефектів, задається густиною дислокацій колективної поведінки. Багатий експериментальний матеріал показує, що виникнення нової структури відбувається за принципами фазових переходів першого роду [7, 8]: у матричній фазі виникає зародок нової фази, який, еволюціонує, переводить систему в нову фазу, що стає матричною для іншої. Такий шлях еволюції дефектної структури обговорено в низці праць (див., наприклад, [9, 10]).

Синергетичний підхід дає змогу деформацію з погляду нелінійної динаміки дислокаційного ансамблю. Так, у праці [11] автори запропонували кінетичну модель формування смуги течії, яка інтерпретується як відокремлений фронт збудження густини дислокацій унаслідок початку їх розмноження в певній частині зразка. Модель описує еволюцію густини дислокацій і враховує процеси їхньої анігіляції в дипольні кон-

фігурації та іммобілізацію (стік) на нерухомих дислокаційних комплексах. У межах побудованої моделі автори показали, що на початковій стадії деформації, коли густина стоків незначна, основним типом дислокаційної структури є скупчення дислокацій. Зі збільшенням густини стоків стає можливим формування нового типу субструктури — смуги течії. На жаль, ця модель пояснює природу утворення дислокаційних структур тільки на мікрорівні і не може бути застосована для пояснення локалізації на макромасштабі.

З погляду інтерпретації експериментальних даних, застосовуються моделі опису самоорганізації дефектів через поля напружень та деформацій [12]. У статті [6] розглянуто два окремі випадки: (а) розвиток дислокаційно-вакансійного ансамблю на початковій стадії локалізації деформації при сталих внутрішніх напруженнях; (б) розвинута локалізація з появою когерентного зв'язку між носіями деформації. У першому випадку, у межах мікроскопічних уявлень одержано рівняння дислокаційно-дифузійної кінетики. Другий — має феноменологічний характер і враховує часову залежність деформації та напруги. У праці показано, що при автокаталітичному генеруванні дефектів у полі напружень за певний ефективний час відбувається перехід до когерентного режиму. Втім, представлена модель не враховує неоднорідності розподілу дефектів в об'ємі зразка, що надає їй ідеалізованого характеру. В огляді [13] увагу приділено опису еволюції просторово-часових деформаційних структур у межах уявлень теорії автохвильових процесів. Рівняння еволюції системи враховують дифузію деформації вздовж зразка за рахунок послідовної активації локальних центрів напружень та стохастичні процеси переносу напружень. Показано, що генерація автохвиль пластичної деформації пов'язана з наявністю концентраторів напружень різного масштабу, які виникають у матеріалі при його деформації.

Очевидно, що за для опису якісної перебудови ансамблю дефектів при пластичній деформації мають

бути застосовані комплексні підходи, які враховують не тільки макроскопічні характеристики пластичної деформації, а й мікроскопічні, що відображають взаємодію дефектів під час утворення колективних мод. Окрім того, розглядаючи систему в реальних умовах, такі методи слід узагальнити введенням флюктуаційних чинників у відповідні рівняння динаміки. Як відомо [14, 15], флюктуації можуть суттєво змінити поведінку системи, переводячи її в новий, не досяжний для детерміністичної системи стан. У такому разі моделі, що не враховують флюктуації параметрів, не дають повної картини процесу упорядкування дефектної структури. Наша робота присвячена дослідженню колективних ефектів перебудови дефектної структури у процесі розвинутої пластичної деформації за наявності флюктуацій основних параметрів. У статті сформульовано самоузгоджену феноменологічну модель еволюції дислокаційного ансамблю в полі пластичної деформації, яка враховує дифузію точкових дефектів, флюктуації концентрацій точкових дефектів та деформації. Метою праці є розкрити можливий флюктуаційний механізм формування когерентних структур дефектів у системах, що перебувають під інтенсивним зовнішнім навантаженням.

Структура роботи є такою. Розділ II присвячений висвітленню основних механізмів, що впливають на динаміку дислокаційного ансамблю в полі пластичної деформації. Тут будуються синергетичні рівняння для деформації, напруги густин лінійних та точкових дефектів. Результатом розділу є рівняння для колективної моди дефектів, одержане в межах принципу адіабатичного наближення. Третій розділ подає необхідний теоретичний інструментарій для встановлення стаціонарної картини. Тут, використовуючи метод розкладання за кумулянтами, в межах теорії середнього поля одержано рівняння Фоккера–Планка для функції розподілу колективної моди та записано рівняння самоузгодженості. Розділ IV містить основні результати теоретичного підходу, де з'ясовано поведінку параметра порядку та обговорено фазові діаграми. Ми показали, що переходи між структурними утвореннями відбуваються за принципом фазових переходів першого роду, що узгоджується з експериментальними даними. У п'ятому розділі описано систему за термодинамічною теорією Ландау, де з'ясовано вигляд термодинамічного потенціалу і встановлено ключову роль кореляційних внесків флюктуацій. Останній розділ містить основні результати роботи.

II. МОДЕЛЬ

Для побудови математичної моделі еволюції дефектної структури при пластичній деформації скористаємось найпростішими синергетичними положеннями. Добре відомо [4], що процес пластичної деформації можна подати парю спряжених змінних типу пластичної деформації e та напруги σ , для яких маємо

такі рівняння еволюції:

$$\begin{aligned} \dot{e} &= -\frac{e}{\tau_e} + \frac{\sigma}{\eta}, \\ \dot{\sigma} &= \frac{\sigma_0 - \sigma}{\tau_\sigma} - g\sigma e. \end{aligned} \quad (1)$$

Перше з них є рівнянням Максвелла для в'язкопружного середовища із часом релаксації $\tau_e = \eta/\mu$, що задається в'язкістю зсуву η та модулем зсуву μ [16]. У другому рівнянні напруга релаксує до рівня σ_0 , визначеного зовнішнім навантаженням, за час τ_σ . Другий член описує зменшення напруги завдяки концентрації енергії пластичної деформації та являє негативний зворотний зв'язок з інтенсивністю $g > 0$. Система (1) не враховує колективних властивостей дефектів. Відомо, що при пластичній течії матеріалу встановлюється когерентний зв'язок між дислокаціями, що приводить до виділення колективної моди з амплітудою $d \sim b\sqrt{\rho_{\text{col}}}$ [6], де b – вектор Бюргерса, ρ_{col} – густина дислокацій когерентної поведінки. Така мода суттєво впливає на величину e , а саме, взаємодія точкових та лінійних дефектів прискорює зростання деформації. Тому, за [17], збільшення деформації можна описати включенням до рівняння еволюції деформації позитивного доданка $\kappa_0 c d$, де c – густина точкових дефектів, $\kappa_0 > 0$ – інтенсивність взаємодії дефектів. Тоді для замикання системи рівнянь слід записати рівняння еволюції колективної моди та густини точкових дефектів. В автономному режимі релаксація моди d відбувається за дебаївським законом $\dot{d} = -d/\tau_d$, де τ_d – час релаксації. Окрім того, будуючи еволюційне рівняння для d , слід урахувати генерацію дислокаційних петель шляхом трансформації ансамблю точкових дефектів. Тоді рівняння еволюції густини дислокацій у найпростішому вигляді є таким:

$$\tau_d \dot{d} = -d + \alpha c, \quad (2)$$

де $\alpha > 0$ – інтенсивність генерації. Рівняння еволюції точкових дефектів має враховувати дебаївську релаксацію до стаціонарного значення густини $c(t \rightarrow \infty) = 0$ (вихід нерівноважних вакансій з полоси локалізованої деформації в об'єм зерна) та генерацію точкових дефектів рухливими дислокаціями завдяки наявності деформації. Оскільки еволюція точкових дефектів визначається дифузійним процесом, то, використовуючи закон Фіка, для концентрації точкових дефектів маємо рівняння

$$\tau_c \dot{c} = -c + \beta(e)d + D_c \Delta c, \quad (3)$$

де τ_c – час релаксації концентрації точкових дефектів, β – функція деформації, що є мірою генерації точкових дефектів рухливими дислокаціями. Останній доданок урахує дифузію точкових дефектів у полі пластичної деформації з коефіцієнтом дифузії D_c .

Для подальшого аналізу слід визначити масштаби релаксаційних параметрів τ_e , τ_σ , τ_c і τ_d . Релаксація концентраторів напруги за рахунок перерозподілу дефектів задається дебайвською частотою $\omega_D \sim 10^{13} \text{ с}^{-1}$, висотою бар'єра $Q \sim 1 \text{ eV}$ та температурою з характерним значенням $T \sim 10^{-13} \text{ ерг}$ за формулою Ареніуса $\tau_\sigma \sim \omega_D^{-1} \exp(Q/T)$. При пластичній деформації величина $\tau_e = \eta/\mu$ перевищує масштаб τ_σ . Для характерного часу нелінійного зв'язку g^{-1} маємо такі співвідношення: $g\tau_\sigma < g\tau_e \ll 1$ [6]. Час релаксації дефектної моди $\tau_d \sim \tau_\sigma$, а величина τ_c задається напругою стиснення σ' , що діє на дислокацію поблизу частинки розміром $a \sim 2 \cdot 10^{-7} \text{ см}$, величиною вектора Бюргерса $b = 2.86 \cdot 10^{-8} \text{ см}$, температурою T та коефіцієнтом дифузії $D_c \sim b^2 \omega_D \exp(-H_c/T)$ (де H_c — ентальпія міграції точкових дефектів) за формулою $\tau_c \equiv (ab/D_c) \exp(-\sigma' b^3/T)$. Таким чином, найповільнішою модою буде деформація. У такому разі з другого рівняння системи (1) за умови $\tau_\sigma \dot{\sigma} \simeq 0$ напруга виражається за законом $\sigma \simeq \sigma_0(1 - \tau_\sigma g e)$. Остаточного рівняння еволюції деформації набуває вигляду

$$\tau_e' \dot{e} = e_0 - e + \kappa c d, \quad (4)$$

де $\tau_e' = \tau_e \eta / (\eta + \sigma_0 \tau_e \tau_\sigma g)$, $e_0 = \tau_e' \sigma_0 / \eta$, $\kappa = \kappa_0 \tau_e'$. Таким чином, при пластичній деформації відбувається уповільнена релаксація e із часом τ_e' , залежним від зовнішнього навантаження σ_0 , до стаціонарного значення e_0 .

Одержана модель, що задається рівняннями (2)–(4), містить позитивний зворотний зв'язок, визначений взаємодією дефектів, який є причиною самоорганізації. Для задоволення принципу Ле-Шательє цей позитивний зв'язок повинен компенсуватися негативним зв'язком у рівнянні (3). Для цього покладемо $\beta \cong \beta_0 e_0 - \beta_1 e$, $\beta_0 \geq \beta_1$. У межах наведених положень одержана система (2)–(4) збігається із загальновідомою системою Лоренца, яка використовується для опису ефектів самоорганізації [5]. Побудована модель (2)–(4) обмежується розглядом таких систем, у яких із розвитком локалізованої деформації можливими стають процеси релаксації деформації та напружень, що потребують урахування поведінки ансамблю дефектів. Цей режим спостерігається при великих густинах дефектів, які поводяться колективно та суттєво впливають на пластичну деформацію. Фізичним прикладом таких систем виступають високоміцні сплави з малими виділеннями неметалічної фази, наприклад, сплави на основі Nb та V із високодисперсними частинками ZrO_2 , що перебувають під інтенсивною дією зовнішніх навантажень [18].

Ураховуючи флюктуаційний механізм еволюції точкових дефектів та флюктуації керуючого параметра e_0 , включимо ланжев'єнівські джерела ζ_c , ζ_e до рівнянь (3), (4) у вигляді адитивних шумів з інтенсивностями σ_c^2 , σ_e^2 відповідно. Величина σ_c^2 пов'язується з температурою, при якій відбувається перерозподіл точкових дефектів, а тому відповідний стохастичний процес ζ_c розуміється як внутрішній шум, який виконує лише дезорганізуючу роль. Величина σ_e^2 задає

інтенсивність флюктуацій ζ_e , що виникають у ході навантаження, якщо припустити стохастичність e_0 , а саме: $e_0 \rightarrow e_0(t) = \langle e_0 \rangle + \sigma_e \zeta_e(\mathbf{r}, t)$, де $\langle e_0 \rangle$ — середнє значення навантаження.

Припустимо, що стохастичні сили розподілені за Гауссом із $\langle \zeta_\mu(\mathbf{r}, t) \rangle = 0$ і мають такі кореляційні функції:

$$\langle \zeta_\mu(\mathbf{r}, t) \zeta_\nu(\mathbf{r}', t') \rangle = C_{\mu\nu}(|t - t'|) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad (5)$$

$$\mu, \nu = \{c, e\}.$$

Для реальної фізичної картини характерна наявність флюктуацій з виділеним спектром частот. Найпростішою моделлю таких флюктуацій є процес Орнштайна–Уленбека [14] з кореляційною функцією у вигляді

$$C_{\mu,\nu}(t, t') = \frac{\sigma_\mu \sigma_\nu}{\tau_{\mu\nu}^c} \exp\left(-\frac{|t - t'|}{\tau_{\mu\nu}^c}\right), \quad (6)$$

де $\tau_{\mu\nu}^c$ — час крос-кореляції між двома шумами ζ_μ і ζ_ν , який зводиться до часу автокореляції окремо взятого шуму при $\nu = \mu$.

Оскільки нас цікавить поведінка ансамблю дефектів, то скористаємося адіабатичним наближенням, яке дасть змогу провести аналіз системи за еволюцією швидких мод c і d . Суть синергетичного підходу полягає у визначенні поведінки колективної моди, тому вихідним рівнянням для аналізу буде рівняння еволюції величини d . Ураховуючи повільну зміну деформації, з рівняння (4) отримуємо

$$e \simeq e_0 + \kappa c d + \sigma_e \zeta_e(\mathbf{r}, t). \quad (7)$$

Якщо провести додаткове диференціювання за часом у (2), виразити \dot{c} через c і d з рівняння (3), а c з (2), то одержуємо рівняння еволюції колективної моди у вигляді

$$\tau_c \ddot{d} = -\dot{d} \left(1 + \frac{\tau_c}{\tau_d} + \beta_1 \kappa d^2\right) + \frac{\alpha e_0 (\beta_0 - \beta_1) - 1}{\tau_d} d - \frac{\beta_1 \kappa}{\tau_d} d^3 + \frac{D_c}{\tau_d} \Delta d + \frac{\alpha \beta_1}{\tau_d} d \sigma_e \zeta_e(\mathbf{r}, t) + \frac{\alpha}{\tau_d} \sigma_c \zeta_c(\mathbf{r}, t). \quad (8)$$

Далі ми вводимо часовий масштаб $\tau_0 \sim \sigma_e^2 / \tau_{ee}^c$ дрейфу, пов'язаного з впливом $\zeta_e(t)$, який є значним порівняно з τ_c , що дає змогу ввести малий параметр $\varpi = (\tau_c / \tau_0)^{1/2} \ll 1$. Переходячи до знерозмірених величин $t' = t / \tau_0$, $x \equiv d / d_0$, $\varepsilon \equiv (\alpha e_0 (\beta_0 - \beta_1) - 1) / (\tau_d w)$, $D \equiv D_c / (w \tau_d)$, $\lambda \equiv \beta_1 \kappa d_0^2$, $\mu \equiv 1 + \tau_c / \tau_d$, $\sigma_e' \equiv \sigma_e \alpha \beta_1 / (w \tau_d)$, $\sigma_c' \equiv \sigma_c \alpha / (w \tau_d d_0)$, де введено позначення $w \equiv (\tau_c / \tau_0)^{1/2} \tau_0^{-1}$, $d_0^2 \equiv w \tau_d / (\beta_1 \kappa)$, опускаючи ризик у відповідних змінних та параметрах, замість (8) одержуємо

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} x &= v, \\ \frac{\partial v}{\partial t} &= -\varpi^{-2} \gamma(x) v \\ &+ \varpi^{-1} [f(x) + D\Delta x + g_e(x)\zeta_e(\mathbf{r}, t) + g_c(x)\zeta_c(\mathbf{r}, t)], \end{aligned} \quad (9)$$

де

$$\begin{aligned} \gamma(x) &= \mu + \lambda x^2, \quad f(x) = -\frac{\partial V}{\partial x}, \quad V = -\varepsilon \frac{x^2}{2} + \frac{x^4}{4}, \\ g_e(x) &= \sigma_e x, \quad g_c(x) = \sigma_c. \end{aligned} \quad (10)$$

Функції $g_e(x)$ і $g_c(x)$ позначають амплітуди флюктуацій деформації та концентрації точкових дефектів відповідно. Зазначимо, що флюктуації густини точкових дефектів залишилися адитивними ($g_c(x) = \text{const}$), тоді як флюктуаційна зміна керуючого параметра визначає зовнішній (мультиплікативний) шум. Зауважимо, що мультиплікативний шум зникає при $x \rightarrow 0$, а тому може підтримувати позитивні значення x . Водночас наявність адитивного шуму приводить до переходу величиною x через нульові значення. Тому для розгляду фазових переходів у нашій системі вибираємо простір для x такий, що $x \in (-b_0, b_0)$, де b_0 — границя дифузійного процесу і в термодинамічній границі може бути покладеною $b_0 \rightarrow \infty$. Тоді позитивні та негативні значення x ми асоціюємо з колективною модою, що виникає в різних щодо вектора Бюргерса дислокаційних кластерах. Відзначимо, що одержана система (9) фактично є моделлю руху броунівської частинки в полі x^4 -потенціалу Ландау з адитивним та мультиплікативним шумами.

III. ТЕОРЕТИЧНИЙ АНАЛІЗ

Для подальшого аналізу континуальний простір розбиваємо на однакові домени і в дискретному просторі, замість системи (9), розглядаємо набір стохастичних диференціальних рівнянь для кожного i -го вузла ґратки

$$\begin{aligned} \frac{\partial v_i}{\partial t} &= -\varpi^{-2} \gamma(x_i) v_i + \varpi^{-1} \left[f(x_i) + D \sum_j \hat{D}_{ij} x_j \right. \\ &\left. + g_e(x_i) \zeta_{ei}(t) + g_c(x_i) \zeta_{ci}(t) \right], \end{aligned} \quad (11)$$

де \hat{D}_{ij} є аналогом оператора Лапласа в дискретному просторі:

$$\Delta \rightarrow \sum_j \hat{D}_{ij} = \sum_j \left(\frac{\delta_{nn(i),j}}{2d} - \delta_{ij} \right), \quad (12)$$

тут $nn(i)$ — набір найближчих сусідів вузла i , d — вимірність простору. Оскільки метою задачі є знайти статистичні властивості системи, то основну увагу далі зосереджуємо на відшукуванні стаціонарного розподілу. Для цього скористаємось рівнянням неперервності для мікроскопічної густини ймовірності $\rho(x_i, v_i, t) = \langle \delta(x_i - x_i(t, x_0)) \delta(v_i - v_i(t, v_0)) \rangle$ (усереднення проводимо за початковими умовами $x_{i0} = x_i(t=0)$, $v_{i0} = v_i(t=0)$) у вигляді

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(x_i, v_i, t) = - \left(\frac{\partial}{\partial x_i} \dot{x}_i + \frac{\partial}{\partial v_i} \dot{v}_i \right) \rho(x_i, v_i, t). \quad (13)$$

Шукана одночастинкова функція розподілу подається усередненням за всіма шумами густини $\rho(x_i, v_i, t)$, тобто $P(x_i, v_i, t) = \langle \rho(x_i, v_i, t) \rangle$. Підставляючи часову похідну (9) у рівняння (13) і використовуючи метод розвинення за кумулянтами [19–22], одержуємо рівняння для $P(x_i, v_i, t)$ у вигляді

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} + \varpi^{-2} (\hat{L}_0 + \varpi \hat{L}_1) \right] P(x_i, v_i, t) = \hat{C} P(x_i, v_i, t), \quad (14)$$

де

$$\hat{L}_0 = -\gamma_i \frac{\partial}{\partial v_i} v_i \quad (15)$$

$$\hat{L}_1 = v_i \frac{\partial}{\partial x_i} + \left(f_i + D \sum_j \hat{D}_{ij} x_j \right) \frac{\partial}{\partial v_i},$$

$$\hat{C} = \varpi^{-2} \sum_{\mu, \nu} \hat{\ell}_{\mu i}^{(0)} \sum_{n=0}^{\infty} C_{\mu \nu}^{(n)} \hat{\ell}_{\nu i}^{(n)}, \quad (16)$$

$$\hat{\ell}_{\nu i}^{(0)} = g_{\nu i} \frac{\partial}{\partial v_i}, \quad \hat{\ell}_{\nu i}^{(n)} = [\hat{\ell}_{\nu i}^{(n-1)}, \hat{L}_0 + \varpi \hat{L}_1], \quad (17)$$

де квадратні дужки в (17) визначають комутатор, $\gamma_i = \gamma(x_i)$, $f_i = f(x_i)$, $g_{\nu i} = g_{\nu}(x_i)$. Моменти кореляційної функції визначаємо за формулою

$$C_{\mu \nu}^{(n)} = \frac{1}{n!} \int_0^{\infty} \tau^n C_{\mu \nu}(t, t - \tau) d\tau. \quad (18)$$

З вигляду рівняння (14) робимо висновок, що сумарний шумовий ефект визначається оператором зіткнень (16). Як показано в статті [20] основний внесок у статистичну картину задають члени до другого порядку малости за параметром ϖ в рівнянні (14). Тоді, нехтуючи членами, що мають порядок вищий за ϖ^2 , для оператора \hat{C} отримуємо

$$\begin{aligned} \hat{C} = & \frac{1}{\varpi^2} \sum_{\mu, \nu} \left\{ \left(C_{\mu\nu}^{(0)} - \gamma_i C_{\mu\nu}^{(1)} \right) g_{\mu i} g_{\nu i} \frac{\partial^2}{\partial v_i^2} \right. \\ & \left. + \varpi C_{\mu\nu}^{(1)} \left[g_{\mu i} g_{\nu i} \frac{\partial}{\partial v_i} \frac{\partial}{\partial x_i} - \left[g_{\mu i} \frac{\partial g_{\nu i}}{\partial x_i} + g_{\nu i} \frac{\partial g_{\mu i}}{\partial x_i} \right] \frac{\partial}{\partial v_i} \left(1 + v_i \frac{\partial}{\partial v_i} \right) \right] + O(\varpi^2) \right\}. \end{aligned} \quad (19)$$

Зазначимо, що практичний інтерес становить функція розподілу $P(x, t)$. Для її одержання використовуємо визначення моментів $P_n(x_i, t) = \int v_i^n P(x_i, v_i, t) dv_i$, які дають змогу записати (14) у вигляді рекурентного рівняння

$$\begin{aligned} \varpi^2 \frac{\partial}{\partial t} P_n + n \gamma_i P_n + \varpi \left[\frac{\partial}{\partial x_i} P_{n+1} - n \left(f_i + D \sum_j \hat{D}_{ij} x_j \right) P_{n-1} \right] \\ = \sum_{\mu, \nu} \left\{ n(n-1) \left(C_{\mu\nu}^{(0)} - \gamma_i C_{\mu\nu}^{(1)} \right) g_{\mu i} g_{\nu i} P_{n-2} \right. \\ \left. - \varpi n C_{\mu\nu}^{(1)} \left[g_{\mu i} g_{\nu i} \frac{\partial}{\partial x_i} P_{n-1} + (n-1) \left[g_{\mu i} \frac{\partial g_{\nu i}}{\partial x_i} + g_{\nu i} \frac{\partial g_{\mu i}}{\partial x_i} \right] P_{n-1} \right] + O(\varpi^2) \right\}. \end{aligned} \quad (20)$$

Оскільки $P_0 \equiv P$, то рівняння еволюції розподілу $P(x_i, t)$ визначається за двома першими моментами P_1 і P_2 . У результаті для моментів функції розподілу маємо таку систему рівнянь:

$$\frac{\partial}{\partial t} P(x_i, t) = -\frac{1}{\varpi} \frac{\partial}{\partial x_i} P_1(x_i, t), \quad (21)$$

$$P_1 = \frac{\varpi}{\gamma_i} \left[\left(f_i + D \sum_j \hat{D}_{ij} x_j \right) P - \frac{\partial P_2}{\partial x_i} - \sum_{\mu, \nu} C_{\mu\nu}^{(1)} g_{\mu i} \frac{\partial g_{\nu i} P}{\partial x_i} \right], \quad (22)$$

$$P_2 = \sum_{\mu, \nu} \left(C_{\mu\nu}^{(0)} - \gamma_i C_{\mu\nu}^{(1)} \right) g_{\mu i} g_{\nu i} \gamma_i^{-1} P. \quad (23)$$

За рахунок прямої підстановки можемо записати ефективне рівняння Фоккера–Планка для одночастинкової функції густини ймовірності у формі ряду Крамерса–Мойала [23]

$$\frac{\partial}{\partial t} P(x_i, t) = -\frac{\partial}{\partial x_i} \mathcal{D}^{(1)}(x_i) P(x_i, t) + \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} \mathcal{D}^{(2)}(x_i) P(x_i, t), \quad (24)$$

де коефіцієнти, що визначають ефективний дрейф та дифузію, є такими:

$$\begin{aligned} \mathcal{D}^{(1)} = & \gamma_i^{-1} \left[\left(f_i + D \sum_j \hat{D}_{ij} x_j \right) + \sum_{\mu, \nu} \left(C_{\mu\nu}^{(0)} g_{\mu i} g_{\nu i} \frac{\partial \gamma_i^{-1}}{\partial x_i} + C_{\mu\nu}^{(1)} g_{\mu i} \frac{\partial g_{\nu i}}{\partial x_i} \right) \right], \\ \mathcal{D}^{(2)} = & \gamma_i^{-2} \sum_{\mu, \nu} C_{\mu\nu}^{(0)} g_{\mu i} g_{\nu i}. \end{aligned} \quad (25)$$

Для подальшого розвинення формалізму перейдімо від граткового зображення до континуального. Використовуючи теорію середнього поля, запишімо другий доданок в ефективному дрейфі $\mathcal{D}^{(\infty)}$ у вигляді

$$\sum_j \widehat{D}_{ij} x_j \equiv \left(\frac{1}{2d} \sum_{nn(i)} x_{nn(i)} - x_i \right) \rightarrow (\eta - x), \quad (26)$$

де $\eta = \langle x \rangle$ є ефективним середнім полем і відіграє роль параметра порядку. У такому разі стаціонарний розподіл, як розв'язок стаціонарного рівняння Фокера–Планка, стає залежним від першого моменту, для визначення якого маємо умову самоузгодження

$$\eta = \int_{-\infty}^{\infty} x P(x; \eta) dx \equiv \mathcal{F}(\eta). \quad (27)$$

Відповідно до (24) розподіл $P(x, \eta)$ має квазігіббсівську форму

$$P(x, \eta) = \frac{N^{-1}(\eta)}{\mathcal{D}^{(2)}(x, \eta)} \exp \left(\int^x \frac{\mathcal{D}^{(1)}(x', \eta)}{\mathcal{D}^{(2)}(x', \eta)} dx' \right), \quad (28)$$

де величина N визначається умовою нормування $\int_{-\infty}^{\infty} P(x; \eta) dx = 1$. Рівняння (27) має нетривіальні розв'язки за умови

$$\left. \frac{d\mathcal{F}(\eta)}{d\eta} \right|_{\eta=0} = 1, \quad (29)$$

яка визначає ділянки існування упорядкованої фази, тобто задає фазову діаграму системи. Межі інтегрування в (27) та умові нормування є такими, щоб відобразити наявність негативних значень змінної x .

IV. РЕЗУЛЬТАТИ

Для проведення кількісного аналізу поведінки системи визначено фактичний вигляд кореляційних матриць, дрейфового та дифузійного членів ефективного рівняння Фокера–Планка. Кореляційні матриці записуємо у вигляді

$$\widehat{\mathbf{C}}^{(0)} = \begin{pmatrix} \sigma_c^2 & \sigma_c \sigma_e \\ \sigma_e \sigma_c & \sigma_e^2 \end{pmatrix}, \quad (30)$$

$$\widehat{\mathbf{C}}^{(1)} = \begin{pmatrix} \tau_{ec}^c \sigma_c^2 & \tau_{ec}^c (\sigma_c \sigma_e) \\ \tau_{ec}^c (\sigma_e \sigma_c) & \tau_{ec}^c \sigma_e^2 \end{pmatrix}.$$

Безпосереднє обчислення коефіцієнтів ефективного дрейфу та дифузії дають такі вирази:

$$\mathcal{D}^{(1)} = \frac{x(\varepsilon - x^2) + D(\eta - x) + \sigma_e^2 \tau_{ec}^c x + \sigma_c \sigma_e \tau_{ec}^c}{\mu + \lambda x^2} - \frac{2\lambda x}{(\mu + \lambda x^2)^3} (\sigma_c + \sigma_e x)^2, \quad (31)$$

$$\mathcal{D}^{(2)} = \left(\frac{\sigma_c + \sigma_e x}{\mu + \lambda x^2} \right)^2. \quad (32)$$

Розв'язуючи рівняння самоузгодження (27), врахуємо, що корені $\eta \neq 0$ визначають упорядковану фазу, а корінь $\eta = 0$ — неупорядковану. Фактично, неупорядкована фаза відповідає ситуації, коли дислокації розподілені хаотично. Розгляньмо ідеальну ситуацію, коли кореляція між флюктуаціями відсутня, тобто $C_{ec}^{(0)} = 0$. Розв'язок рівняння (27) подано на рис. 1 (пунктирна крива, яка є симетричною щодо осі ε). З вигляду наведеної залежності можна зробити висновок, що за відсутності кореляційного зв'язку між шумами маємо тривіальну картину порушення симетрії системи зі збільшенням керуючого параметра (деформації) за рахунок наявності ненульового коефіцієнта дифузії D . При цьому перехід до впорядкованого стану відбувається неперервно. У такому разі в системі реалізуються фази з еквівалентними значеннями параметра порядку.

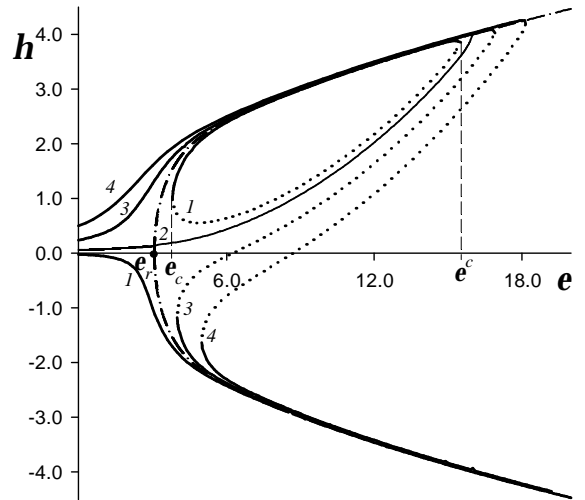


Рис. 1. Залежність параметра порядку η від деформації ε при $\sigma_c^2 = 4.0$, $\sigma_e^2 = 0.01$, $\tau_{ec}^c = 0.1$, $\lambda = 1.0$, $\mu = 1.0$, $D = 1.0$. Криві 1, 2, 3, 4 відповідають $\tau_{ec}^c \rightarrow 0$, $\tau_{ec}^c = 0.8$, 2.5, 5.0 відповідно.

Ситуація якісно змінюється, якщо процеси ζ_c та ζ_e стають статистично залежними. Тож і стохастичне генерування точкових дефектів залежить від дії флюктуацій деформації впродовж характерного часу τ_{ec}^c . По-перше, навіть у випадку $\tau_{ec}^c \rightarrow 0$ у системі відбувається порушення симетрії з появою негативних значень параметра порядку (крива 1 на рис.1). По-друге, збільшення деформації приводить у точці

$\varepsilon = \varepsilon_c$ до біфуркації з утворенням метастабільної фази. Фаза з $\eta > 0$ існує в ділянці значень $[\varepsilon_c, \varepsilon^c]$ і зникає стрибкоподібним чином при $\varepsilon = \varepsilon^c$ (пунктирна крива відповідає ділянці нестабільних станів системи). Така поведінка параметра порядку відповідає ситуації, коли в ході пластичної деформації для певної частини дислокацій відбувається миттєва переорієнтація вектора Бюргерса, якщо $\varepsilon = \varepsilon_c$, при цьому нове утворення існує до певного критичного значення керуючого параметра ε^c . Комбінований ефект крос-кореляції флюктуацій, нелінійності системи та неоднорідності простору приводить до зміни знака параметра порядку при малих деформаціях. Дійсно, збільшення τ_{ec}^c (крива 2) спричиняє зсув значень η у позитивну ділянку, при цьому в точці $\varepsilon = \varepsilon_r$ відбувається зміна знака параметра порядку. З подальшим збільшенням часу крос-кореляції (криві 3,4) утворюється гістерезисна петля. Це означає, що, перебуваючи у стійкій (матричній) фазі, зі збільшенням деформації система переходить в іншу фазу, яка далі стає матричною. Таку картину впорядкування системи дефектів наведено в праці [10].

На рис. 2 подано фазову діаграму в осях $(\tau_{ec}^c, \varepsilon)$, яка демонструє вплив масштабу крос-кореляції на критичні значення ε . Із цієї залежності видно, що при малих значеннях τ_{ec}^c позитивні розв'язки не існують взагалі. Збільшення τ_{ec}^c зумовлює виникнення фази з $\eta > 0$, що відповідає $\eta > 0$, при цьому точка τ_{cr} визначає критичне значення ε , при якому відбувається сполучення ділянок стабільного й метастабільного розв'язків, що відповідає утворенню гістерезисної петлі (крива 2 на рис.1).

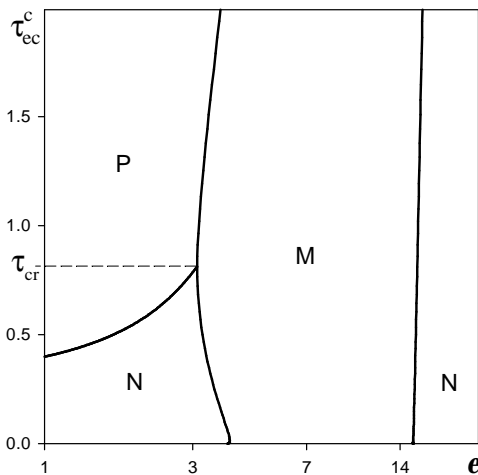


Рис. 2. Фазова діаграма в осях $(\tau_{ec}^c, \varepsilon)$ при $\sigma_c^2 = 4.0$, $\sigma_e^2 = 0.01$, $\tau_{ee}^c = 0.1$, $\lambda = 1.0$, $\mu = 1.0$, $D = 1.0$. Символи P, N та M визначають ділянки з позитивними, негативними значеннями η , та метастабільну фазу, відповідно.

Неоднорідність розподілу густини дефектів у просторі відіграє роль ефективного зовнішнього поля, взаємозв'язок якого з крос-кореляціями спричиняє нетривіальні ефекти реконструкції системи дефектів. Для демонстрації цього факту побудовано фазову ді-

яграму в осях (D, ε) (рис. 3). З рисунка видно, що при досить малих значеннях параметра D утворення метастабільних станів зі збільшенням деформації не можливе навіть при досить великих значеннях часу крос-кореляції. Нетривіальним є факт, що при сильній кореляції між флюктуаціями та малих деформаціях домен позитивних значень параметра порядку існує навіть при $D = 0$.

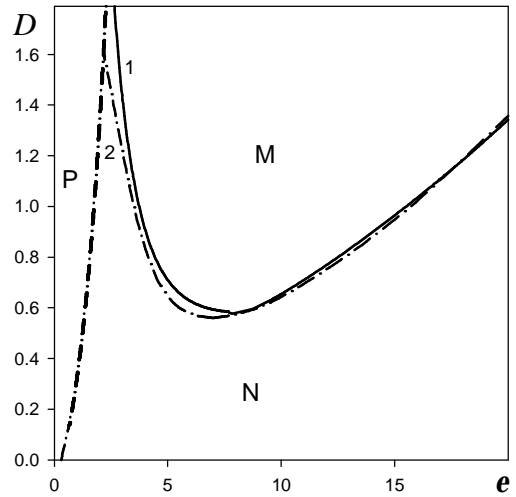


Рис. 3. Фазова діаграма в осях (D, ε) при $\sigma_c^2 = 4.0$, $\sigma_e^2 = 0.01$, $\tau_{ee}^c = 0.1$, $\lambda = 1.0$, $\mu = 1.0$, $D = 1.0$. Крива 1 відповідає випадку $\tau_{ec}^c = 0.1$, крива 2 випадку $\tau_{ec}^c = 0.5$.

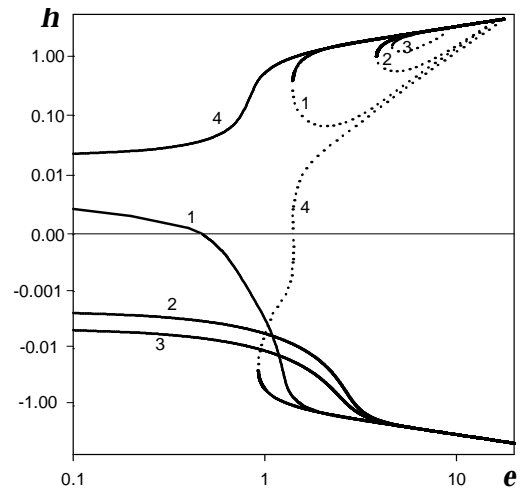


Рис. 4. Залежність параметра порядку η від деформації ε при $\sigma_c^2 = 4.0$, $D = 1.0$, $\tau_{ee}^c = 0.1$, $\tau_{ec}^c = 0.1$. Крива 1 — $\sigma_e^2 = 0.01$, $\lambda = 10.0$, $\mu = 1.0$; крива 2 — $\sigma_e^2 = 0.01$, $\lambda = 1.0$, $\mu = 1.0$; крива 3 — $\sigma_e^2 = 0.04$, $\lambda = 1.0$, $\mu = 1.0$; крива 4 — $\tau_{ee}^c = 0.1$, $\sigma_e^2 = 0.01$, $\lambda = 1.0$, $\mu = 10.0$.

На рис. 4 показано вплив кінетичного коефіцієнта на поведінку параметра порядку. З рисунка видно, що збільшення коефіцієнтів μ та λ збільшує область метастабільних станів. До того ж, при досить великих значеннях μ відбувається сполучення метастабільної та

позитивної фаз з утворенням гістерезисної петлі на залежності $\eta(\varepsilon)$. Зростання інтенсивності мультиплікативного шуму зменшує ділянку метастабільної фази. Таким чином, при великих значеннях σ_c^2 та σ_e^2 вплив крос-кореляції пригнічується флюктуаціями великої інтенсивності.

V. ОБГОВОРЕННЯ РЕЗУЛЬТАТІВ

Для коректної класифікації розглянутих переходів у межах теорії Ландау необхідно знати вигляд термодинамічного потенціалу $F(\eta)$. Для цього достатньо побудувати рівняння Ландау–Халатникова, яке має в явному вигляді задавати похідну $\partial F/\partial \eta$. З цією метою запишемо відповідне до рівняння Фоккера–Планка (24) рівняння Ланжев'єна, яке має такий вигляд:

$$\dot{x} = \mathcal{D}_1(x) + \sqrt{\mathcal{D}_2(x)}\xi(t), \quad (33)$$

де $\xi(t)$ — білий шум із стандартними властивостями ($\langle \xi(t) \rangle = 0$, $\langle \xi(t)\xi(0) \rangle = 2\delta(t)$). Тоді в межах теорії середнього поля еволюційне рівняння для параметра порядку набирає вигляду

$$\dot{\eta} = \langle \mathcal{D}_1(x) \rangle = \mathcal{D}_1(\langle x \rangle) \simeq -\frac{\partial F}{\partial \eta}. \quad (34)$$

Виконуючи елементарні усереднення, отримуємо явний вигляд термодинамічного потенціалу

$$F \equiv F_s(\eta) + F_{as}(\eta), \quad (35)$$

де перший доданок

$$F_s \equiv \frac{A}{2}\eta^2 + \frac{C}{4}\eta^4 \quad (36)$$

визначає симетричну частину і є перенормованим вихідним потенціалом (10) з коефіцієнтами

$$A \equiv -\frac{1}{\mu} \left(\varepsilon + \sigma_e^2 \tau_{ee}^c - \frac{2\lambda}{\mu^2} \sigma_c^2 \right), \quad (37)$$

$$C \equiv \frac{1}{\mu^4} \left[\mu^3 + \mu^2 \lambda \varepsilon + \lambda \mu (2 + \tau_{ee}^c \mu) \sigma_e^2 - 6\lambda^2 \sigma_c^2 \right].$$

Другий доданок в (36) має вигляд

$$F_{as} \equiv \frac{B}{3}\eta^3 - h\eta, \quad (38)$$

і задає асиметричну частину з коефіцієнтами

$$B \equiv \frac{\sigma_e \sigma_c \lambda}{\mu^2} \left(\tau_{ec}^c + \frac{4}{\mu} \right), \quad h \equiv \frac{\sigma_e \sigma_c}{\mu} \tau_{ec}^c. \quad (39)$$

Порівнюючи коефіцієнт при η^2 з відповідним коефіцієнтом вихідного потенціалу $V(x)$, робимо висновок, що мультиплікативний шум збільшує значення керуючого параметра ε завдяки доданкові, пропорційному $\sigma_e^2 \tau_{ee}^c$. Наявність адитивного шуму зменшує його значення, якщо кінетичний коефіцієнт γ стає залежним від x . Результатом такого внеску є збільшення абсолютного значення параметра порядку при невеликих деформаціях (див. криві 1 та 2 на рис. 4). Виникнення крос-кореляцій спричиняє появу асиметричної частини термодинамічного потенціалу F . При цьому порушення симетрії потенціалу F відбувається навіть у межі $\tau_{ec}^c \rightarrow 0$ завдяки складовій η^3 , що існує лише за умови $\gamma = \gamma(x)$. Виділення параметра спектральної ширини τ_{ec}^c підсилює асиметрію при малих η за рахунок лінійної складової потенціалів, яка розглядається як самоузгоджене поле h крос-кореляції та існує незалежно від вигляду залежного від x кінетичного коефіцієнта γ і пов'язується з мікро- та макроскопічними параметрами τ_c і τ_0 , з одного боку, та наявністю τ_{ec}^c з іншого. Зміна керуючого параметра ε приводить до зміни положення глобального мінімуму потенціалу F , що зображено на рис. 5. При $\tau_{ec}^c \rightarrow 0$ і малих деформаціях потенціал має один лівий мінімум ($\eta < 0$) (крива 2). Зі збільшенням деформації, в домені $[\varepsilon_c, \varepsilon^c]$ маємо локальний мінімум при $\eta > 0$ (крива 3). Ця фаза є метастабільною і за збільшенням деформації до значення $\varepsilon = \varepsilon_c$ стрипкоподібно зникає. Збільшення часу крос-кореляції спричиняє утворення гістерезисної петлі, що є індикатором фазового переходу першого роду щодо параметра ε . Інакше кажучи, зі збільшенням деформації лівий локальний мінімум поглиблюється стосовно правого глобального мінімуму, і при критичному значенні ε глобальний мінімум трансформується в локальний мінімум. Така трансформація, відповідно до теорії катастроф, є переходом першого роду.

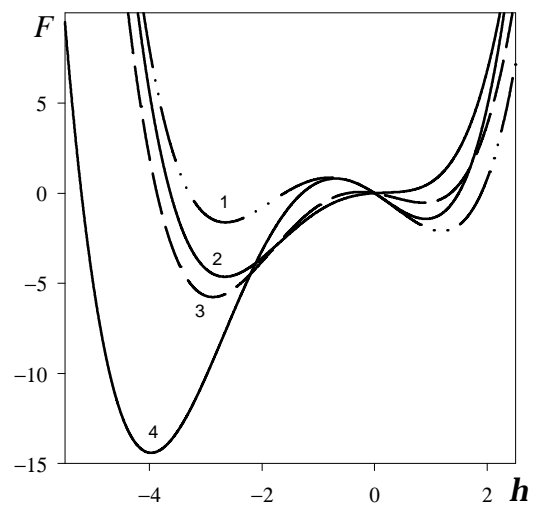


Рис. 5. Залежність ефективного потенціалу F від η . Крива 2 відповідає ділянці нульових значень часу крос-кореляції та малим деформаціям; крива 3 відповідає ділянці $\varepsilon \in [\varepsilon_c, \varepsilon^c]$ (рис. 1); криві 1, 4 відповідають області гістерезису (криві 3,4 на рис.1).

VI. ВИСНОВКИ

На основі найпростіших синергетичних уявлень у статті розвинуто самоузгоджену синергетичну схему, що враховує флюктуації основних параметрів. У ході розгляду режим локалізованої зони пластичної деформації досліджено поведінку системи дефектів, у якій можливими є фазові переходи з утворенням метастабільних станів за принципом переходів першого роду. При аналізі впливу флюктуацій з'ясовано, що автокореляції мультиплікативного шуму є джерелом реверсивних фазових переходів, коли нова фаза існує лише в певній ділянці керуючого параметра, а

крос-кореляції порушують симетрію функції розподілу системи, приводячи до виникнення самоузгодженого поля. Розглядаючи реальну систему еволюції дефектів, ми запропонували флюктуаційний механізм упорядкування дефектної структури при пластичній деформації. Одержані результати можна застосувати для пояснення відомих експериментальних даних [18] для високоміцних сплавів при інтенсивному навантаженні, у яких спостерігається якісна перебудова дефектної структури. Перспективами роботи є проведення реального експерименту та чисельного моделювання для верифікації отриманих теоретичних результатів.

-
- [1] В. И. Владимиров, *Физическая природа разрушения металлов* (Металлургия, Москва, 1984).
- [2] В. В. Рыбин, *Большие пластические деформации и разрушение металлов* (Металлургия, Москва, 1985).
- [3] В. Е. Панин, В. А. Лихачев, Ю. В. Гриняев, *Структурные уровни деформаций твердых тел* (Наука, Новосибирск, 1985).
- [4] G. Nicolis, I. Prigogin, *Self-Organization in Nonequilibrium systems* (A Wiley-Interscience Publ., John Wiley & Sons, New York, London, Sydney, Toronto, 1977).
- [5] Г. Хакен, *Синергетика. Иерархии неустойчивостей в самоорганизующихся системах и устройствах* (Мир, Москва, 1985).
- [6] А. И. Олемской, А. В. Хоменко, Усп. физ. наук **2**, 3 (2001).
- [7] Я. Д. Вишняков, *Дефекты упаковки в кристаллической структуре* (Металлургия, Москва, 1970).
- [8] А. Н. Орлов, В. Н. Перевезенцев, В. В. Рыбин, *Границы зерен в металлах* (Металлургия, Москва, 1980).
- [9] А. И. Олемской, А. В. Пауль, *Металлофизика* **16**, No 5, 3 (1994).
- [10] A. I. Olemskoi, in *Physics Reviews*, edited by I. M. Khalatnikov (Gordon & Breach, London) **18**, Part 1, 1 (1996).
- [11] И. Л. Максимов, Г. Ф. Сарафанов, С. Н. Нагорных, Физ. тверд. тела **37**, 10 (1995).
- [12] E. C. Aifantis, *Int. J. Plasticity* **3**, 211 (1987).
- [13] Л. Б. Зуев, В. И. Данилов, Б. С. Семухин, Усп. физ. наук **3**, 3 (2002).
- [14] В. Хорстхемке, Р. Лефевр, *Индукцированные шумом переходы* (Мир, Москва, 1987).
- [15] J. Garcia-Ojalvo, J. M. Sancho. *Noise in Spatially Extended Systems* (Springer-Verlag, New York, 1999).
- [16] Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Гидродинамика* (Наука, Москва, 1988).
- [17] А. М. Косевич, *Основы механики кристаллической решетки* (Наука, Москва, 1970).
- [18] А. Д. Коротаев, А. Н. Тюменцев, В. Ч. Гончиков, А. И. Олемской, *Изв. вузов, физика*, **34**, No 3, 81 (1991).
- [19] N. G. Van Kampen, *Stochastic Processes in Physics and Chemistry* (North-Holland, Amsterdam, 1992).
- [20] V. E. Shapiro, *Phys. Rev. E* **48**, 1 (1993).
- [21] Д. О. Харченко, *Укр. фіз. журн.* **44**, 5, 647 (1999).
- [22] D. O. Kharchenko, I. A. Knyaz', *Eur. Phys. Jour. B* **33**, 375 (2003).
- [23] H. Risken, *The Fokker-Planck Equation* (Springer-Verlag, Berlin, 1989).

FLUCTUATION PHASE TRANSITION IN SYNERGETIC SYSTEMS OF DEFECTS

D. O. Kharchenko, I. A. Knyaz
 Sumy State University
 2, Rimskiy-Korsakov St., Sumy, UA-40007, Ukraine

The theoretical approach to the description of the process of reconstructing the defect structure in the course of plastic flow is presented. Offered in the paper is the phenomenological model which allows to take into account the transformation of mobile dislocations into the point defects and vice versa as well as the interaction between density of dislocations and macroscopic characteristics of deformation, spatial inhomogeneity of the distribution of defects in crystal and the fluctuations of deformation and density of defects. Basing on a kinetic approach we show the correlation between fluctuations leads to the appearance of intermediate metastable phases which indicate the formation of clusters of dislocations with redirected Burgers vector.