

Вплив адитивного гаусового шуму на фазову діаграму режимів фрагментації металу при інтенсивній пластичній деформації

О.В. Хоменко*, Д.С. Троценко, Я.О. Кравченко, М.О. Хоменко

Сумський державний університет, вул. Римського-Корсакова, 2, 40007 Суми, Україна

(Одержано 15.05.2017, у відредагованій формі – 14.06.2017, опубліковано online 30.06.2017)

На основі нерівноважної еволюційної термодинаміки досліджується процес фрагментації твердих тіл під час обробки методами інтенсивної пластичної деформації. Опис дефектних структур, що утворюються, проводиться у наближенні дводефектної моделі з урахуванням щільності меж зерен та дислокацій, які визначають формування дрібнозернистої структури та межі пластичної течії. Врахування додаткових змінних у розвиненні густини внутрішньої енергії та введення адитивних шумів основних параметрів дозволили більш точно описати самоузгоджену поведінку структурних дефектів у процесі формування граничних субмікрористалічних чи нанокристалічних структур. Побудована фазова діаграма, що залежно від інтенсивності шуму та пружної деформації визначає області реалізації різних типів граничних (стаціонарних) структур. Встановлено, що зі збільшенням інтенсивності флуктуацій та значень пружних деформацій розмір зерен у граничних структурах зменшується. Знайдено умови одночасного існування двох граничних (стаціонарних) структур, які відповідають режиму формування фаз з різними розмірами зерен.

Ключові слова: Межа зерна, Дислокація, Фазовий перехід, Фазова діаграма, Внутрішня енергія, Адитивний шум, Фрагментація.

DOI: [10.21272/jnep.9\(3\).03045](https://doi.org/10.21272/jnep.9(3).03045)

PACS numbers: 05.70.Ln, 61.72.Mm,
62.20.F-, 61.72.Lk, 64.30.Ef, 81.30.-t,
05.10.Gg, 74.40.+k

1. ВСТУП

Фізичні процеси, що протікають у металах при інтенсивній пластичній деформації (ІПД), з одного боку, досить складні, а з іншого – універсальні [1, 2]. Для опису процесу фрагментації металеві структури останнім часом розвивається підхід нерівноважної еволюційної термодинаміки (НЕТ), що базується на поєднанні принципів класичної нерівноважної термодинаміки та еволюційних рівнянь Ландау [3-6]. В рамках методу вдалося правильно відтворити еволюцію дефектної підсистеми (дислокацій та меж зерен (МЗ)) і пов'язану з нею кінетику межі пластичної течії (зміцнення). Теорія описує подрібнення зернистої структури полікристалічних тіл та формування граничної (стаціонарної) субмікрористалічної (СМК) чи нанокристалічної (НК) структури.

У систему еволюційних рівнянь в якості незалежних термодинамічних змінних входять щільності двох типів дефектів (дислокацій та МЗ), а також компоненти тензора пружних деформацій, що дозволяють однозначно відобразити специфіку фрагментації МЗ та супроводжувальні процеси. У той же час запропонована теорія не враховує вплив флуктуацій основних параметрів, що в деяких випадках можуть істотно змінити характер еволюції системи та навіть привести до виникнення нових станів. Наприклад, введення адитивних шумів при дослідженні тертя двох атомарно-гладких слюдяних поверхонь, розділених ультратонкою плівкою мастила дозволило описати переривчастий режим (stick-slip) [7]. Відзначимо, що такий режим спостерігався експериментально, і його опис не представляється можливим при використанні тієї ж моделі в детерміністичному випадку [5, 6].

Очевидно, що виникнення якісно нових режимів функціонування та станів відбувається за рахунок реалізації процесів самоорганізації [8, 9]. Відомо, що самоорганізуватися можуть тільки відкриті та нерівноважні системи, які взаємодіють з навколишнім середовищем. Вважається, що процес обробки металеві структури методами ІПД проходить в сильно нерівноважних умовах (оскільки процес фрагментації відбувається достатньо швидко, величина виникаючого силового поля напружень приймає різні значення, та виділена за рахунок здійснення роботи теплота не встигає відводитись тощо), тому система не має постійних у часі властивостей середовища та її розв'язки приймають випадкові значення. Отже, реальний процес фрагментації полікристалічної структури зразка та формування стійкої граничної (стаціонарної) структури має випадковий характер. Очевидно, що флуктуації зовнішнього поля (зовнішній шум) є основною причиною виникнення самоорганізації у нерівноважній системі. Оскільки інтенсивність зовнішнього шуму не залежить від розмірів системи, то його вплив переважає у порівнянні з флуктуаціями внутрішнього шуму (флуктуаціями основних параметрів стану), що приводить, в рамках представленої теорії НЕТ [3, 4], лише до блукань в околі максимумів внутрішньої енергії. При цьому відомо, що в ієрархічних системах адитивний шум нижніх рівнів проявляє себе як мультиплікативний шум (залежить від параметра порядку системи) на верхньому рівні, який вже обумовлює виникнення додаткових станів чи фаз та забезпечує перехід між граничними структурами під час ІПД. Таким чином, метою даної роботи є дослідження процесу еволюції структурних дефектів у ході ІПД з урахуванням адитивних флуктуацій основних параметрів. Воно до-

* o.khomenko@mss.sumdu.edu.ua

зволить більш якісно представити можливі режими фрагментації та описати супроводжувальні самоорганізовані процеси, що неможливо досягнути, застосовуючи детерміністичне наближення [5, 6]. При цьому опис переходів від однієї граничної (стаціонарної) структури до іншої здійснюється аналогічно до теорії рівноважних фазових перетворень Ландау [10] та моделей нерівноважних перетворень при сталому значенні параметра зовнішньої дії.

2. ПІДХІД НЕРІВНОВАЖНОЇ ЕВОЛЮЦІЙНОЇ ТЕРМОДИНАМІКИ З УРАХУВАННЯМ ШУМУ

2.1 Термодинамічний потенціал

Як відомо, механічна робота, яка виконується в процесі ПД, приводить до зростання внутрішньої енергії металів. Під час холодної обробки більша частина роботи йде на формування структурних дефектів та нагрівання зразка [3, 4]. Найбільший вплив на хід процесу обробки мають два типи дефектів – МЗ та дислокації, що визначають ступінь фрагментації твердих тіл та відповідають за формування межі пластичної течії у металі [1, 2, 11, 12]. Таким чином, базовий енергетичний потенціал для густини внутрішньої енергії зручно представити у вигляді обмеженої поліноміальної залежності від щільності обраних типів дефектів:

$$u(h_g, h_D) = u_0 + \sum_{m=g,D} \left(\varphi_{0m} h_m - \frac{1}{2} \varphi_{1m} h_m^2 + \frac{1}{3} \varphi_{2m} h_m^3 - \frac{1}{4} \varphi_{3m} h_m^4 \right) + \varphi_{gD} h_g h_D - \psi_{gD} h_g^2 h_D - \phi_{gD} h_g h_D^2, \quad (2.1)$$

де u_0 , φ_{km} , φ_{gD} , ψ_{gD} , ϕ_{gD} – сталі коефіцієнти, які відображають рівень відліку внутрішньої енергії та енергію взаємодії дефектів один з одним і, відповідно, з дефектами інших структурних рівнів, тобто характеризують загалом їх нерівноважність. Зокрема, коефіцієнти u_0 та φ_{km} ($k=0,1$) залежать від керуючого параметра ε_{ij}^e (пружної деформації) та визначаються наступним чином:

$$u_0 = \frac{1}{2} M (\varepsilon_{ii}^e)^2 + 2\mu I_2, \quad (2.2)$$

$$\varphi_{0m} = \varphi_{0m}^* + g_m \varepsilon_{ii}^e + \left(\frac{1}{2} \bar{M}_m (\varepsilon_{ii}^e)^2 + 2\bar{\mu}_m I_2 \right), \quad (2.3)$$

$$\varphi_{1m} = \varphi_{1m}^* + 2e_m \varepsilon_{ii}^e, \quad (2.4)$$

де $M = \lambda + 2\mu$ – модуль одностороннього стиснення матеріалу; ε_{ii}^e , $I_2 \equiv (-\varepsilon_{ii}^e \varepsilon_{jj}^e + \varepsilon_{ij}^e \varepsilon_{ji}^e) / 2$ – перший та другий інваріанти тензора пружних деформацій; додатна стала g_m відповідає за процес генерації структурних дефектів при розтягненні $\varepsilon_{ii}^e > 0$, або за їх анігіляцію у випадку реалізації стиснення $\varepsilon_{ii}^e < 0$; \bar{M}_m , $\bar{\mu}_m$ – пружні сталі, які обумовлені існуванням дефектів у металі; e_m – відображає процес анігіляції при додатному значенні $\varepsilon_{ii}^e > 0$, у випадку від'ємного

$\varepsilon_{ii}^e < 0$ – розуміється генерація. Значення індексів $m = g$ відносяться до МЗ, а $m = D$ – до дислокацій.

Необхідно зазначити, що вираз для густини внутрішньої енергії (2.1), на відміну від відповідного базового співвідношення у роботах [5, 6], враховує самоузгоджену поведінку щільності МЗ h_g та дислокацій h_D (два останні доданки), що дозволяє більш точно описати взаємодію структурних дефектів у процесі формування граничних СМК чи НК структур. Знак мінус обирається згідно до закономірностей розвинення, тобто впливає із необхідності формування стаціонарних станів (максимумів термодинамічного потенціалу) за рахунок знаочергованості змінних, що з фізичної точки зору відображає щільно процес активації чи релаксації динаміки щільності дефектів. Окрім цього, введені доданки в подальшому сприяють виникненню мультиплікативного результуючого шуму (залежного від зміни параметра порядку), що виступає причиною виникнення додаткових стаціонарних станів та забезпечує перехід між граничними структурами системи.

У представленому дослідженні обмежимося розглядом спрощеного випадку: степеневе розвинення (2.1) у випадку дислокацій будемо враховувати тільки до другої степені за щільністю дислокацій (при цьому $\varphi_{2D} = 0$ Дж·м³, $\varphi_{3D} = 0$ Дж·м⁵) [4], та у випадку реалізації взаємодії h_D з іншими структурними дефектами (з МЗ) – до першої (відповідно $\phi_{gD} = 0$ Дж·м²). Такий вибір дозволяє досягти кращої відповідності з поведінкою реальних систем при великих пластичних деформаціях.

Для числового аналізу визначений наступний набір коефіцієнтів:

$$\begin{aligned} \varphi_{0g}^* &= 0.4 \text{ Дж} \cdot \text{м}^{-2}, g_g = 12 \text{ Дж} \cdot \text{м}^{-2}, \bar{M}_g = 2.5 \cdot 10^5 \text{ Дж} \cdot \text{м}^{-2}, \\ \bar{\mu}_g &= 3 \cdot 10^5 \text{ Дж} \cdot \text{м}^{-2}, \varphi_{1g}^* = 3 \cdot 10^{-6} \text{ Дж} \cdot \text{м}^{-1}, \\ e_g &= 3.6 \cdot 10^{-4} \text{ Дж} \cdot \text{м}^{-1}, \varphi_{2g} = 5.6 \cdot 10^{-13} \text{ Дж}, \\ \varphi_{3g} &= 3 \cdot 10^{-20} \text{ Дж} \cdot \text{м}, \varphi_{0D}^* = 5 \cdot 10^{-9} \text{ Дж} \cdot \text{м}^{-1}, \bar{M}_D = 0 \text{ Дж} \cdot \text{м}^{-1}, \\ \bar{\mu}_D &= 1.65 \cdot 10^{-4} \text{ Дж} \cdot \text{м}^{-1}, g_D = 2 \cdot 10^{-8} \text{ Дж} \cdot \text{м}^{-1}, \\ \varphi_{1D}^* &= 10^{-24} \text{ Дж} \cdot \text{м}, e_D = 6 \cdot 10^{-23} \text{ Дж} \cdot \text{м}, \\ \varphi_{gD} &= 10^{-16} \text{ Дж}, \psi_{gD} = 10^{-23} \text{ Дж} \cdot \text{м}. \end{aligned}$$

Вибір сталих здійснюється феноменологічно, тобто значення обираються відповідно до спостережуваних під час обробки методами ПД закономірностей [2, 11, 13-15], у результаті яких у матеріалі формуються стаціонарні СМК чи НК структури. Техніка вибору деяких значень представлена у роботах [3, 4].

2.2 Вплив адитивного шуму

Дослідимо вплив адитивних шумів на процес формування граничних СМК чи НК структур. Система еволюційних рівнянь для параметрів стану визначається наступним чином [5, 6]:

$$\tau_{hd} \frac{\partial h_D}{\partial t} = \varphi_{0D} - \varphi_{1D} h_D + \varphi_{gD} h_g - \psi_{gD} h_g^2 + \sqrt{N_D} \xi_D(t), \quad (2.5)$$

$$\tau_{h_g} \frac{\partial h_g}{\partial t} = \varphi_{0g} - \varphi_{1g} h_g + \varphi_{2g} h_g^2 - \varphi_{3g} h_g^3 + \varphi_{gD} h_D - 2\psi_{gD} h_g h_D + \sqrt{N_g} \xi_g(t), \quad (2.6)$$

де τ_{h_m} ($m=D, g$) – характерні часи релаксації параметрів порядку, які відображають інерційні властивості системи. У правих частинах рівнянь присутні стохастичні доданки, що моделюють вплив шумів основних параметрів (внутрішній шум) з інтенсивностями $N_{D,g}$ [8, 9], які виникають у результаті впливу різних структурних неоднорідностей (фаз речовини, домішків, включень, вакансій, структурних дефектів інших рівнів, теплових флуктуацій та ін.) та дії зовнішнього силового поля. Як відомо ПД обумовлює формування меж зерен двох типів: меж комірок та субмеж, які часто називають випадковими дислокаційними межами, оскільки такі межі виникають при взаємній реалізації статично-випадкового перетину дислокацій; геометрично необхідних меж, які виникають у результаті різноманітної активності системи ковзання навколо МЗ [16]. Таким чином, саме взаємодія МЗ з дислокаціями, іншими межами та структурними неоднорідностями приводить до прояву внутрішніх флуктуацій та зміни розрізнення зернистої структури у металевого зразка. З точки зору параметра h_g це означає, що у початковий момент часу у матеріалі одночасно присутні як крупні різноорієнтовані зерна, так і дрібні (що представляють статичний шум або хаос), взаємодія яких у процесі обробки визначає конкурентну боротьбу та переходи між різними структурними станами чи фазами речовини. У випадку h_D інтенсивності флуктуацій N_D враховують стохастичну взаємодію ансамблю дислокацій між собою, що супроводжується змінною коливальних спектрів та проявом різного роду колективних ефектів (наприклад, формується комірна частина структура [16, 17]). Функції $\xi_i(t)$ ($i=D, g$) відображають δ -корельовані стохастичні гаусові складові (білий шум), моменти яких задаються умовами [18]:

$$\langle \xi_i(t) \rangle = 0, \quad \langle \xi_i(t) \xi_j(t') \rangle = 2 \delta_{ij} \delta(t-t'). \quad (2.7)$$

Множник перед символом Кронекера δ_{ij} дозволяє однозначно визначити вигляд рівняння Фоккера-Планка та придати виразу $N(h_g)$ сенс коефіцієнта дифузії. Зокрема, константа, яка визначає інтенсивність шуму (міру інтенсивності флуктуацій випадкової величини) також врахована у приведеній функції.

Використовуючи адіабатичне наближення $\tau_{h_g} \gg \tau_{h_D}$, покладемо в (2.5) $\tau_{h_D} \dot{h}_D = 0$, та провівши перетворення отримуємо нелінійне рівняння типу Ланжевена для однієї випадкової змінної h_g :

$$\tau_{h_g} \dot{h}_g = F(h_g) + \sqrt{N(h_g)} \xi(t), \quad (2.8)$$

де $\xi(t)$ – результуюча сила Ланжевена (гаусовий білий шум). Узагальнена сила $F(h_g)$, що визначає детерміновану кінетику системи, та ефективна інтенсивність флуктуацій випадкової величини $N(h_g)$ задаються співвідношеннями:

$$F(h_g) \equiv \varphi_{0g} + \frac{\varphi_{0D}\varphi_{gD}}{\varphi_{1D}} + \left(\frac{\varphi_{gD}^2}{\varphi_{1D}} - 2 \frac{\psi_{gD}\varphi_{0D}}{\varphi_{1D}} - \varphi_{1g} \right) h_g + \left(\varphi_{2g} - 3 \frac{\psi_{gD}\varphi_{gD}}{\varphi_{1D}} \right) h_g^2 + \left(2 \frac{\psi_{gD}^2}{\varphi_{1D}} - \varphi_{3g} \right) h_g^3, \quad (2.9)$$

$$N(h_g) \equiv \frac{(\varphi_{gD} - 2\psi_{gD}h_g)^2}{\varphi_{1D}^2} N_D + N_g. \quad (2.10)$$

Останнє визначається відповідно до властивостей дисперсії гаусових випадкових величин [18]. Очевидно, що $N(h_g)$ залежить від параметра порядку h_g , тому шум у рівнянні (2.8) має мультиплікативний характер, а отже може привести до нерівноважних переходів та формування нових станів системи (максимумів термодинамічного потенціалу), що неможливо в рамках вивченого раніше детерміністичного підходу [5, 6].

Оскільки розв'язок стохастичного диференціального рівняння з силою Ланжевена (2.8), яка має нормальний розподіл та δ -корельовану функцію, з математичної точки зору неможливо отримати, зазвичай розглядаються тільки статистичні характеристики його розв'язків. Відомо, що рівнянню Ланжевена (2.8) ставиться у відповідність безліч форм рівнянь Фоккера-Планка. У представленому дослідженні для опису фрагментації полікристалічної структури металу під дією ПД використовується числення Стратоновича [8], оскільки даний підхід відповідає поведінці фізичних систем з неперервним часом та визначає більш реальну інтерпретацію стохастичного процесу $h_g(t)$ (реалізується стохастичний процес з пам'яттю). Відмітимо, що числовий розв'язок в рамках підходу Іто не продемонстрував якісних та кількісних змін у поведінці системи.

Відповідне рівняння Фоккера-Планка визначається співвідношенням:

$$\frac{\partial}{\partial t} p(h_g, t) = - \frac{\partial}{\partial h_g} D^{(1)}(h_g) p(h_g, t) + \frac{\partial^2}{\partial h_g^2} D^{(2)}(h_g) p(h_g, t), \quad (2.11)$$

де функції в інтерпретації Стратоновича (коефіцієнти Крамерса-Мойала) [24] приймають вигляд

$$D^{(1)}(h_g) = \frac{F(h_g)}{\tau_{h_g}} + \sqrt{\frac{N(h_g)}{\tau_{h_g}^2}} \frac{d\sqrt{N(h_g)/\tau_{h_g}^2}}{dh_g}, \quad (2.12)$$

$$D^{(2)}(h_g) = \frac{N(h_g)}{\tau_{h_g}^2}. \quad (2.13)$$

Рівняння (2.11) описує еволюцію функції щільності розподілу випадкової величини h_g . З математичної точки зору воно представляє лінійне диференціальне рівняння у частинних похідних параболічного типу. Зокрема, у випадку розгляду детерміністичного підходу нехтують флуктуаціями макроскопічних змінних, тобто в (2.8) нівелюють дифузійним членом $N(h_g)$ [18]. Відповідно рівняння Фоккера-Планка (2.11) втрачає сенс.

Щільність імовірності розподілу розв'язків рівняння (2.8) з часом приймає стаціонарне значення, тому її явний вигляд може бути знайдений з рівняння (2.11)

при виконанні умови $\partial p(h_g, t) / \partial t = 0$:

$$p(h_g) = Z^{-1} \exp(U_{ef}(h_g)). \quad (2.14)$$

Стационарний розподіл щільності імовірності реалізацій станів h_g визначається за допомогою нормуючої константи Z та ефективного синергетичного потенціалу

$$U_{ef}(h_g) = -\frac{1}{2} \ln(N(h_g)) + \tau_{h_g} \int_0^{h_g} \frac{F(\hat{h}_g)}{N(\hat{h}_g)} d\hat{h}_g. \quad (2.15)$$

Стационарні значення ефективного потенціалу (2.15) (чи щільності розподілу (2.14)) знаходяться при виконанні необхідної умови існування екстремумів $dU_{ef}(h_g) / dh_g = 0$

$$\left(2 \frac{\psi_{gD}^2}{\phi_{1D}} - \phi_{3g}\right) h_g^3 + \left(\phi_{2g} - 3 \frac{\psi_{gD} \phi_{gD}}{\phi_{1D}}\right) h_g^2 + \left(\frac{\phi_{gD}^2}{\phi_{1D}} - 2 \frac{\psi_{gD} \phi_{0D}}{\phi_{1D}} - 4 \frac{\psi_{gD}^2}{\tau_{h_g} \phi_{1D}^2} N_D - \phi_{1g}\right) h_g + \phi_{0g} + \frac{\phi_{0D} \phi_{gD}}{\phi_{1D}} + 2 \frac{\psi_{gD} \phi_{gD}}{\tau_{h_g} \phi_{1D}^2} N_D = 0. \quad (2.16)$$

Очевидно, що положення екстремумів щільності розподілу $p(h_g)$ (2.14), які власне визначають режими фрагментації металу при ПД, не залежать від інтенсивності шуму N_g (див. отримане рівняння (2.16)).

На рис. 1 представлено розв'язок рівняння (2.16) в залежності від значень зсувних деформацій I_2 (другого інваріанта тензора пружних деформацій) та при визначеній інтенсивності шуму N_D .

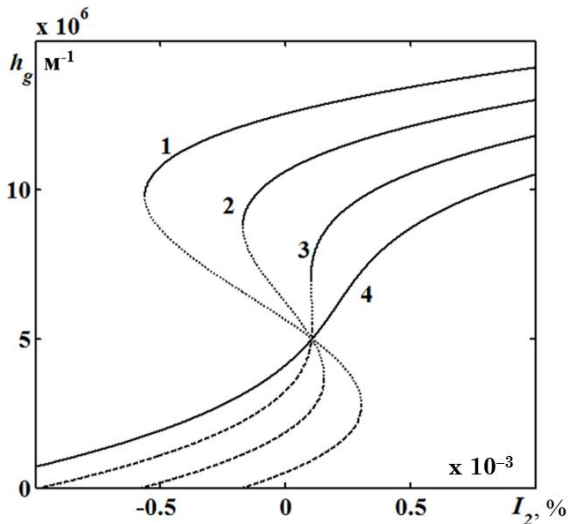


Рис. 1 – Залежність стаціонарних значень h_g рівняння екстремумів (2.16) від значень зсувної деформації I_2 при сталому значенні $\varepsilon_{ii}^g = -0.1\%$. Криві 1 – 4 побудовані при відповідних інтенсивностях шуму $N_D = (0, 10^{-15}, 2 \cdot 10^{-15}, 3 \cdot 10^{-15})$

Згідно з рисунком, при невеликих інтенсивностях флуктуацій шуму N_D існує три стаціонарні стани системи, два із яких відповідають формуванню максимумів синергетичного потенціалу (2.15) (штрихові

та суцільні сегменти кривих 1 – 3) і відповідно стійких граничних структур, а один його мінімуму (пунктирні частини кривих). Крива 1 демонструє детерміністичний випадок при відсутності шумового ефекту $N_D = 0$, врахування якого необхідно для подальшого дослідження. Очевидно, що реалізація першого максимуму синергетичного потенціалу, в залежності від величин другого інваріанта I_2 , може мати як нульові так і ненульові значення щільності МЗ h_g , що відповідає формуванню монокристалу чи крупнозернистого полікристалу (КЗПК). Другий максимум $U_{ef}(h_g)$ (суцільні частини кривих 1 – 3) завжди має ненульові значення h_g , при цьому розмір зерен у отриманих структурах має субмікро- чи нанорозміри, а на границі зразок розглядається як аморфна структура. Очевидно, що вищезазначені стійкі структури розділені нестійкими стаціонарними конфігураціями, які сформовані при значеннях щільності МЗ h_g , що відповідають мінімумам синергетичного потенціалу (2.15) (пунктирні сегменти кривих 1 – 3). Таким чином, у випадку обробки монокристалу чи КЗПК на початковому етапі буде реалізуватися нульовий максимум потенціалу, оскільки відсутня пластична течія, що відповідає за фрагментацію кристалітів та формування стаціонарного стану. Активна стадія фрагментації, що супроводжується різким зменшенням розмірів зерен, почне протікати виключно при переході нульового максимуму до ненульового значення. Якщо зразок до ПД вже має дрібнозернисту структуру, то, відповідно до кривих на рис. 1, навіть незначне підвищення зсувних деформацій I_2 приводить до формування рівноважного стаціонарного стану з більш подрібненою полікристалічною структурою (тобто реалізується близьке до ненульового екстремуму $U_{ef}(h_g)$ стаціонарне значення щільності МЗ h_g). Варто відмітити, що зі зменшенням зсувної деформації, які також охоплюють і від'ємні значення $I_2 < 0$ (результат дії гідростатичного тиску (протидії)), спостерігається анігіляція (зменшення) щільності МЗ, що на практиці приводить до зворотних процесів – знезміцнення, за рахунок збільшення розмірів кристалітів [14, 15, 19].

Зі збільшенням рівня деформації I_2 до значень, коли співіснують нульовий і ненульовий максимуми синергетичного потенціалу (крива 1) при недостатній інтенсивності шуму, який власне здійснює переходи між максимумами, процес подрібнення зерен не може відбутися, оскільки присутній енергетичний бар'єр у вигляді потенціальної ями кінцевої глибини (пунктирний сегмент). В подальшому нульовий максимум приймає ненульові значення (штрихова частина кривої) і відбувається неперервний процес фрагментації до тих пір, доки не буде досягнута нестійка конфігурація, що відповідає мінімуму $U_{ef}(h_g)$. За відсутності шумового ефекту та при відносно низьких значеннях деформації I_2 система не може подолати енергетичний бар'єр та сформувати стійкий стаціонарний стан з більш фрагментованою структурою. Як відмічалось раніше, тільки при збільшенні зсувних деформацій I_2 , в деякий момент часу відбувається злиття першого максимуму з мінімумом внутрішньої енергії, що приводить до втрати стійкості і система швидко переходить в стійкий стан з високою щільністю дефектів. Тобто система, згідно до прин-

ципу фазового переходу першого роду (ФП1), здійснює різкий перехід до другого максимуму синергетичного потенціалу $U_{ef}(h_g)$ (суцільна частина кривої 1). При цьому відбувається різка фрагментація зерен до СМК чи НК розмірів.

Варто зазначити, що при збільшенні інтенсивності внутрішнього шуму N_D реалізація синергетичного потенціалу з одночасним співіснуванням нульових і ненульових максимумів стає неможливою (криві 2, 3). Розглядаючи процес фрагментації загалом очевидно, що криві 1–3 характеризуються схожою поведінкою. Однак, у випадку представленому кривими 2 та 3 перехід між стійкими станами системи (штриховими та суцільними сегментами кривих) можливий навіть за наявності енергетичного бар'єру та при відносно невеликому значенні I_2 за умови, що впливу флуктуацій щільності дислокацій N_D буде достатньо для здійснення даного переходу. При цьому система зазнає ФП1 та відбувається стрибкоподібний процес фрагментації, що супроводжується різким збільшенням щільності дефектів та покращенням фізико-механічних властивостей металів [11]. Як зазначалося раніше, при ФП1 система може функціонувати в двох метастабільних станах (фазах) [2, 5, 6, 10, 20], що у даному випадку означає співіснування двох граничних структур з різними розмірами зерен (реалізація 2-х максимумів $U_{ef}(h_g)$).

Разом з тим варто відмітити, що з підвищенням інтенсивності стохастичного джерела N_D глибина потенціальної ями (пунктирні сегменти на кривих 1–3) поступово зменшується, а після досягнення деякої критичної інтенсивності – енергетичний бар'єр зникає (див. криву 4 на рис. 1), що приводить до реалізації неперервного переходу від КЗПК до СМК чи НК структури. Цей перехід відповідає фазовим перетворенням другого роду та демонструє можливість формування тільки однієї граничної структури.

2.3 Фазова діаграма режимів фрагментації з урахуванням стохастичності

Визначимо умови формування СМК чи НК структур в залежності від зміни пружних деформацій та інтенсивності флуктуацій шуму. Дослідимо втрату стійкості стаціонарних станів системи (тобто розв'язків рівняння (2.16)), які відповідають максимумам синергетичного потенціалу $U_{ef}(h_g)$ (2.15).

Типові фазові діаграми (ФД) режимів фрагментації металів чи сплавів представлені на рис. 2. Рисунок 2а відповідає детерміністичному наближенню за відсутності шумового впливу $N_D = 0$. Випадок, представлений на рис. 2б побудований при фіксованому значенні першого інваріанта $\varepsilon_{ii}^e = -0.1\%$ та демонструє вираз $I_2(\varepsilon_{ii}^e, h_g^c, N_D)$, отриманий з рівняння (2.16), як функцію інтенсивності флуктуацій стохастичного джерела N_D . Збіжні лінії за відповідних умов (при $N_D = 0$ чи $\varepsilon_{ii}^e = -0.1\%$) визначають межі втрати стійкості системи, що відповідають точкам переходу (критичному значенню щільності МЗ h_g^c) від мінімуму $U_{ef}(h_g)$ до максимумів (див. межі пунктирних сегментів кривих 1–3 на рис. 1). Майже

горизонтальна (в координатах $I_2 - \varepsilon_{ii}^e$ на рис. 2а) та похила під кутом $dI_2/dN_D = -\psi_{gD}\varphi_{gD}/\tau_{hg}\varphi_{1D} \times (\bar{\mu}_D\varphi_{gD} + \bar{\mu}_g\varphi_{1D})$ (в координатах $I_2 - N_D$ на рис. 2б) лінії визначаються співвідношенням

$$I_2(\varepsilon_{ii}^e, N_D) = -\frac{1}{2\left(\bar{\mu}_D \frac{\varphi_{gD}}{\varphi_{1D}} + \bar{\mu}_g\right)} \left[(\varepsilon_{ii}^e)^2 \left(\frac{1}{2} \bar{M}_D \frac{\varphi_{gD}}{\varphi_{1D}} + \frac{1}{2} \bar{M}_g \right) + \varepsilon_{ii}^e \left(g_D \frac{\varphi_{gD}}{\varphi_{1D}} + g_g \right) + 2 \frac{\psi_{gD}\varphi_{gD}}{\tau_{hg}\varphi_{1D}^2} N_D + \varphi_{0D}^* \frac{\varphi_{gD}}{\varphi_{1D}} + \varphi_{0g}^* \right]. \quad (2.17)$$

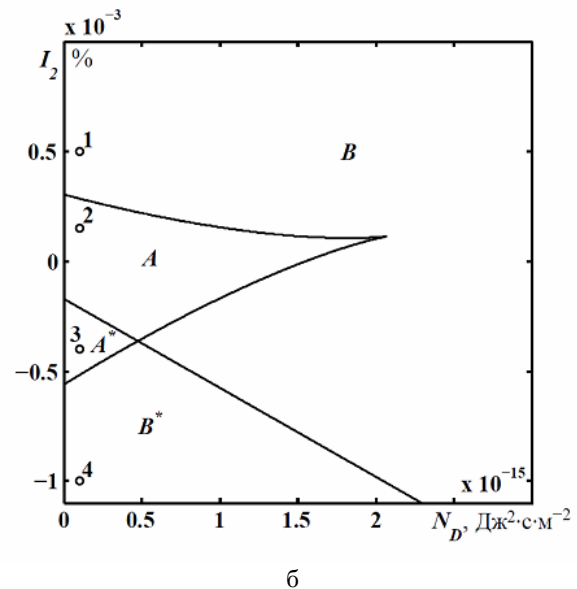
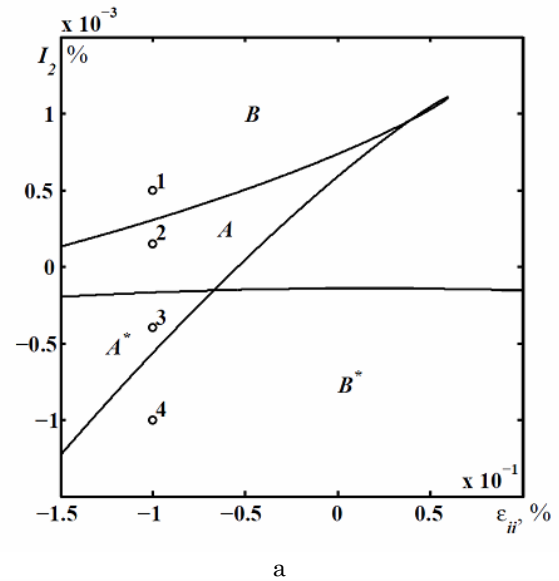


Рис. 2 – Фазові діаграми режимів фрагментації полікристалічного зразка при ПД: реалізація детерміністичного випадку при $N_D = 0$ Дж²·с·м⁻² (а), залежність з урахуванням шуму при сталому значенні $\varepsilon_{ii}^e = -0.1\%$ (б). Области (А, А*) відображають формування одночасно двох та (В, В*) – однієї граничних структур

що впливає із рівняння (2.16) і обмежує існування нульового стаціонарного розв'язку. Нижче цієї лінії

завжди існує нульовий стаціонарний розв'язок рівняння (2.16), що відповідає реалізації максимуму $U_{ef}(h_g)$ при значенні $h_g = 0$. Відповідно вище критичного рівня формуються тільки ненульові стійкі стани. Очевидно, що деформації, визначені за допомогою виразу (2.17), відіграють роль границі текучості (плинності), адже процеси фрагментації почнуть реалізуватися тільки при досягненні пружними деформаціями цього значення.

Згідно з рис. 2, ФД мають схожі властивості та демонструють чотири області фрагментації металевих зразків. Представимо узагальнену інтерпретацію отриманих областей. Для однозначного сприймання поведінки синергетичного потенціалу $U_{ef}(h_g)$ (2.15) у кожній області рис. 2б представлена відповідними кривими на рис. 3. Варто зазначити, що точки 1–4 на рис. 2б визначаються у відповідних областях на рис. 2а, що отримані при $N_D = 0 \text{ Дж}^2 \cdot \text{с} \cdot \text{м}^{-2}$ та лежать вздовж вертикальної прямої $\varepsilon_{ii}^e = -0.1\%$ (див. точки 1–4 на рис. 2а).

Таким чином, в області А реалізуються два ненульових максимуми синергетичного потенціалу $U_{ef}(h_g)$ (крива 2 на рис. 3), і можливо одночасне співіснування двох граничних структур з великими розмірами зерен (перший максимум) і більш дрібною СМК або НК структурою (другий максимум $U_{ef}(h_g)$). Крім того, при достатній інтенсивності мультиплікативного шуму щільність МЗ може здійснювати динамічні коливання довкола значень, що відповідають стаціонарним станами системи, навіть за наявності енергетичного бар'єру (мінімуму $U_{ef}(h_g)$). Область А* істотно відрізняється від області А тим, що перший максимум синергетичного потенціалу має нульову щільність дефектів (див. криву 3 на рис. 3), при цьому зразок – майже монокристал. Однак, як показано кривою 3, перший стійкий екстремум потрапляє до від'ємної області ($h_g < 0$), що позбавлене фізичного змісту. Тому вважаємо, що при досягненні нульового значення щільність МЗ перестає зменшуватися, і система продовжує функціонувати у режимі $h_g = 0$.

Відповідно, єдиний нульовий стаціонарний стан (див. криву 4 на рис. 3), що відповідає реалізації монокристалу чи КЗПК, формується в області малих деформацій В*. При великих деформаціях з області В, як показано кривою 1 на рис. 3, формуються одна гранична структура.

У той же час, реальній поведінці матеріалів під час ПД відповідають криві 1 і 2 на рис. 3. У разі кривої 1 еволюція системи на початковій стадії протікає повільно, відповідно до нахилу кривої внутрішньої енергії, а потім різко прискорюється на крутій ділянці кривої ефективної внутрішньої енергії. Остання стадія відповідає режиму активної фрагментації матеріалу у процесі ПД.

Порівнюючи отримані результати на рис. 2, очевидно, що представлена на рис. 2б ФД відображає реальні умови перебігу процесів фрагментації полікристалічної структури при ПД, оскільки враховує не тільки вплив зовнішнього поля у вигляді інваріантів ε_{ii}^e та I_2 тензора пружної деформації, а і безпосередньо внутрішні мезоскопічні флуктуації N_D , які можуть критичним чином вплинути на характер

еволюції системи.

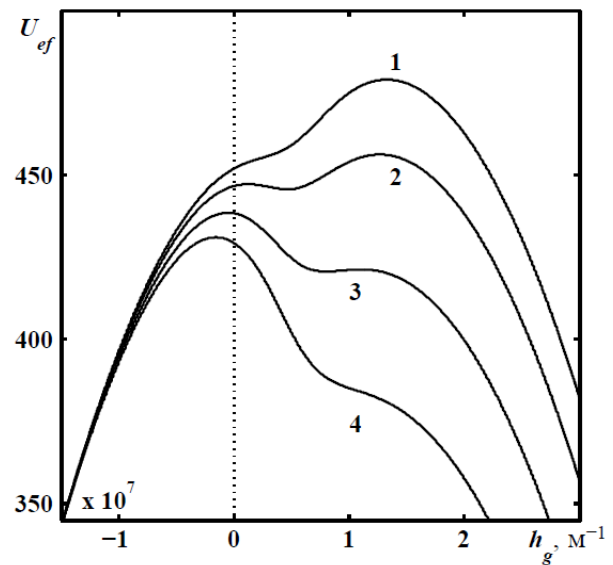


Рис. 3 – Вид ефективного синергетичного потенціалу U_{ef} (2.15) в залежності від значень щільності МЗ h_g при інтенсивності $N_g = 1 \text{ Дж}^2 \cdot \text{с} \cdot \text{м}^{-4}$ та стисненні $\varepsilon_{ii}^e = -0.1\%$. Кривим 1–4 відповідають значення I_2 та N_D , представлені у вигляді точок 1–4 на ФД (рис. 2б)

Відомо, що підвищення інтенсивності стохастичного джерела приводить до активації індукованих шумом фазових переходів [7-9, 21]. Впливати на інтенсивність флуктуацій шумів внутрішніх змінних може ряд чинників: теплові флуктуації, які підвищують коливання кристалічної решітки та сприяють перерозподілу (переміщенню та розмноженню чи анігіляції) структурних дефектів; швидкість пластичної течії, адже під час швидкого переміщення дислокацій їх кінетична енергія незворотно переходить у енергію обгинаючих коливальних спрямованих на подолання перешкод у площині ковзання [17]; дія ультразвуку, яка активізує вимушені коливання дислокацій, що сприяють подоланню дислокаційних бар'єрів перешкоджаючих їх руху під час пластичної деформації (у матеріалі відбувається так звані акустичні ефекти) [22]; постійне магнітне поле, що також приводить до прояву магнітопластичного ефекту на рухливості структурних дефектів під час обробки [23].

Таким чином, отримані ФД дозволяють у загальному вигляді зобразити можливі сценарії та режими поведінки системи еволюційних рівнянь, що може зіграти важливу роль з точки зору технічних застосувань запропонованої моделі.

3. ВИСНОВКИ

На основі нерівноважної еволюційної термодинаміки досліджено процес фрагментації металеві структури під впливом ПД, що дає цілісну картину основних режимів звичайної та інтенсивної пластичності. Моделювання процесів дефектоутворення здійснюється в рамках дводефектної моделі з урахуванням шуму. В якості основних структурних дефектів розглядаються межі зерен та дислокації, оскільки останні відіграють вагомую роль у формуванні дрібно-

зернистої структури та межі пластичної течії.

Модифікація степеневого розвинення для густини внутрішньої енергії дозволила більш точно описати самоузгоджену поведінку структурних дефектів у процесі формування граничних СМК чи НК структур. Крім того, врахування в еволюційних рівняннях адитивного некорельованого шуму основних параметрів демонструє можливість формування додаткових стійких станів.

Використовуючи адіабатичне наближення, що визначає характер еволюції основних змінних (щільності дислокацій та МЗ), отримано основні співвідношення: стохастичне рівняння Ланжевена та відповідне йому рівняння Фоккера-Планка, що описує еволюцію функції щільності розподілу значень щільності дефектів. Встановлено, що максимумами ефективного синергетичного потенціалу відповідають максимальним значенням щільності розподілу та визначають формування стійких станів (граничних структур), а відповідно мінімуми визначають реалізацію нестійких конфігурацій. Розглядаючи підхід Стратоновича, враховано ефект пам'яті випадкового процесу, що моделює дійсну фрагментацію полікристалічної структури металу під час ПД. Дослідження умов формування стаціонарних станів системи демонструє можливі сценарії та режими процесу фрагментації полікристалічної структури. Показано, що у випадку монокристалу чи КЗПК процес обробки розпочинається з поступового накопичення деформації до моменту виникнення пластичної течії, що є необхідною умовою активації про-

цесу фрагментації. З подальшим навантаженням протікає активна стадія подрібнення зернистої структури, що в залежності від значень інтенсивності флуктуацій шуму та пружної зсувної деформації супроводжується формуванням різної кількості стаціонарних структур. Побудовані ФД, які демонструють умови формування стаціонарних структур різних типів. Досліджено поведінку ефективного синергетичного потенціалу для кожної області ФД. Показано, що перехід від основної КЗПК структури до другої дрібнозернистої (СМК чи НК) в процесі ПД може проходити за сценарієм фазових переходів першого та другого родів. Також виявлено, що при достатній інтенсивності флуктуацій стохастичного джерела система може здійснювати динамічні переходи між фазами матеріалу, що відповідають реалізації граничних структур, що неможливо досягти при розгляді детерміністичного підходу. Таким чином, проведене дослідження відтворює реальні умови обробки ПД та демонструє можливі режими та сценарії процесу подрібнення полікристалічної структури металу чи сплаву.

ПОДЯКИ

Робота виконана за підтримки Міністерства освіти і науки України (проект «Нерівноважна термодинаміка фрагментації металів і третя просторово-неоднорідних межових мастил між поверхнями з нанорозмірними нерівностями», № 0115U000692, 2015-2017 рр.). Автори висловлюють подяку професору Л.С. Метлову за плідну дискусію та цінні зауваження.

Влияние аддитивного гаусового шума на фазовую диаграмму режимов фрагментации металла при интенсивной пластической деформации

А.В. Хоменко, Д.С. Троценко, Я.О. Кравченко, М.А. Хоменко

Сумский государственный университет, ул. Римского-Корсакова, 2, 40007 Сумы, Украина

На основе неравновесной эволюционной термодинамики исследуется процесс фрагментации твёрдых тел во время обработки методами интенсивной пластической деформации. Описание образующихся дефектных структур проводится в приближении двухдефектной модели с учетом плотности границ зерен и дислокаций, которые определяют формирование мелкозернистой структуры и предела пластического течения. Учет дополнительных слагаемых в разложении плотности внутренней энергии и введение аддитивных шумов основных параметров позволили более точно описать самосогласованное поведение структурных дефектов в процессе формирования предельных субмикроструктур или нанокристаллических структур. Построена фазовая диаграмма, которая в зависимости от интенсивности шума и упругой деформации определяет области реализации различных типов предельных (стационарных) структур. Установлено, что с увеличением интенсивности флуктуаций и значений упругих деформаций размер зерен в предельных структурах уменьшается. Найдены условия одновременного существования двух предельных (стационарных) структур, которые отвечают режиму формирования фаз с различными размерами зерен.

Ключевые слова: Граница зерна, Дислокация, Фазовый переход, Фазовая диаграмма, Внутренняя энергия, Аддитивный шум, Фрагментация.

Additive Gaussian Noise Effect on Phase Diagram of Metal's Fragmentation Modes during Severe Plastic Deformation

A.V. Khomenko, D.S. Troshchenko, Ya.O. Kravchenko, M.A. Khomenko

Sumy State University, 2, Rimsky Korsakov Str., 40007 Sumy, Ukraine

Based on nonequilibrium evolutionary thermodynamics the process of solid fragmentation during the processing by methods of severe plastic deformation is investigated. The description of the forming defect structures is carried out by approach of the two-defect model taking into account the density of grain boundaries and dislocations, which define the formation of fine grained structure and a limit of plastic flow. Considering additional terms in the expansion of internal energy and taking into account the additive noise of basic parameters we describe more accurately the self-consistent behavior of structural defects in the process of the formation of limiting submicrocrystalline or nanocrystalline structures. The phase diagram is constructed. It determines the regions of realization of various types of limiting (stationary) structures depending on both the noise intensity and elastic strain. It is established that with an increase of both the fluctuations intensity and the values of elastic strains the size of grains in limiting structures decreases. The conditions of simultaneous existence of two limiting (stationary) structures that correspond to the regime of the phases formation with different grain sizes are found.

Keywords: Grain Boundary, Dislocation, Phase Transition, Phase Diagram, Internal Energy, Additive Noise, Fragmentation.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. А.М. Глезер, *Известия РАН. Сер. Физическая* **71** № 12, 1764 (2007) (A.M. Glezer, *Bull. Russ. Acad. Sci. Phys.* **71** No 12, 1722 (2007)).
2. Г.А. Малыгин *ФТТ* **44** № 11, 1979 (2002) (G.A. Malygin, *Phys. Solid State* **44** No 11, 2072 (2002)).
3. А.М. Глезер, Л.С. Метлов, *ФТТ* **52** № 6, 1090 (2010) (A. M. Glezer, L. S. Metlov, *Phys. Solid State* **52** No 6, 1162 (2010)).
4. L.S. Metlov, *Phys. Rev. E* **90** No 3, 022124 (2014).
5. A.V. Khomenko, D.S. Troshchenko, L.S. Metlov, *Condens. Matter Phys.* **18** No 3, 33004 (2015).
6. А.В. Хоменко, Д.С. Трощенко, Л.С. Метлов, *Металлофиз. новейшие технол.* **39** № 2, 265 (2017) (A.V. Khomenko, D.S. Troshchenko, L.S. Metlov, *Metallofiz. Noveyshiye Tekhnol.* **39** No 2, 265 (2017)).
7. А.В. Хоменко, Я.А. Ляшенко, *УФН* **182** No 10, 1081 (2012) (A.V. Khomenko, I.A. Lyashenko, *Phys. Usp.* **55** No 10, 1008 (2012)).
8. В. Хорстхемке, Р. Лефевр, *Индукцированные шумом переходы. Теория и применение в физике, химии и биологии* (Москва: Мир: 1987) (W. Horsthemke, R. Lefever, *Noise-Induced Transitions. Theory and Applications in Physics, Chemistry, and Biology* (Berlin: Springer-Verlag: 1984)).
9. A.V. Khomenko, I.A. Lyashenko, *FNL* **7** No 2, L111 (2007).
10. L.D. Landau and E.M. Lifshitz, *Course of theoretical physics, Vol.5: Statistical physics* (London: Butterworth: 1999).
11. Р.З. Валиев, И.В. Александров, *Объемные наноструктурные металлические материалы: получение, структура и свойства* (Москва: ИКЦ «Академкнига»: 2007).
12. Я.Е. Бейгельзимер, В.Н. Варюхин, С. Сынков, Д. Орлов, *Винтовая экструзия - процесс накопления деформаций* (Донецк: ТЕАН: 2003) (Ya.E. Beygel'zimer, V.N. Varykhin, S. Synkov, D. Orlov, *Vintovaya ekstruziya - protsess nakopleniya deformatsiy* (Donetsk: TEAN: 2003)).
13. А.А. Мазилкин, Б.Б. Страумал, С.Г. Протасова, О.А. Когтенкова, Р.З. Валиев, *ФТТ* **49** No 5, 824 (2007) (A.A. Mazilkin, B.B. Straumal, S.G. Protasova, O.A. Kogtenkova, R.Z. Valiev, *Phys. Solid State* **49** No 5, 868 (2007)).
14. С.Н. Сергеев, И.М. Сафаров, А.В. Корзников, Р.М. Галеев, С.В. Гладковский, Е.М. Бородин, *Письма о материалах* **2** № 3, 117 (2012) (S.N. Sergeev, I.M. Safarov, A.V. Korznikov, R.M. Galeev, S.V. Gladkovsky, E.M. Borodin, *Letters on materials* **2** No 3, 117 (2012)).
15. Р.К. Исламгалиев, К.М. Нестеров, Р.З. Валиев, *Вестник УГАТУ* **17** № 4, 81 (2013) (R.K. Islamgaliev, K.M. Nesterov, R.Z. Valiev, *Vestnik UGATU* **17** No 4, 81 (2013)).
16. Г.А. Салищев, С.Ю. Миронов, С.В. Жеребцов, А.Н. Беляков, *Физика и механика материалов* **25** № 1, 42 (2016) (G. Salishchev, S. Mironov, S. Zherebtsov, A. Belyakov, *Materials Physics and Mechanics* **25** No 1, 42 (2016)).
17. В.В. Малашенко, *ФТТ* **56** № 8, 1528 (2014) (V.V. Malashenko, *Phys. Solid State* **56** No 8, 1579 (2014)).
18. H. Risken, *The Fokker-Planck Equation. Methods of Solution and Applications* (Berlin: Springer-Verlag: 1989).
19. Ю.В. Хлебникова, Л.Ю. Егорова, В.П. Пилюгин, Т.Р. Суаридзе, А.М. Пацелов, *ЖТФ* **85** № 3, 60 (2015) (Yu.V. Khlebnikova, D.P. Rodionov, I.V. Gervas'eva, L.Yu. Egorova, T.R. Suaridze, *Tech. Phys.* **60** No 3, 389 (2015)).
20. В.В. Страумал, А.Р. Килмаметов, А.А. Мазилкин, С.Г. Протасова, К.И. Колесникова, П.В. Страумал, В. Баретцки, *Mater. Lett.* **145**, 63 (2015).
21. A.D. Pogrebnjak, *J. Nanomater.* **2013** No 12, 1 (2013).
22. В.Н. Хмелев, А.Н. Сливин, Р.В. Барсуков, С.Н. Цыганок, А.В. Шалунов, *Применение ультразвука высокой интенсивности в промышленности* (Бийск: Изд-во Алт. гос. техн. ун-та: 2010).
23. А.В. Олейнич-Лысюк, Н.Д. Раранский, *ФТТ* **54** № 3, 417 (2012) (A.V. Oleinich-Lysyuk, N.D. Raranskii, *Phys. Solid State* **54**, 441 (2012)).