

ПРИЛОЖЕНИЕ ОСНОВ СИНЕРГЕТИКИ ПРИ АНАЛИЗЕ ПРОЦЕССОВ МАТЕРИАЛОПОКРЫТИЯ

В начале XXI в соответствии с современной парадигмой развивается междисциплинарность подходов к явлениям природы, основанная на интеграции наук кибернетики, экологии, синергетики. Материалопокрывание находит самое широкое применение в данных областях человеческой деятельности. Целью данной работы является адаптация аналитического аппарата синергетики, применительно к исследованию физико-химических и технологических процессов, протекающих при создании покрытий.

К началу XXI века в традиционной фундаментальной материаловедческой науке произошли заметные перемены. Взамен анализа и дробления наук, на смену детерминизма, линейности, обратимости и комбинированности приходит синтез наук, осознание реальности структур, вероятности эволюции сложных, нелинейных, динамических систем.

Принципиально новые, систематические, синергетические подходы к явлениям природы и социума позволили определить основные изменения в фундаментальной науке /1/:

- Развивается иерархичность и фрактальность сложных реальных структур материалов и природных объектов;
- Определена необратимость, неравновесность, нелинейность и непредсказуемость в динамике реальных термодинамически открытых структур;
- Наблюдается стохастичность и вероятность хода эволюции сложных реальных систем взамен детерминизма;
- Вскрыты автоволновость в развитии любых живых и природных объектов;
- Установлена общность единых парадигм для микро-, мезо-, макромиров;
- Развивается междисциплинарность подходов к явлениям природы, основанная на интеграции наук: кибернетики, экологии, синергетики.

Синергетика – научное направление, изучающее связь между элементами структуры (подсистемами), которые образуются в открытых системах (органических и неорганических) благодаря обмену веществом и энергией с окружающей средой в неравновесных условиях /2/. В таких системах наблюдается согласованное поведение подсистем в результате чего возрастает степень и упорядоченности, т. е. и уменьшается энтропия (т. е. самоорганизация). Основа синергетики – термодинамика неравновесных процессов, теория нелинейных колебаний /2/ и т. п. Принципы синергетики используются в материаловедении при разработке материалов с памятью формы, композиционных и так называемых фрактальных материалов, характери-

зующихся нарушенным дальним порядком (аморфные сплавы), при изучении структуры и свойств материалов, процессов их деформации и разрушения, для создания новых конструкционных материалов, технологии их обработки, соединения металлов и сплавов, включая совмещенные технологии (технологические системы); сварку-формообразование, сварку-литье и др.

В идеальном состоянии материалы обладают прочностью в 100-1000 раз большей, чем у реальных. Это объясняется наличием в них большого количества точечных, линейных, плоских и объемных дефектов ($=10^{8\pm 1}$).

Главная парадигма современного материаловедения от дефектов структуры материала – к его свойствам приобрела новое содержание благодаря синтезу иерархии структур и моделей пластической деформации и разрушения на микро-, мезо-, микроструктурных уровнях. Микро уровень реальной структуры материалов учитывает динамику точечных дефектов и отдельных дислокаций. Макро уровень анализируется классической механикой с учетом реальности структуры объекта. Связующим звеном служит мезо уровень структуры, где изучаются дислокационно-дисклинационные ансамбли, блоки, фрагменты, ячейки, полигоны и другие возможные структурные подразделения внутри зерен. Для этого уровня характерно сочетание скольжения с ротацией при пластической деформации.

Большое развитие получает физическая мезомеханика материалов, как аппарат синтеза физических моделей и количественных расчетов (численное моделирование процесса пластической деформации и упрочнения на мезоуровне).

Физико-химические и технологические процессы создания (формирования) покрытий протекают с нагревом, давлением и другими воздействиями на материалы (магнитные, химические и т. п.), которые и обуславливают неравномерность распределения свойств и параметров термодинамической системы – плотности, теплоемкости, температуры, давления, химического потенциала, энтропии /3/. Эта неравномерность в условиях открытости тер-

модинамической системы (обмена веществом и энергией с окружающей средой) приводит к неравновесным необратимым процессам, которые протекают по законам синергетики.

Исходя из вышесказанного, аналитический аппарат синергетики следует использовать при материаловедении. Для этого необходимо сформулировать комплекс научно-технических проблем и задач, решение которых позволит прогнозировать новые качества (свойства), управлять ими и в итоге значительно повысить эффективность процессов создания покрытий.

Целью данной работы является адаптация аналитического аппарата применительно к исследованию и объяснение природы физико-химических и технологических процессов, протекающих при создании покрытий.

Термодинамика необратимых процессов изучает преимущественно открытые системы, обменивающиеся с окружающей средой энергией и веществом, к их числу относятся также процессы формирования поверхностного слоя при металлизации.

Синергетика объединила различные науки терминологией и единым математическим аппаратом. Синергетика трактует, что неравновесные состояния более высокоорганизованные состояния, чем равновесные, так как в них движущей силой является минимум производства энтропии, а не минимум свободной энергии /4/.

В стационарном состоянии производство энтропии в системах достигает минимального значения. Во всякой линейной открытой системе производство энтропии уменьшается, пока не будет достигнуто состояние текущего равновесия, при котором $\sigma = \min$.

Под текущим равновесием понимают стационарное состояние открытой системы, устойчивой по отношению к малым отклонениям (флуктуациям).

Производство энтропии в необратимых процессах обусловлено диссипацией энергии – переходом части энергии движения в энергию неупорядоченного движения, в конечном итоге в теплоту.

Ю.Л. Климантович /5/ доказал, что для открытых систем, при критических фазовых переходах через пороговые значения управляющего параметра происходит скачкообразное изменение энтропии с уменьшением ее производства. Откуда следует важный вывод о том, что с ростом управляющего параметра ненормированная энтропия убывает, т. е. имеет место процесс самоорганизации.

Самоорганизующимся (открытым) системам свойственна стохастичность, т. е. их временную

зависимость нельзя предсказывать с абсолютной точностью. Поэтому вводится функция, учитывающая флуктуации термодинамических сил.

Пример принципа подчиненности: с одной стороны, после действия параметра порядка, подчиняя себе атомы, с другой – атомы своим вынужденным излучением порождают поле (круговая подчиненность).

Принцип подчиненности (подчинения) реализуется в самоорганизующихся системах, определяет отбор наиболее вероятного параметра (наиболее приспособленной моды), связанного с достижением критических условий. При этом, множество переменных подчиняется одной или нескольким переменным, выступающим как параметр порядка.

Поведение открытых систем вдали от состояния термодинамического равновесия определяется процессом развития неустойчивостей с возбуждением широкого спектра колебаний в конечном интервале изменения волнового числа.

Первичным является определение степени неравновесности системы при заданных внешних условиях. В качестве этой характеристики целесообразно использовать отношение «фактора неравновесности», отражающего интенсивность внешнего воздействия на систему, и соответствующего ему структурного фактора, характеризующего структуру и энергетическую емкость системы /4/. В качестве факторов неравновесности системы можно использовать скорость, градиенты плотности энергии и интенсивности внешних воздействий, для которых соответствующими структурными факторами являются время и длина релаксации, энергия связи, интенсивность потоков, поглощаемых системой и т. п. /4/.

Наиболее существенной чертой неравновесных процессов является выполнение закона границы качества, согласно которому возрастание факторов неравновесности до определенного порогового значения приводит к качественному изменению структуры, свойств и поведения системы.

Изменение качества открытой неравновесной системы может произойти в результате неравновесного кинетического или масштабного фазового перехода, при котором скачкообразно изменяются основные характеристики открытой системы, вплоть до реализации обратных зависимостей, термодинамических координат и потоков от обобщенных термодинамических сил (принцип аномальности /4/).

Непосредственным следствием закона границы качества и принципа аномальности, как форм

его проявления, является ведущий принцип синергетики «неравномерность – источник упорядоченности». Согласно этому принципу, в любой диссипативной системе, находящейся первоначально в однородном стационарном состоянии, при прохождении стационарных потоков, интенсивность которых превышает критическое значение, должны возникать упорядоченные неоднородные состояния – диссипативные структуры.

Согласно третьему закону термодинамики, пространственно-временные изменения в системе имеют чередующийся характер, т. е. в результате самоорганизации большого числа структурно – кинетических элементов возникает микроструктура.

В теории неравновесных фазовых переходов, сопровождающихся формированием диссипативных структур, центральное место занимает вопрос об условиях реализации стационарных сильно неравновесных состояний. При анализе степени упорядоченности неравновесных систем следует рассматривать не временную эволюцию, а последовательность стационарных неравновесных состояний при изменении управляющего параметра или усилении обратной связи.

Степенью неупорядоченности открытых систем может служить отношение энтропии при фиксированном значении средней кинетической энергии. Однако при кинетических фазовых переходах условие постоянства средней энергии, как правило, не выполняется. Поэтому необходимо сравнивать значения энтропии и производства, нормированное на одно и то же значение средней энергии системы. Это нашло отражение в S – системе Ю.Л. Климантовича.

Физико-математическое моделирование неравновесных процессов в саморегулирующихся открытых термодинамических системах исследовано при соединении материалов с использованием источников теплоты с различной концентрацией энергии. /4/.

Наиболее глубоко и полно на основе физико-математического моделирования исследованы системы «энергия – (газ – жидкий металл)» и «энергия – (газ – твердый металл)», в которых взаимодействие идет по механизму реакция – диффузия (исследованы причина и механизм образования пор в сварных швах цветных металлов).

Физико – химическое моделирование неравновесных процессов формирования структуры металла шва и ЗТВ, кинетики фазовых и структурных превращений, формирования химической и структурной неоднородности, процессов пластической, упругопластической и упругой деформации при

соединении металлов в условиях общего и локального нагрева.

Исследование разработанных физико – математических моделей (ФММ) с помощью вычислительного эксперимента на ЭВМ. Исследование большинства реальных нелинейных задач сегодня невозможно без вычислительного эксперимента, без построения приближенных и качественных моделей изучаемых процессов. Синергетика тесно связана с развитием и широким использованием вычислительного эксперимента. Последний может привести к открытию новых особенностей кинетики протекания процессов. /5/, тем более, что в точках бифуркации даже слабые внешние воздействия на линейную систему могут определить ее дальнейшее развитие. В таких случаях имеет место резонансное возбуждение воздействием, согласованным с внутренними свойствами нелинейной системы, сильно влияющими на нее.

Современная техника (технология) основана на колебательных, периодических или близких к ним нестационарных процессах. Ими удобно управлять, они позволяют значительно усилить слабые сигналы.

Одной из наиболее важных и хорошо известных математических моделей является модель брюсселятора. Она описывает распределение в пространстве и изменение во времени процессов ряда химических реакций и может быть использована для выявления свойств диссипативных структур (тепловых, химических и др.) в нелинейных сварочных процессах, протекающих в условиях открытых систем.

Согласно этой математической модели, при небольших внешних воздействиях на систему в ней возникают стационарные диссипативные структуры. Именно для стационарных неоднородных в пространстве устойчивых структурных, возникающих вне термодинамической ветви, И. Пригожин впервые ввел понятие диссипативной структуры. При решении такой модели брюсселятора возникает несколько стационарных решений. С позиций математики происходит ветвление решений, или бифуркация. Аппарат теории бифуркаций интенсивно развивается и широко используется в синергетике. Можно сказать, что причиной возникновения диссипативных структур являются внутренние свойства системы, а инициатором – вносимые возмущения (флуктуации). Такое поведение характерно для многих линейных неравновесных систем.

На рис. 1 приведены характерные графические модели фрагментов стационарных диссипативных структур с точками бифуркации, при матема-

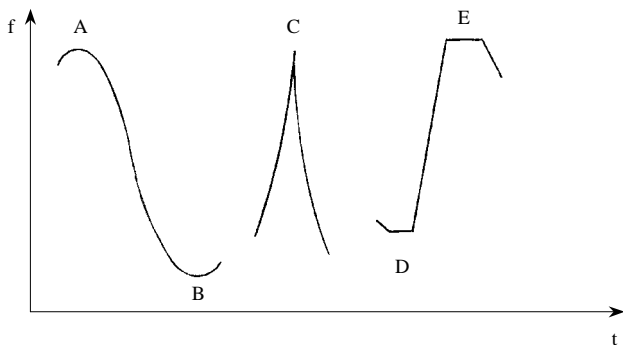


Рисунок 1. Характерные графические модели стационарных диссипативных структур с точками бифуркации при математическом решении модели брyсселятора.

тическом решении модели брyсселятора – структуры с большим числом экстремумов. В точках А и В функция достигает строго экстремума: в точке А – максимума, в точке В – минимума. В таких точках $f'(x) = 0$. В точках экстремума производная функции $f'(x)$ не существует. В точках Д и Е достигается нестрогий минимум и максимум соответственно.

Самоорганизация диссипативных структур.

Самоорганизующимися называют процессы, при которых возникают более сложные совершенные структуры [3]. Это определение позволяет выделить самоорганизацию как один из возможных путей эволюции и отнести этот процесс к условиям, далеким от термодинамического равновесия.

Если эволюция системы контролируется минимумом производства энтропии (неравновесные условия), то происходит самоорганизация динамических структур, названных диссипативными. К последним относятся пространственные, временные или пространственно – временные структуры, которые могут возникать вдали от равновесия в нелинейной области термодинамической ветви, если параметры системы превышают критические значения [6].

Диссипативные структуры могут перейти в состояние термодинамического равновесия только путем скачка (в результате неравновесного фазового перехода).

Основные свойства этих структур следующие:

- Они образуются в открытых структурах, далеких от термодинамического равновесия, в результате флуктуаций до микроскопического уровня;
- Их самоорганизация происходит в результате экспорта энтропии;
- Возникновение пространственного или временного порядка аналогично фазовому переходу;

- Переход в упорядоченное состояние диссипативной системы происходит в результате неустойчивости предыдущего неупорядоченного состояния при критическом значении некоторого параметра, отвечающем точке бифуркации;

- В точке бифуркации невозможно представить, в каком направлении будет развиваться система, станет ее состояние хаотическим или она перейдет на более высокий уровень упорядоченности.

Таким образом, диссипативные структуры – это высокоупорядоченные самоорганизующиеся образования в системах, далеких от равновесия, обладающие определенной формой и пространственно – временными размерами, они устойчивы относительно малых возмущений.

Таким образом, диссипативные структуры – это высокоупорядоченные самоорганизующиеся образования в системах, далеких от равновесия, обладающие определенной формой и пространственно – временными размерами, они устойчивы относительно малых возмущений.

Важнейшие характеристики диссипативных структур – время жизни, область локализации и фрактальная размерность. Диссипативные структуры отличаются от равновесных тем, что для их существования не требуется постоянного притока энергии извне, так как, по определению, их самоорганизация связана с обменом энергии и веществом с окружающей средой.

Под диссипативной системой понимают систему, полная механическая энергия которой при движении убывает, переходя в другие формы, например в теплоту. Соответственно диссипация энергии есть переход части энергии упорядоченного процесса в энергию неупорядоченного процесса, а в конечном итоге – в теплоту.

Процесс перехода «устойчивость – неустойчивость – устойчивость» следующий. Первоначально устойчивая диссипативная структура, достигнутая в процессе эволюции системы порога неустойчивости, начинает осциллировать, а возникающие в ней флуктуации приводят к самоорганизации новой, более устойчивой на данном иерархическом уровне диссипативной структуры.

Явления пространственно-временной упорядоченности представляют собой автоволны и автоколебания, которые поддерживаются оттоком энергии системы.

Основные положения термодинамики необходимых процессов и научные принципы синергетики, как следует из изложенного, в полной мере можно использовать при анализе процессов, протекающих в условиях материалопокрyтия с исполь-

зованием технологических процессов наплавки, электроосаждений, пластической деформации, металлизации и др.

Таким образом, феноменологическая система «энергия вещество» в условиях соединения материалов представляет собой открытую термодинамическую систему, далекую от термодинамического равновесия. Причем, степень неравновесности системы, очевидно, тем больше, чем выше концентрация энергии (плазмы, электронного и лазерного лучей).

Основанием для отнесения процессов создания покрытий к диссипативным (неравновесным) является то, что они обладают определёнными критерияльными признаками: неоднородностью среды, нелинейностью явлений и часто их нестационарностью, диссипацией энергии. При локальном введении теплоты в материал возникают градиенты температуры, концентрации вещества (легирующих компонентов и примесей сплава), напряжения, термодиффузии (перекрестный процесс), вязкости, химического потенциала и энтропии, которые являются движущей силой тепло и массопереноса, фазовых и структурных превращений, протекания деформации в твердом и пластическом состояниях материал, переходов его основы и легирующих компонентов в другие агрегатные состояния (газообразное, плазму), протекающих со скачкообразным изменением тепловых эффектов химических реакций. Вещество в таких временно-пространственных условиях находится в различных фазах твердой, твердой жидкой, жидкой и газообразной, которые контактируют друг с другом на границе раздела.

Важным фактором для отнесения процессов металлопокрытий к диссипативным является также обнаруженные автоколебания температурного поля /6/, кристаллизация металлов и сплавов, дегазация жидкого металла /7/, химические реакции и др.

Необходимое качество соединения было обеспечено использованием рекомендаций теории синергетики на установке МАБП /5/. Быстрый (в несколько секунд) нагрев в узкой зоне соприкосновения приводит к контактному расплавлению на уровне отдельных зерен, а давление (3т) с резонансной вибрацией обеспечило создание химической связи по всей площади контактирования без пор и несправов.

В работе В.В. Меликова /8/ показаны условия плавления электродов в импульсном режиме, которые обеспечивают мелкокапельный перенос металла и на 20-25% увеличивают количество расплавленного металла при сохранении величины

расходуемой мощности. Это объясняется тем, что мгновенная плотность пульсирующего тока в электродах в 4 раза больше средней арифметической, приходящейся на один электрод. Импульсное плавление электродов благотворно влияет на качество наплавленного металла. Дуги, переменные возникающие на электродах, оказывают на сварочную ванну сложное электрическое и механическое воздействие, вызывая в ней мощные конвективные потоки, которые способствуют ее хорошему перемешиванию, удалению газов и различных включений, а также улучшает формирование слоя. Все эти улучшения обусловлены эффектом самоорганизации системы «наплавленное вещество – энергия»

При формировании покрытия наплавлением самоорганизация отмечается в характере протекания гидродинамических процессов: возникновение турбулентных потоков металла в объеме электрошлаковой ванны, периодичности процесса пузырьковой организации ванны, продольных колебаний наплавочной ванны.

Общеизвестно, что при плакировании взрывом происходят аналогичные процессы, которые имеют место при сварке взрывом /9/. В результате высокоскоростного соударения в зоне контакта возникает давление больших величин и резкое повышение температуры; присутствующие при этом в плоскости соприкосновения силы приводят к образованию волнообразного контакта с высокими прочностными свойствами. Анализ экспериментальных данных и решение уравнений гидродинамики показывают, что для возникновения волн необходимо сильное исходное возмущение процесса соударения. На основании этого Дерibasом А.А. сделан вывод, что волнообразование – автоколебательное движение, осциллятор которого находится в окрестностях точки соударения, где давление, температура и скорость звука существенно отличаются от исходных. Высокие скорости пластической деформации, нагрева и охлаждения вызывают неравновесные и необратимые процессы, которые описываются законами синергетики. Волнообразная структура зоны соединения при плакировании взрывом не может претендовать на фрактальность, однако, признаки периодичности налицо.

Отличительная особенность реакционноспекаемых и реакционноотвергаемых покрытий состоит в том, что эти покрытия являются продуктом сложных химических реакций, отдельные акты которых имеют разную физикохимическую природу и протекают на поверхности защищаемых изделий в процессе формирования покрытия при высокой температуре /10/.



Рисунок 2. Блок-схема алгоритма (порядка и взаимосвязи) исследования процессов формирования покрытия при их создании на основе принципов синергетики.

Согласно формально – кинетической теории начальные и конечные состояния реакционной системы должны обладать минимумом потенциальной энергии, а переходному состоянию и акту реакции соответствует максимум потенциальной энергии системы. Учитывая, что процесс получения рассматриваемых покрытий, включая несколько микролокальных реакций, ряд которых происходит с образованием промежуточных продуктов, изменение потенциальной энергии подобных реакционных систем должно характеризоваться наличием нескольких максимумов и минимумов.

Одной из важных народнохозяйственных задач современности является технология создания алмазных покрытий. Общеизвестно, что искусственный алмаз создается из углерода при колоссальных для практики давления и высоких температурах. Эти условия могли создавать образцы малых размеров. Для достижения максимальных надежности и долговечности ряда деталей требуется технология формирования алмазных покрытий на значительные площади. Работы в этом направлении ведутся. При этом, для снижения температуры и удельного давления, которые требуются для создания алмаза, вместо обычного углерода используется третья форма углерода – фуллерены (C72 и др.) Использование фуллеренов дает возможность снизить необходимые режимы формирования (температуру и давление) и сделать их практически доступными для создания алмазных покрытий /11/. Несмотря на значительно меньшие давления и тем-

пературы превращение фуллеренов в алмаз происходит за счет неравновесных и необратимых процессов, которые вызывают резонансные явления и самоорганизацию структур.

Исходя из того, что при сварке концентрированными источниками присутствует явление автоколебания (которыми можно управлять) и образование диссипативных структур в результате резонансных процессов, то можно утверждать, что при наплавке электроннолучевым, лазерными, плазменными источниками происходит эффект самоорганизации с образованием фрактальной структуры. Приведенные примеры утверждают, что при создании условий, обеспечивающих протекание процессов, описываемые закономерностями синергетики, вызывают эффект самоорганизации с образованием структур, отличающихся высокими свойствами. Это дает основание для создания принципиально новых конструктивно-технологических решений и наукоемких современных технологий формирования покрытий для новой техники /6/.

Выводы.

1. Приведен обзор работ, проанализировано состояние проблемы использования принципов синергетики для изучения самоорганизующихся термодинамических открытых систем в материалопокрытии.

2. На основании комплексного и системного подхода и принципов синергетики предложен алгоритм исследования и управления процессом формирования покрытия.

Список использованной литературы:

1. Тушинский Л.И., Батаев А.А. Классификация структур в современном материаловедении: Материалы международной науч.-техн. Конф. Г. Новочеркасск, 16 –20 сентября, 2002 г./ Юж. –Рос. Гос. Техн. Ун-т (НПИ) – Новочеркасск: ЮРГТУ (НПИ), 2002. –172 с.
2. Лоскутов А.Ю., Михайлов А.С. Введение в синергетику: учебн. Руководство – М.: Наука, 1999 – 272с.
3. Николис Т., Пригожин И. Познание сложного. М.: Мир, 1990. 342 с.
4. Применение принципов синергетики при анализе процессов, сопровождающих соединение материалов. –Сварочное производство, № 5, 2000.
5. Синергетика и фракталы в материаловедении / В.С. Иавнова, А.С. Баланкин, И.Ж. Буши, А.А. Оксагоев. М.: Наука. 1994. 384с.
6. Физические предпосылки к развитию технологии получения материалов с заданными свойствами А.А. Оксагоев, В.С. Иванова 1999, № 5 с 5-16.
7. Лякишев Н.П. Материалы и технологии 21 века //Самоорганизующиеся технологии получения, обработки и сварки материалов. Ч.2: Тез. Докл. Междунар. Симпозиума «Синергетика, структура и свойства материалов, самоорганизующиеся технологии». М.: ИМЕЕТ им. А.А. Байкова. РАН, ЦРДЗ, 1996 с. 3-4.
8. Маликов В.В. Многоэлектродная наплавка. М. – Машиностроение, 1988 – 144с.
9. Плакирование стали взрывом. Под ред. А.С. Гельмана М.: Машиностроение, 1978, 191 с.
10. Солнцев С.С. Защитные технологические покрытия и тугоплавкие эмали. – М.: Машиностроение, 1984, 256 с.
11. Особенности получения композиционных материалов на основе алмаза, карбида, кремния при низких давлениях. С.К. Гордеев, С.Г. Жуков, Л.В. Данчукова, Т.С. Экстрем. Неорганические материалы, 2001, Том № 37, № 6 с. 691-я695.