

ВВЕДЕНИЕ

Развитие техники требует опережающего развития материаловедения. В условиях, когда временной разрыв между идеей конструктора и ее воплощением должен быть минимальным, основной задачей материаловедения становится создание материалов с заданными свойствами, что в эпоху информатики, кибернетики и средств вычислительной техники представляется вполне реальным. Первоочередной задачей становится моделирование материалов с использованием триады «модель — алгоритм — программа», обладающей уникальными возможностями прогнозирования оптимальных материалов и широкого использования математических методов решения металлургических задач. В последние годы созданы новые материалы (аморфные, с памятью формы, функционально-градиентные и др.) и новые технологии, связанные, главным образом, с неравновесными условиями получения материалов.

Методологической основой получения материалов с заданными свойствами являются принципы синергетики, в соответствии с которыми эффективное управление свойствами материалов и их оптимизация возможны только в условиях самоорганизации структур. Исследования последних лет показали, что самоорганизующиеся структуры обладают свойствами фрактальности, т. е. они могут быть количественно описаны с помощью фрактальной размерности.

Задачей фрактального анализа в материаловедении является количественное описание связи между многообразными сложными структурами материалов и их свойствами. Развитие фрактального описания реальных микроструктур позволяет моделировать их развитие в прямом и обратном направлениях. Фрактальный формализм, в принципе, может являться основой для выбора численных адекватных моделей структур реальных сварных швов, необходимых для компьютерного конструирования структур и прогнозирования их свойств [1, 2, 3].

Традиционно используемые методы описания структур, выявляемых оптической и электронной микроскопией, в основном имеют качественный характер и недостаточно удобны для целей моделирования. Привлечение концепции фракталов, основанной на использовании общих понятий «меры» и фрактальной размерности, позволяет дать количественную оценку конфигурации исследуемой структуры в целом, что дополняет традиционные методы описания. С этой точки зрения фрактальный анализ структур является удачным дополнением традиционных методов исследования, позволяющих количественно

описать структуру в целом, уловить скрытую упорядоченность или периодичность в ней, оценить степень ее фрагментарности.

Таким образом, дальнейшее использование фрактального математического формализма для описания сложных структур, каковыми являются структуры сварных швов, становится полезным для совершенствования моделирования физико-химических процессов в широком диапазоне внешних условий, особенно удаленных от равновесия.

В настоящей книге дан обзор исследований фрактальных структур. Этот анализ в значительной мере основывается на разработках Института металлургии им. А. А. Байкова Российской академии наук, связанных с получением новых материалов (аморфных, с памятью формы, высокопрочных, наноструктурных, механически легированных сплавов крупных монокристаллов и др.) и исследованием их структуры и свойств.

С позиций синергетики и теории фрактальных структур предложен алгоритм анализа структурообразования для различных объектов: сварных швов, поверхности усталостного разрушения, покрытий, нанесенных методом микродугового оксидирования.

Сварные швы и наплавленные слои, полученные при обработке высококонцентрированными источниками энергии, представляют собой многокомпонентные сплавы, свойства которых во многом определяются фазовым и структурным состоянием, сформировавшимся в них как на этапе получения исходного материала, так и на стадии обработки. Поэтому управление структурным состоянием является важным элементом в общей стратегии разработки новых материалов и получения качественных изделий. Хотя эта задача давно привлекает внимание исследователей — металлургов и металловедов (Г. В. Курдюмов, Дж. Кристиан, И. К. Походня, В. В. Фролов), до сих пор нет исчерпывающего понимания механизмов и факторов, контролирующих образование микроструктур при фазовых превращениях, особенно в условиях воздействия высококонцентрированными источниками энергии — при сварке, плазменной и электронно-лучевой обработке. Причина этого связана со сложностью рассматриваемых явлений, протекающих в очень неравновесных условиях, с участием различных масштабных уровней — от микроскопического (атомного) до макроскопического (порядка размера зерна). В результате существующие подходы продолжают в значительной мере базироваться на эмпирических методах поиска оптимальных свойств.

Управление структурообразованием металлов в условиях воздействия высококонцентрированных источников энергии связано с необходимостью корректного описания структуры. Сложность

структуры реальных сварных швов является основным препятствием при выборе адекватных моделей для компьютерного конструирования структуры и прогнозирования их свойств. Для этих материалов основными методами изучения структуры остаются пока оптическая, электронная микроскопия, а также рентгенографические и спектрометрические методы. Однако полученные при этом данные полностью не используются в моделировании и компьютерном конструировании структуры, поскольку они либо качественно представляют структуру, либо характеризуют ее отдельные фрагменты. Например, при анализе структур швов определенная трудность заключается в корректной оценке параметров видманштеттовой структуры, к которой не всегда можно применить критерий «балл зерна». Ввиду отсутствия комплексной оценки свойств материала, связь между составом, количественными характеристиками структурного состояния таких сталей и их свойствами изучена в ограниченной степени.

Значительный интерес в этом направлении представляет теория фракталов, разработанная в ее классическом варианте Г. Хакеном, Б. Мандельбротом, а также фрактальный анализ — математический алгоритм выявления единого численного параметра (фрактальной размерности) — для описания многоуровневых структур, каковыми являются, в частности, структуры металлов, поверхности изломов, пористые структуры, зоны разрушения, структурные границы вязкохрупкого перехода и т. п. (Е. Федер, Р. М. Кроновер, В. С. Иванова, И. Ж. Бунин, А. А. Оксогоев, Г. В. Встовский).

Перспективным путем решения задачи количественного описания сложных многоуровневых структур таких объектов является их фрактальная параметризация, позволяющая описать внешне хаотические изменения в структурах. Использование количественных характеристик, при помощи которых подобные друг другу системы становятся различимыми, делает возможным выявление эволюции структур материалов под воздействием внешних факторов. Метод фрактальной параметризации позволяет установить зависимость между структурным состоянием исследуемого материала и его физико-механическими свойствами.

1. ИСТОРИЯ МЕТОДА И ТЕРМИНЫ

Для металловедения фрактальный подход является достаточно новым, поэтому автор считает необходимым очень кратко коснуться истории развития метода и осветить современное состояние вопроса.

Интерес естественных наук, главным образом математики и физики, к фракталам тесно связан с появлением и развитием нового направления — синергетики. Синергетика — учение о самоорганизации сложных систем. Термин «синергетика» (от греч. «синергос» — вместе действующий) введен Г. Хакеном еще в 40-е гг. XX в., т. е. до «века кибернетики». Синергетика занимается изучением процессов самоорганизации, устойчивости и распада структур различной природы, формирующихся в системах, далеких от равновесия. Они наблюдаются в живой и неживой природе. Общность заключается в том, что и биологическим, и химическим, и физическим неравновесным процессам свойственны неравновесные фазовые переходы, отвечающие особым точкам — точкам бифуркации, по достижении которых спонтанно изменяются свойства среды, обусловленные самоорганизацией диссипативных структур [37].

С развитием синергетики утвердился термин «самоорганизация». В чем же различие между процессами организации и самоорганизации? Понятие организации относится к процессам, близким к равновесным, при которых движущей силой развития является стремление системы к минимуму свободной энергии. Самоорганизация структур связана с переходом через кризис (неустойчивость системы) в условиях, далеких от равновесия. Движущей силой процесса в этих условиях является стремление системы к минимуму производства энтропии.

Материаловедение изобилует множеством примеров самоорганизации структур. В начале 1991 г., после открытия явления сверхпроводимости при $T > 33\text{К}$ поликристаллического углерода C_{60} , легированного атомами щелочных металлов, стабильные кластеры углерода (C_{60} , C_{120} , C_{76} , C_{84}) оказались в центре исследования. Они получили название **фуллеренов** и являются примером высокоорганизованной стабильной структуры.

Обнаружено, что структура кластера C_{60} характерна для самоорганизующихся в пламени органических соединений (сажи). Структура фуллеренов представлена на рисунке 1.

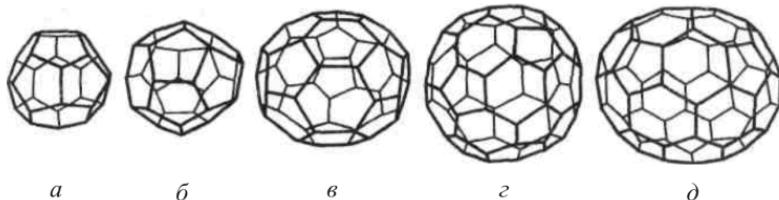


Рис. 1

Структура фуллеренов, составленная из пятиугольных и шестиугольных колец углерода [48]:

а — число атомов углерода в фуллерене равно 28; *б* — 32; *в* — 50; *г* — 60; *д* — 70.

Характерным примером самоорганизации ритмически повторяющихся структур служат слоистые покрытия со строго определенными размерами слоев. Структура покрытия, представленная на рисунке 2, обусловлена ритмическим повторением реакции при пиролитическом хромировании изделия путем разложения паров металлорганического соединения и охлаждения их на нагретую стальную подложку.

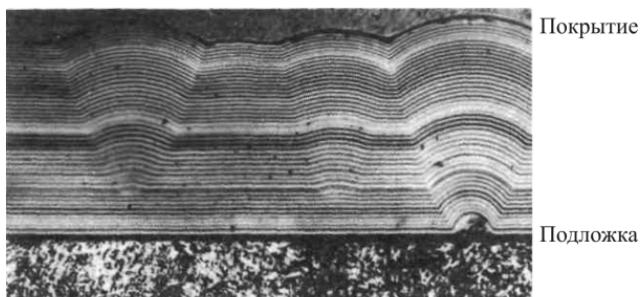


Рис. 2

Самоорганизованная структура покрытия, полученного при пиролизе хроморганической жидкости при плавном повышении температуры от 400 до 600°C в течение 120 мин [48]

Строгая повторяемость слоев и постоянство их толщин указывает на самоорганизованность структурообразования, которая возможна только в условиях, когда движущей силой процесса является стремление системы к минимуму производства энтропии. Структурообразование носит автоколебательный характер, а параметром порядка является теплопроводность среды. Это определяет чередование структур хромокарбидного соединения от близкого к аморфным (белые слои) и кристаллическим (черные слои). Именно такая структура покрытия является оптимальной при работе материала в условиях циклического нагружения.

Другим объектом материаловедения, который целесообразно описывать с позиции теории фракталов, являются **диссипативные структуры**. Диссипативные структуры — структуры, образующиеся в открытых системах, обменивающихся энергией с окружающей средой. Диссипативные структуры, в отличие от консервативных, образующихся без обмена энергией с окружающей средой, не всегда подчиняются законам равновесия, термодинамики и т. п.

В материаловедении для описания элементов микроструктуры традиционно используется евклидова размерность d , которая может принимать четыре значения: $d = 0$ для точечных объектов (ваканции, межузельные атомы), $d = 1$ для линейных дефектов (дислокации); $d = 2$ для планарных дефектов (двойники, границы зерен); и $d = 3$ для трехмерных образований в объеме образца. Евклидовы размерности могут служить характеристиками симметричных микроструктур, которые не часто образуются даже в материалах, получаемых в равновесных условиях. Формирование реальных структур, в том числе и приведенных выше, обусловлено явлениями, далекими от равновесных.

Самоорганизующиеся и подобные им структуры, конечно, можно описывать на языке традиционной геометрии, однако не всегда полученные результаты информативны.

Например, получив одинаковые результаты при измерении периметра (в случае материаловедения это аналог длины границы зерна) для прямоугольной и ломаной фигур на рисунке 3, вряд ли можно что-то сказать об их форме.

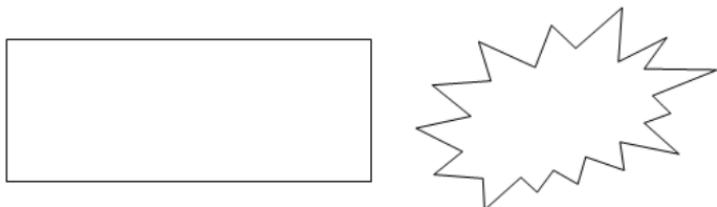


Рис. 3

Графические аналоги формы зерен металла — прямоугольная и сложная: периметр фигур одинаков, форма различна

Это означает необходимость объединения подходов традиционного материаловедения и теории фракталов, поскольку диссипативные самоорганизующиеся структуры фрактальны (т. е. фрагментарны, периодичны, самоповторяются).

Фракталы — фигуры, обладающие свойством самоподобия; или объекты с дробной (нечелой) размерностью, обладающие свойством масштабной инвариантности, т. е. при любом увеличении соотношение между масштабом и каким-либо параметром фрактала постоянно и равно фрактальной размерности.

Термин «фрактал» введен Б. Мандельбротом. Он определил фрактал как структуру, состоящую из частей, которые в каком-то смысле подобны целому. **Фрактал** — это бесконечно самоподобная геометрическая фигура, каждый фрагмент которой повторяется при уменьшении масштаба. Масштабная инвариантность, наблюдаемая во фракталах, может быть либо точной, либо приближенной.

Основные свойства фракталов:

- имеют тонкую структуру, т. е. содержат произвольно малые масштабы;
- слишком нерегулярны, чтобы быть описанными на традиционном геометрическом языке;
- имеют некоторую форму самоподобия, допуская приближенную;
- имеют дробную размерность.

Различают геометрические, или регулярные, фракталы (типа множества Кантора, фигур Коха, треугольников и ковра Серпинского и др.) и естественные, природные фракталы (коллоидные агрегаты, облака, полимеры, пористые среды, дендриты, трещины, поверхности трещин твердых тел и др.).

Отличительным признаком фрактальных объектов является присущая им **дробная** размерность. Существует несколько принципиально разных определений размерности геометрического объекта: топологическая размерность и фрактальная размерность, или размерность Хаусдорфа (Минковского). Топологическая размерность всегда выражается целым числом; это не противоречит интуитивному представлению о том, что кривые одномерны, поверхности — двумерны, а пространственные фигуры — трехмерны. Топологическая размерность характерна для евклидовой геометрии.

Фрактальная размерность — D или Df (Хаусдорфова размерность) — дробная метрическая размерность, присущая фрактальным структурам. Чаще всего определяется степенной зависимостью между каким-либо параметром объекта (длиной границы, ребром куба, числом зерен фазы) и параметром масштаба (например ячейка квадратной сетки 2×2 , 3×3 и т. п.), на котором ведется изучение. Фрактальная размерность определяется из соотношения

$$L(\delta) = \text{const} \times \delta^{-D},$$

где L — параметр структуры; δ — параметр масштаба; D — фрактальная размерность.

График зависимости $\lg L(\delta)$ от $\lg \delta$ — прямая линия с угловым коэффициентом — D .

Размерность Минковского может служить аналогом размерности Хаусдорфа, удобным для использования в прикладных задачах. Эти размерности, как правило, совпадают, но алгоритм определения размерности Минковского намного эффективнее.

Следует иметь в виду, что различные уровни структуры (nano-, микро-, мезо- и макромасштаб) можно описывать в рамках мультифрактального анализа.

2. ГЕОМЕТРИЧЕСКИЕ И ЕСТЕСТВЕННЫЕ ФРАКТАЛЫ

Существует несколько принципов классификации фракталов, показанных на рисунке 4.



Рис. 4
Классификация фракталов

Геометрические, или регулярные, фракталы строят методом итераций (деления, измельчения). Наиболее часто встречающийся пример построения фрактала — триадная кривая Коха (рис. 5). Она получается путем превращения прямой линии «затравки» (шаг или поколение $n = 0$) в ломаную в определенной последовательности. Например, вторая сверху фигура триадной кривой Коха [48] на рисунке 5, так называемый образующий элемент (поколение $n = 1$), получена путем деления отрезка прямой ($n = 0$) на три части с последующим преобразованием прямой в ломаную (при этом число звеньев a увеличивается до 4). Если эту операцию продолжить для каждого прямолинейного участка, то получим серию из n поколений кривых с $n = 2, 3, 4, \dots$.

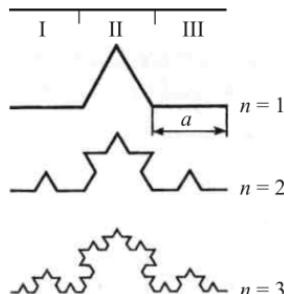


Рис. 5
Построение триадной кривой Коха [48]

Первое поколение состоит из четырех прямолинейных звеньев длиной $a = 1/3$ от первоначального отрезка каждое.

Тогда длина всей кривой первого поколения будет равна $L(a) = L(1/3) = 4/3$ для длины звена $a = 1/3$; длина всей кривой второго поколения $L(1/9) = (4/3)2 = 16/9$ для $a = 1/9$.

Длина каждого звена фрактала $a = 3^{-n}$ связана с числом поколений n соотношением

$$n = -\ln a / \ln 3.$$

Длина фрактала определяется соотношением

$$L(a) = \left(\frac{4}{3}\right)^n = \exp\left(-\frac{\ln a (\ln 4 - \ln 3)}{\ln 3}\right) = a^{1-D},$$

где D — фрактальная размерность кривой Коха, $D = \ln 4 / \ln 3 = 1,26$.

Другим примером фрактала могут служить фигуры типа множества Кантора (рис. 6). «Затравкой» здесь служит единичный отрезок, который делится на три части, а затем средняя часть выбрасывается. Такая операция повторяется для каждого последующего отрезка.

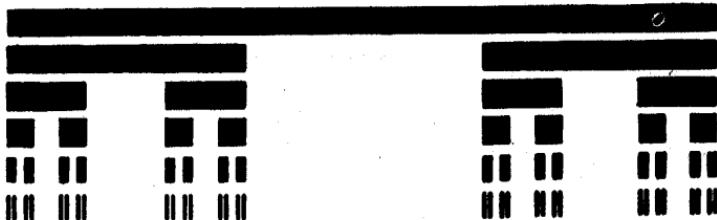


Рис. 6

Построение триадного Канторовского множества [48]

В результате деления при бесконечно большом числе поколений получим бесконечное множество точек, рассеянное по единичному отрезку («канторовская пыль»). Для рассматриваемого множества фрактальная размерность $D = \ln 2 / \ln 3 = 0,64$.



Рис. 7

Построение фрактала Вичека [48]

Аллен и Клуатр экспериментально и методом оптического преобразования Фурье определяли фрактальную размерность фрактала Вичека (рис. 7).

Построение фрактала, который называется ковер Серпинского, показано на рисунке 8.

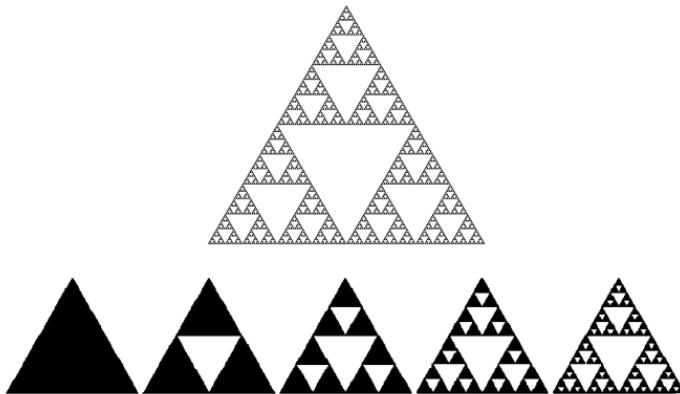


Рис. 8.
Треугольный ковер Серпинского [57]

Хорошо известны красивые геометрические фракталы, построенные при реализации алгоритмов множества Мандельброта и множества Жюлиа (рис. 9).

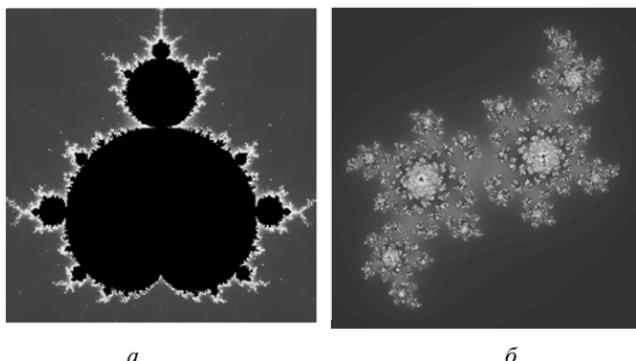


Рис. 9
Геометрические фракталы:

а — множество Мандельброта; *б* — множество Жюлиа.

При анализе **естественных фракталов** часто используют представления о **клusterах**. Кластерами называют комплексные соединения, в основе молекулярной структуры которых лежит объемная

ячейка из непосредственно связанных между собой атомов, играющая роль центрального атома. С развитием теории фракталов введено понятие *фрактальных кластеров*, которыми принято называть структуры, образующиеся при ассоциации твердых аэрозолей в газе в случае диффузного характера их движения. Это характерно, например, для облаков, туманов, частиц, находящихся в суспензиях, коллоидных растворах и т. п.

Многие реальные физические процессы хорошо описываются моделью кластеров. Это прежде всего относится к таким процессам, как электролиз, кристаллизация жидкости на подложке, осаждение частиц при напылении твердых аэрозолей. На рисунке 10 a представлена структура пленки NbGe₂, обладающая фрактальностью. Она была получена на кварцевой подложке, которую нагревали до температуры 840°C, сверху подложки подавали смесь гелия с парами германия, а в газовую мишень разбрызгивали ниобий. Толщина пленки была 0,2–0,5 мкм, а размер малых зерен — 0,1 мкм. Фрактальная размерность кластера была равна 1,88.



Рис. 10

Поверхностный кластер NbGe₂, образованный на кварцевой подложке (а), и фрактальный кластер, образованный при выделении цинка на поверхности в процессе электролиза (б) [48]

На рисунке 10 b представлен поверхностный кластер, образованный при электролитическом осаждении цинка. Его фрактальная размерность равна 1,66.

Другим примером естественных фракталов являются пленки палладия, полученные методом электронно-лучевого испарения и конденсации в вакууме (рис. 11).

Переход от однородной поликристаллической структуры к более неоднородной с хорошо выраженным границами зерен при сохранении фрактальной размерности — типичный пример масштабной инвариантности фрактала.

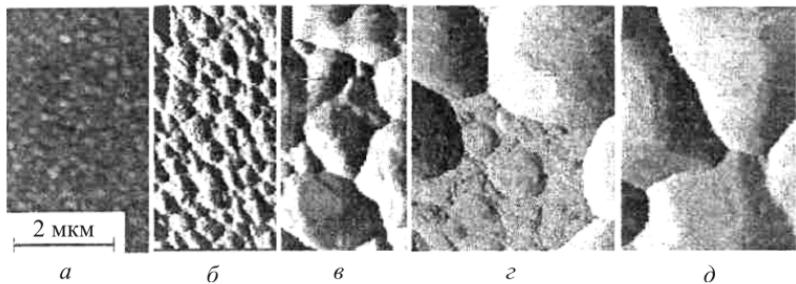


Рис. 11

Морфология поверхности пленки Pd толщиной 0,1 (а), 1 (б), 2 (в), 3 (г) и 4 мкм (д) [48]

Мультифрактальными свойствами обладают структуры пленок алюминия (рис. 12) на разных стадиях коалесценции (усложнения фрагментов структуры).

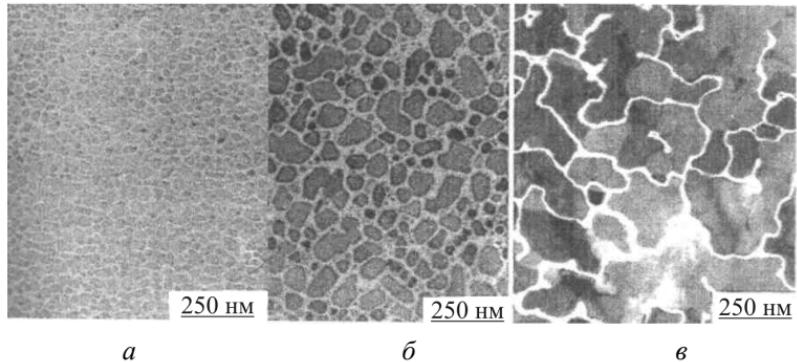


Рис. 12

Пленка алюминия на первой (а), второй (б) и третьей (в) стадии коалесценции [37]

Было установлено, что структурные изменения, вызванные процессом коалесценции (усложнения), сопровождаются изменением мультифрактальных характеристик: увеличением степени однородности, которая оценивается фрактальной размерностью, и периодичности.

К естественным фракталам относятся также структуры, образующиеся, например, при ассоциации твердых аэрозолей в газе в случае диффузионного характера их движения (облака, туманы, частицы супензий, коллоидных растворов и т. п.).

Фрактальные структуры наблюдаются и при таких процессах, как осаждение частиц при напылении твердых аэрозолей, синтез пористых материалов.

Наиболее интересными являются фракталы, образованные в металлах и сплавах в условиях подвода к ним энергии.

В процессе обмена энергией и веществом с окружающей средой в них формируются диссипативные структуры. А. П. Ершов и соавторы [16] экспериментально подтвердили образование фрактальных структур при взрыве конденсированных веществ.

Статистическая обработка электронно-микроскопических снимков показала, что фрактальностью обладают высокодисперсные дендритные частицы железа и его сплавов, мартенситоподобные структуры (чечевицеобразный, речный мартенсит, видманштеттова структура).

Конец ознакомительного фрагмента.
Приобрести книгу можно
в интернет-магазине
«Электронный универс»
e-Univers.ru