

# О методике структурного анализа твердых дисперсных систем

© В.И. Псарев, Л.А. Пархоменко

Запорожский национальный технический университет,  
69063 Запорожье, Украина

E-mail: dilap@zntu.edu.ua

(Поступила в Редакцию 25 сентября 2007 г.)

Предложены аналитические формулы для проведения системного анализа структурного огрубления микрочастиц дисперсной фазы. Для этой цели разработан метод установления сходства и различия между характеристиками экспериментальной гистограммы и теоретического распределения микрочастиц по размерам. Такой способ идентификации распределений позволяет устанавливать корреляцию между особенностями трансформации экспериментальных распределений — гистограмм — и внутрисистемными процессами.

PACS: 61.43.Bn, 61.72.-y, 61.72.Bb, 61.72.Cc

## 1. Введение

Ранее [1,2] были получены кинетические зависимости и теоретические формулы для описания распределений микрочастиц по размерам в дисперсной системе с учетом механизма их взаимодействия между собой и с веществом матричной фазы. Тем самым был намечен путь познания внутрисистемных процессов по признакам трансформации экспериментальных распределений со временем укрупнения микрочастиц. Такая связь может быть установлена методом выявления сходства и различия между экспериментальной гистограммой и теоретическим распределением.

Экспериментальные кривые распределения дисперсных частиц по размерам обладают положительной, нулевой и отрицательной асимметрией. Теми же признаками должны характеризоваться и теоретические распределения, относящиеся к разным механизмам укрупнения микрочастиц в дисперсной системе. Изменению ее состояния со временем (при постоянных температуре и давлении) соответствует множество теоретических функций плотности распределения по существенному признаку — размеру микрочастиц. Одно из распределений, выявленное идентификацией (отождествлением) с экспериментальной гистограммой, соответствующей фиксированному моменту времени и обладающей с ней наибольшим сходством, будет являться подобием экспериментального образа.

Настоящая работа посвящена разработке методики эффективного сопоставления распределений и проведения общего системного анализа с установлением степени достоверности полученных результатов путем привлечения традиционных методов статистического подхода и средств ЭВМ, необходимых для реализации сложных расчетов.

## 2. Исходные положения

Функцию плотности распределения микрочастиц по их относительным размерам, согласно приведенным в

работе [2] формулам (1) и (2), можно записать в виде

$$\varphi(u) = \frac{3v_k\gamma(u)}{v_k u \gamma(u) - u + 1} \exp \left[ -3v_k \int \frac{\gamma(u) du}{v_k u \gamma(u) - u + 1} \right], \quad (1)$$

где  $u = \frac{r}{r_k}$ ,  $r$  — эффективный радиус микрочастиц,  $r_k$  — критический радиус в системе микрочастиц,  $v_k = v_k(t)$  — приведенная скорость движения  $r_k$  в пространстве размеров дисперсных частиц,  $t$  — время;  $\gamma = \gamma(u)$  — фактор, определяющий механизм процесса.

В размерных переменных функция плотности распределения  $f(r, t) = C(r_k) r_k^{-4} \varphi(u)$  существенно зависит от явного вида  $\gamma(u)$ , получаемого на основании определенных физических представлений. В случае диффузионно-контролируемого механизма [3–6] укрупнения микрочастиц в дисперсной системе  $\gamma(u) = u^s$ , где  $s$  — параметр массопереноса от растворяющихся микрочастиц к растущим через матричную фазу. При диффузионно-реакционном механизме [1,6–8]  $\gamma(u) = \varepsilon u^2 + u^{1-\alpha}$ , где  $\varepsilon = \frac{K r_k}{D}$ ,  $K$  — скорость прохождения атомов через межфазную границу;  $D$  — коэффициент диффузии;  $\alpha$  — параметр различимости микрочастиц по признаку их индивидуальной склонности к растворению и росту [1]. Было показано [9], что в интервале  $0 \leq \alpha \leq 1$  при  $\varepsilon = 0$  параметр  $s = 1 - \alpha$ . Если же фактором является объемная доля вещества дисперсной фазы, характеризуемая параметром  $\beta$  [10], то для интервала его изменения  $0 \leq \beta \leq 1$   $\gamma(u) = u^2(1 + \beta u)^{-1}$ ; для интервала  $1 < \beta < \infty$   $\gamma(u) = u^2(u + \beta^{-1})^{-1}$  [9]. В научной литературе есть и другие примеры явного вида  $\gamma(u)$ .

При сопоставлении экспериментальной гистограммы с теоретическим распределением возникает необходимость в нахождении численных значений параметров, определяющих фактор  $\gamma(u)$  и обеспечивающих максимальное сходство между распределениями. Такая задача решалась для частного случая [11]. Теперь же, используя выражение (1), получим общее решение. После математических преобразований, аналогичных применяемым в работе [11], оно может быть записано в виде уравнения

моментов

$$v_k(n-3)M_1 + 2v_kM_2 - nM_3 - 2M_4 = 0, \quad (2)$$

$$\text{где } M_1 = \int_0^{u_g} \gamma^2 u^n \varphi(u) du; \quad M_2 = \int_0^{u_g} \gamma \gamma' u^{n+1} \varphi(u) du; \quad M_3 = \int_0^{u_g} \gamma u^{n-1} (u-1) \varphi(u) du; \quad M_4 = \int_0^{u_g} \gamma' u^n (u-1) \varphi(u) du; \quad \gamma' —$$

первая производная по  $u$  от  $\gamma = \gamma(u)$ ;  $u_g = \frac{r_g}{r_k}$  — верхняя граница относительных размеров микрочастиц,  $r_g$  — их наибольший радиус (размах распределения  $f(r, t)$ );  $n$  — целые и дробные числа.

При заданном  $\gamma(u)$  уравнение (2) преобразуется и приобретает конкретное содержание, необходимое и достаточное для определения численных значений параметров дисперсной системы. Их испытание на достоверность является следующим шагом анализа.

Характеризующие дисперсную систему функции плотности распределения по мере ее движения к состоянию равновесия все время трансформируются. Их характеристики (размах, мода и модальное значение радиуса, асимметрия и др.) непрерывно изменяют свои численные значения. Сохраняет инвариантность только соотношение между смешанными моментами функций плотности распределения. Для его вывода можно воспользоваться уравнением моментов распределений, приведенным в работе [12] (см. (8)); в работе [2] оно значится под номером (6). Решая его с учетом (1), получим взаимосвязь между моментами теоретических функций плотности распределения вида

$$(3-n)v_k M_{nm} = nL_n + mL_m, \quad (3)$$

$$\text{где } M_{nm} = \int_0^{u_g} M du \text{ — смешанный момент порядка } n \text{ и } m; \quad M = u^n (u_g - u)^m \varphi(u); \quad L_n = M_{n-1, \gamma, m} - M_{n-\gamma, m}; \quad L_m = M_{n+1-\gamma, m-1} - v_k M_{n+1, m-1} - M_{n-\gamma, m-1}.$$

$$\text{В терминах моментов } M_{n-1-\gamma, m} = \int_0^{u_g} M [u\gamma(u)]^{-1} du;$$

$$M_{n-\gamma, m-1} = \int_0^{u_g} M [(u_g - u)\gamma(u)]^{-1} du; \quad M_{n-\gamma, m} = \int_0^{u_g} M [\gamma(u)]^{-1} du;$$

$$M_{n+1-\gamma, m-1} = \int_0^{u_g} uM [(u_g - u)\gamma(u)]^{-1} du; \quad M_{n+1, m-1} =$$

$$= \int_0^{u_g} uM (u_g - u)^{-1} du; \quad n \text{ и } m \text{ — целые и дробные числа.}$$

На отдельных частных примерах проиллюстрируем применение полученных формул.

### 3. Однопараметрические распределения

Огрубление микрочастиц в дисперсной системе при диффузионно-контролируемом механизме характеризуется факторами  $\gamma(u) = u^s$  и  $v_k(t) = \frac{dr_k}{dt} \frac{r_k^s}{A_s}$ , где  $A_s$  соответствует типу массопереноса при разных значениях

**Таблица 1.** Характеристики однопараметрических функций плотности распределения микрочастиц по размерам при разных значениях фактора  $\gamma(u) = u^s$  в выражении (1)

$s$	$u_g$	$v_k$	$u_m$	$S_k$	$u_s$	$k_s$
1/8	9	0.6754	0.1070	0.7828	0.9322	1.0727
1/4	5	0.5350	0.300	0.6176	0.7771	1.2868
1/3	4	0.4725	0.4353	0.6093	0.7636	1.3036
1/2	3	0.3849	0.6633	0.3243	0.7440	1.3441
3/5	8/3	0.3470	0.7663	0.2178	0.7465	1.3396
2/3	5/2	0.3257	0.8225	0.0749	0.8734	1.1449
3/4	7/3	0.3027	0.8812	-0.2350	0.8772	1.1400
1	2	0.25	1	-0.2841	0.8894	1.1250
2	3/2	0.1481	1.1346	-0.9226	1	1

параметра  $s$  [2,9]. При непрерывном его изменении из формул (8)–(11) [2] следуют характеристики распределений, зависящие от параметра  $s$ ,

$$u_g = (1+s)s^{-1}, \quad v_k = (1+s)^{-1} u_g^{-s} = u_g^{-(1+s)} s^{-1}, \quad (4)$$

а также уравнение для определения  $u_m = \frac{r_m}{r_k}$ , где  $r_m$  — модальный радиус микрочастиц,

$$4v_k u^{i+s} + u(s-1) - s|_{u_m} = 0 \quad (5)$$

и уравнение для определения точек перегиба  $u_p$

$$20v_k^2 u^{2+2s} - 13v_k u^{1+s} z + 2z^2 - [s(s-1)(u-1) + 2sz](v_k u^{1+s} - u + 1)|_{u_p} = 0, \quad (6)$$

где  $z = s + u(1-s)$ .

При том же условии в соотношении моментов (3)

$$L_n = M_{n-1-s, m} - M_{n-s, m} \text{ и } L_m = M_{n+1-s, m-1} - v_k M_{n+1, m-1} - M_{n-s, m-1}.$$

В частности, положив  $n=3$ , получим  $3|L_3| = m|L_m|$ , а при  $n=3$  и  $m=0$  имеет место соотношение  $M_{2-s} = M_{3-s}$ .

Уравнение моментов (2) может быть преобразовано к виду

$$v_k(2s+n-3)M_{n+2s} - (n+2s)M_{n+s} + (n+2s)M_{n+s-1} = 0. \quad (7)$$

или же в размерных переменных, после сокращения на  $r_k^{n+s-2}$ , получим

$$r_k^{1+s} - \frac{M'_{n+s}}{M'_{n+s-1}} r_k^s + \frac{v_k(2s+n-3)}{n+2s} \frac{M'_{n+2s}}{M'_{n+s-1}} = 0, \quad (8)$$

где  $M'_\chi = \int_0^{r_g} r^\chi f(r, t) dr$ ,  $\chi = n+s, n+s-1, n+2s$ .

Задавая значение  $n$ , можно сформировать систему уравнений и, решая ее, определить  $r_k$  и  $s$ .

**Таблица 2.** Данные массивов и характеристики примерных распределений при разных значениях фактора  $\gamma(u) = u^s$

Номер массива	Значения переменной $u$									
	0	0.2	0.4	0.6	0.8	1.0	1.2	1.4	1.6	1.8
1	0	3.776	8.971	15.355	21.663	24.288	20.255	8.174	0.478	0.001
2	0	5.776	10.971	17.355	23.663	24.288	20.255	8.174	0.478	0.001
3	0	3.776	8.971	15.355	21.663	24.288	22.255	10.174	2.478	0.01
	$s$	$q_s \cdot 10^4$	$u_g$	$v_k$	$u_m$	$u_{p_1}$	$u_{p_2}$	$u_{p_3}$	$u_s$	$k_s$
1	1	1.2	2	0.25	1	—	0.6084	1.3458	0.8911	1.1223
2	0.82	3.0	2.219	0.2858	0.922	0.1053	0.4129	1.3328	0.8630	1.1587
3	1.34	0.2	1.7452	0.2022	1.082	—	0.8078	1.3361	0.9186	1.0886

Примечание.  $q_s = \left| 1 - \frac{M_{3-s}}{M_{2-s}} \right|$  — параметр идентификации распределения.

Пусть  $n = 3 - 2s$ , тогда из уравнения (7) следует  $M_{3-s} = M_{2-s}$ , а из уравнения (8) —  $r_k = \frac{M_{3-s}'}{M_{2-s}'}$  =  $u_s^{-1} r_s$ , где  $u_s$  — среднее значение  $u$  в распределении  $\varphi(u)$ ;  $r_s$  — среднее значение  $r$  в распределении  $f(r, t)$ . Или же, положив в (8)  $n = 0, 1$  и  $n + s = 1$ , получим систему из трех уравнений. Из нее, например, следует при  $s = 0$  ( $v_k = 1$ ) и  $n = 1$  значение  $r_k = 3r_s$ , а при  $s = 1$  ( $v_k = 0.25$ ) и  $n = 0$   $r_k = 9/8r_s$  [6]. При  $s = 2$  ( $v_k = 4/27$ )  $M_1 = M_0$  и  $r_k = r_s$  [3].

В табл. 1 приведены рассчитанные с помощью формул (4) и (5) характеристики теоретических распределений при разных значениях  $s$ . Численные значения характеристик  $u_g, v_k, u_m$  и  $u_p$  при задании  $s$  определялись с помощью формул (4)–(6). Для вычисления значений  $u_s$  и  $k_s$  предварительно с помощью (1) при задании  $\gamma(u) = u^s$  находили явный вид функции  $\varphi(u)$ .

Численные значения  $k_s = u_s^{-1}$  позволяют осуществить переход от экспериментального среднего радиуса  $r_s$  к критическому  $r_k$ . Знак коэффициента  $S_k$  в табл. 1 указывает на асимметрию теоретических распределений по мере изменения параметра  $s$ .

В табл. 2 приведены массивы данных трех примерных распределений. Первое из них характеризуется отрицательной асимметрией ( $S_k < 0$ ), достигает максимума при  $u_m = 1$ , а верхняя граница находится при  $u_g \cong 2$ . После нормировки распределения находим моменты и с помощью формулы  $M_{3-s} = M_{2-s}$  определяем  $s \cong 1$ . Отношение  $\frac{M_2}{M_1} = 0.99988 \cong 1$ , значение  $u_s = 0.89106$ , а  $k_s = u_s^{-1} = 1.1223 \cong 9/8$ . Таким образом, предположение подтверждается. Следовательно, для массива данных первого распределения, согласно формулам (4)–(8),  $u_g = 2, v_k = 0.25, u_m = 1, u_{p_1} = 0.6084, u_{p_2} = 1.3458$ . С помощью выражения (1) находим  $\varphi(u) = Cu(2 - u)^{-5} \exp\left(-\frac{6}{2-u}\right)$  [6].

Аналогичным образом проведены расчеты для второго и третьего массивов примерных распределений при условии  $M_{3-s} = M_{2-s}$ . Характерно, что при  $s < 1$  коэффициент  $k_s > 9/8$ ; при  $s > 1$  величина  $k_s < 9/8$  [6].

#### 4. Двупараметрические распределения

Более полное отображение кинетических особенностей оствальдовской коагуляции микрочастиц в дисперсной системе достигается при условии  $\gamma(u) = \varepsilon u^2 + u^{1-\alpha}$ . При  $\alpha = \varepsilon = 0$  с помощью (1) можно получить распределение Вагнера [6]. В этом случае дисперсная система должна быть структурно однородной (тотальной): ее микрочастицы имеют одинаковые индивидуальные склонности к растворению и росту. Предметное содержание такой системы проявляется, например, в повышении силы критического тока в керамическом высокотемпературном сверхпроводнике, содержащем подобную дисперсную фазу [13].

При других значениях параметров  $\alpha$  и  $\varepsilon$  с помощью (1) можно получить аналитический вид и характеристики функций плотности распределения. Их численные значения приведены в табл. 3. Соответствующие формулы для их определения следуют из приведенных в работе [2] выражений (8)–(11). Полученные иным путем они содержатся в более ранних наших работах [1,7].

**Таблица 3.** Характеристики двупараметрических функций плотности распределения микрочастиц по размерам при разных значениях фактора  $\gamma(u) = \varepsilon u^2 + u^{1-\alpha}$  в выражении (1)

$\alpha$	$\varepsilon$	$u_g$	$v_k$	$S_k$	$u_s$	$k_s$
0	0.2	1.7913	0.1816	-0.4693	0.9163	1.0913
1/4	0.2	1.8829	0.2024	-0.3260	0.8763	1.1412
1/3	0.2	1.9125	0.2100	-0.2155	0.8216	1.2098
1/2	0.2	1.9676	0.2259	-0.1593	0.8238	1.2139
3/4	0.2	2.0347	0.2515	0.0416	0.7560	1.3227
5/6	0.2	2.0520	0.2603	0.1138	0.7296	1.3706
2/3	0	4	0.4725	0.3093	0.6533	1.5367
2/3	0.1	2.2525	0.3058	0.1480	0.7352	1.3602
2/3	0.2	2.0147	0.2427	-0.0477	0.7754	1.2897
2/3	0.3	1.9002	0.2048	-0.1801	0.8029	1.2455
2/3	0.5	1.7322	0.1567	-0.3596	0.8401	1.1903
2/3	0.7	1.7199	0.1281	-0.4802	0.8647	1.1565
2/3	1	1.6660	0.1009	-0.670	0.9227	1.0836

**Таблица 4.** Характеристики распределений микрочастиц  $Al_3Mg_2$  по размерам после отпуска алюминий-магниевого сплава (80 wt.% Al + 20 wt.% Mg) при температуре 400°C, рассчитанные в предположении действия двух механизмов их огрубления (1) и (2)

Номер расчета	$u_g$	$v_k$	$u_m$	$u_p$	$r_k \cdot 10^4$ , cm	$r_m \cdot 10^4$ , cm	$r_g \cdot 10^4$ , cm	$r_p \cdot 10^4$ , cm
5 h; $N_0 = 13.01 \cdot 10^9 \text{ cm}^{-3}$ ; $r_s = 9.13 \cdot 10^{-5} \text{ cm}$ ; $r'_g = 8.75 \cdot 10^{-4} \text{ cm}$ ; $r'_m = 7.5 \cdot 10^{-5} \text{ cm}$ ; 1 ( $s = 0.278$ ; $q_s = 4.5 \cdot 10^{-4}$ ); 2 ( $\alpha = 0.836$ ; $\varepsilon = 5.3 \cdot 10^{-4}$ )								
1	4.5971	0.5120	0.3462	0.8837	2.30	0.796	10.573	2.032
2	6.2221	0.6126	0.1658	0.5730	1.728	0.287	10.750	0.991
25 h; $N_0 = 67.02 \cdot 10^7 \text{ cm}^{-3}$ ; $r_s = 3.15 \cdot 10^{-4} \text{ cm}$ ; $r'_g = 10.75 \cdot 10^{-4} \text{ cm}$ ; $r'_m = 1.75 \cdot 10^{-4} \text{ cm}$ ; 1 ( $s = 0.295$ ; $q_s = 6.3 \cdot 10^{-5}$ ); 2 ( $\alpha = 0.729$ ; $\varepsilon = 3.08 \cdot 10^{-2}$ )								
1	4.3898	0.4991	0.3740	0.9214	5.05	1.889	22.169	4.653
2	2.8396	0.4113	0.4556	1.1162	4.842	2.206	13.75	5.405
50 h; $N_0 = 53.89 \cdot 10^7 \text{ cm}^{-3}$ ; $r_s = 3.73 \cdot 10^{-4} \text{ cm}$ ; $r'_g = 11.75 \cdot 10^{-4} \text{ cm}$ ; $r'_m = 3.25 \cdot 10^{-4} \text{ cm}$ ; 1 ( $s = 0.466$ ; $q_s = 1.7 \cdot 10^{-5}$ ); 2 ( $\alpha = 0.587$ ; $\varepsilon = 3.58 \cdot 10^{-2}$ )								
1	3.1459	0.3999	0.6226	1.1754	5.20	3.237	16.36	6.112
2	2.5794	0.3566	0.6622	1.2471	5.137	3.402	13.25	6.406
75 h; $N_0 = 43.97 \cdot 10^7 \text{ cm}^{-3}$ ; $r_s = 4.24 \cdot 10^{-4} \text{ cm}$ ; $r'_g = 11.3 \cdot 10^{-4} \text{ cm}$ ; $r'_m = 4.0 \cdot 10^{-4} \text{ cm}$ ; 1 ( $s = 0.554$ ; $q_s = 5.9 \cdot 10^{-5}$ ); 2 ( $\alpha = 0.355$ ; $\varepsilon = 1.53 \cdot 10^{-2}$ )								
1	2.8050	0.3634	0.7218	1.2441	5.40	3.898	15.15	6.718
2	2.4086	0.3158	0.8310	1.3069	5.285	4.392	12.73	6.907
150 h; $N_0 = 31.85 \cdot 10^7 \text{ cm}^{-3}$ ; $r_s = 5.04 \cdot 10^{-4} \text{ cm}$ ; $r'_g = 11.75 \cdot 10^{-4} \text{ cm}$ ; $r'_m = 5.25 \cdot 10^{-4} \text{ cm}$ ; 1 ( $s = 0.782$ ; $q_s = 5.5 \cdot 10^{-5}$ ); 2 ( $\alpha = 0.092$ ; $\varepsilon = 0.01$ )								
1	2.2788	0.2947	0.9007	1.3268	5.85	5.269	13.33	7.762
2	2.0777	0.2620	0.9695	0.0490	5.776	5.60	12.0	0.283
				0.5331				3.079
				1.3434				7.759

Из выражения (2) следует уравнение моментов, позволяющее определять возможные значения параметров  $\alpha$  и  $\varepsilon$  экспериментальной гистограммы при ее сопоставлении с теоретическим распределением. В размерных переменных оно имеет следующий вид (см. также [7]):

$$\begin{aligned}
 & v_k \varepsilon^2 (n+1+\alpha) r_k^{-(n+3+\alpha)} M'_{n+4+\alpha} + 2\varepsilon n v_k r_k^{-(n+2)} M'_{n+3} \\
 & - \varepsilon (n+4+\alpha) r_k^{-(n+1+\alpha)} M'_{n+2+\alpha} + \varepsilon (n+4+\alpha) r_k^{-(n+\alpha)} \\
 & \times M'_{n+1+\alpha} + v_k (n-1-\alpha) r_k^{-(n+1-\alpha)} M'_{n+2-\alpha} \\
 & - \varepsilon (n+2-\alpha) r_k^{-n} M'_{n+1} + (n+2+\alpha) r_k^{-(n-1)} M'_n = 0,
 \end{aligned} \quad (9)$$

где  $M'_\chi = \int_0^{r_g} r^\chi f(r, t) dr$  — моменты гистограммы-образа порядка  $\chi = n, n+1, n+1+\alpha$  и т.д.

Положив в (9)  $n = 0.1$  и  $1+\alpha$ , получим соответственно функциональные уравнения  $S_0, S_1, S_{1+\alpha}$ . Между образом и подобием должно быть полное сходство, если моменты образа обратят в нуль эти функционалы при одних и тех же значениях параметров  $\alpha$  и  $\varepsilon$ . Если же экспериментальная гистограмма содержит скрытые или неучтенные при теоретических расчетах факторы, то можно говорить лишь о достижении минимума величи-

ной  $f = |S_0| + |S_1| + |S_{1+\alpha}|$ . В этом случае имеет место только частичное сходство между образом и подобием и различие по ряду других признаков (фиксируемых моментами гистограммы). Заметим, в уравнении моментов (9) каждое слагаемое имеет один и тот же порядок величины ( $r_k^n M'_{n+1} \approx r_s$ ), и это в определенной степени сдерживает „потери точности“ при расчетах: моменты гистограммы имеют разный порядок численных значений.

Соотношение между моментами (3) допускает разные возможности испытания результатов идентификации на достоверность. Одна из них — по данным сравнения моментов образа. Например, при заданном  $\alpha = 1/3$  и  $\varepsilon = 0.6$ , т.е.  $\gamma(u) = 0.6u^2 + u^{2/3}$ , момент  $M_{4/3} = \frac{4}{5v_k} (M_{4/3-\gamma(u)} - M_{4/3-\gamma(u)}) = 0.8998$ . Тот же момент  $M_{4/3} = \int_0^{u_g} u^{4/3} \varphi(u) du = 0.9003$  ( $u_g = 1.7129$ ,  $v_k = 0.1302$ ). А если в соотношении (3) положить  $n = 3$  и  $m = 0$ , то момент  $M_{3-\gamma(u)} = 0.5592$ , а  $M_{3-\gamma(u)} = 0.5593$ . Совпадение численных значений моментов, рассчитанных по разным формулам, указывает на тождественное сходство сравниваемых распределений, в рассмотренном примере — на сходство теоретического распределения самого с собой с точностью до четвертого знака после запятой.

В табл. 4 приведены характеристики распределений микрочастиц  $\beta$ -фазы ( $\text{Al}_3\text{Mn}_2$ ) по размерам после отпуска алюминиево-магниевого сплава (80 wt.% Al + 20 wt.% Mg) при температуре  $400^\circ\text{C}$  [14]. Расчеты производились в предположении действия диффузионно-контролируемого механизма (1) ( $\gamma(u) = u^s$ ) и механизма (2), дополнительно учитывающего межфазный фактор ( $\gamma(u) = \varepsilon u^2 + u^{1-\alpha}$ ). Соответствующие действующим механизмам характеристики закономерно изменяются со временем изотермического нагревания. Непрерывно увеличивается параметр  $s$  от значения 0.278 (5 h) до 0.782 (150 h); соответственно происходит уменьшение параметра  $\alpha$  от значения 0.836 (5 h) до 0.092 (150 h). Уменьшаются численные значения характеристик  $N_0$ ,  $u_g$  и  $v_k$  и увеличиваются  $u_m$ ,  $u_p$ ,  $r_k$ ,  $r_s$ ,  $r_g$  при сохранении формы кривых плотности распределения: выпуклых к оси ординат в интервале  $(0, u_m)$  (нет точек перегиба) и с точкой перегиба в интервале  $(u_m, u_g)$ .

Однако данным, соответствующим механизму (1), после нагревания в течение 150 h отвечает кривая плотности распределения с одной точкой перегиба, а при действии механизма (2) — с тремя точками перегиба. Последнее соответствует экспериментальному распределению: в процессе коагуляции в сплаве происходит накопление микрочастиц докритического размера ( $r < r_k$ ). Это обстоятельство в свою очередь вызывает увеличение численного значения коэффициента  $S_k(k)$  (см. табл. 3 в работе [2]).

Со временем изотермической выдержки при нагревании происходит заметное уменьшение в различии численных значений характеристик, соответствующих разным механизмам. Процесс оствальдовской коагуляции микрочастиц  $\text{Al}_3\text{Mg}_2$  становится более диффузионным и менее осложненным сопутствующими процессами. Признаком этого обстоятельства является также уменьшение со временем разницы в значениях критического размера микрочастиц  $r_k$ , рассчитанных при действии механизмов (1) и (2). При слабом влиянии межфазного фактора огрубление дисперсной фазы определяется диффузионным механизмом.

Как можно заметить, влияние межфазного фактора сказывается на заметном различии рассчитанных значений  $r_g$  и экспериментальных  $r'_g$ . Значения  $r_g$  для механизма (1), как правило, всегда больше соответствующей величины для механизма (2). Этот факт закономерен, так как укрупнение растущих частиц при диффузионном механизме (1) ничем не ограничено. При действии механизма (2) сдерживающим фактором роста частиц может являться их переогранка равновесными гранями.

Однако следует принимать во внимание и то обстоятельство, что в сплаве в небольшом количестве всегда присутствуют и более крупные частицы ( $r > r'_g$ ). Но из-за ничтожной вероятности их сечения по большому кругу плоскостью шлифа выявить их практически невозможно. По своему размеру они больше соответствуют значениям  $r_g$  при действии механизма (2), как это видно из табличных данных.

Проведенные расчеты с учетом возможного действия разных механизмов в процессе огрубления дисперсных фаз усиливают полноту и содержательность системного анализа дисперсности микрочастиц в их системе.

## 5. Заключение

Показано, что характерные структурные свойства дисперсных систем могут быть выявлены путем анализа распределений микрочастиц по размерам, их моментов и соотношений между ними с привлечением средств ЭВМ. Введение факторов, определяющих их укрупнение, позволяет обобщить задачу о кинетических особенностях эволюции дисперсной системы. Предложен метод установления истинности фактора путем идентификации экспериментального распределения с теоретическим.

Получены аналитические формулы и уравнения, с помощью которых можно оценить качество теоретических функций распределения. Приведены примеры их применения с учетом действующих механизмов оствальдовской коагуляции микрочастиц.

Дано методическое описание способа проведения системного анализа дисперсной фазы. Для этой цели устанавливается сходство и различие между экспериментальным распределением и теоретическим, а по результатам анализа — качество и достоверность идентификации между ними. Обнаруженные при сопоставлении различия в сходстве и сходство в различиях — источник научной информации о процессах в дисперсных системах.

## Список литературы

- [1] В.И. Псарев. Изв. вузов. Физика **33**, 12, 53 (1990).
- [2] В.И. Псарев, Л.А. Пархоменко. ФТТ **48**, 243 (2006).
- [3] И.М. Лифшиц, В.В. Слезов. ЖЭТФ **35**, 479 (1958).
- [4] R.D. Vengrenovith. Acta Met. **30**, 1079 (1982).
- [5] С.А. Кукушкин, А.В. Осипов. ЖЭТФ **113**, 2193 (1998).
- [6] C. Wagner. Z. Electrochem. **65**, 581 (1961).
- [7] В.И. Псарев, Л.А. Пархоменко, А.Ф. Куликов. Металлы **5**, 154 (1994).
- [8] В.И. Псарев. Металлы **6**, 84 (1992).
- [9] В.И. Псарев. Металлы **5**, 90 (2003).
- [10] A.J. Ardell. Acta Met. **20**, 61 (1972).
- [11] В.И. Псарев. Изв. вузов. Физика **34**, 12, 80 (1991).
- [12] В.И. Псарев. Изв. вузов. Физика **40**, 4, 92 (1997).
- [13] В.И. Псарев, А.Ф. Куликов, Л.А. Пархоменко. Неорганические материалы **40**, 505 (2004).
- [14] В.И. Псарев, А.С. Барсегян, А.Ф. Куликов. Изв. вузов. Физика. **36**, 2, 8 (1993).