

**МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
СУМСЬКИЙ ДЕРЖАВНИЙ УНІВЕРСИТЕТ**

Трощенко Дар'я Сергіївна



УДК 536.9:539.951-034-022.531(043.3)

**НЕРІВНОВАЖНА ЕВОЛЮЦІЙНА ТЕРМОДИНАМІКА
ФРАГМЕНТАЦІЇ МЕТАЛІВ З УРАХУВАННЯМ СТОХАСТИЧНОСТІ**

Спеціальність 01.04.07 – фізика твердого тіла

АВТОРЕФЕРАТ
дисертації на здобуття наукового ступеня
кандидата фізико-математичних наук

Суми – 2018

Дисертацією є рукопис.

Робота виконана в Сумському державному університеті
Міністерства освіти і науки України.

Науковий керівник – доктор фізико-математичних наук, професор
Хоменко Олексій Віталійович,
Сумський державний університет,
професор кафедри прикладної математики
та моделювання складних систем.

Офіційні опоненти: член-кореспондент НАН України, доктор фізико-
математичних наук, професор
Татаренко Валентин Андрійович,
заступник директора з наукової роботи
Інституту металофізики ім. Г. В. Курдюмова
НАН України;

доктор фізико-математичних наук, професор
Козловський Михайло Павлович,
головний науковий співробітник відділу
статистичної теорії конденсованих систем
Інституту фізики конденсованих систем
НАН України.

Захист відбудеться «08» червня 2018 року о 12-00 годині на засіданні спеціалізованої вченої ради Д 55.051.02 при Сумському державному університеті за адресою: 40007, м. Суми, вул. Римського-Корсакова, 2, корпус БІЦ, ауд. 307.
E-mail: d55.051.02@sumdu.edu.ua.

Із дисертацією можна ознайомитися у бібліотеці Сумського державного університету за адресою: 40007, м. Суми, вул. Римського-Корсакова, 2, а також на сайті інституційного репозитарію СумДУ. Режим доступу:
<http://essuir.sumdu.edu.ua/handle/123456789/67480>

Автореферат розісланий « 27 » квітня 2018 року

Вчений секретар
спеціалізованої вченої ради



І. В. Чешко

ЗАГАЛЬНА ХАРАКТЕРИСТИКА РОБОТИ

Актуальність теми. Сучасний технологічний процес потребує виготовлення різноманітних конструкцій та деталей відповідного призначення, що мають високі фізичні та механічні властивості. Зокрема, основною властивістю наноструктурних та ультрадрібнозернистих металів є стійкість до руйнування при великих циклічних навантаженнях (стійкість до втоми), що стало однією з найважливіших причин їх комерційного використання. Велику кількість науково-дослідних робіт у промислово-розвинених країнах присвячено саме дослідженню і технологіям отримання ультрадрібнозернистих та наноструктурних матеріалів. На цей час відомо багато технологій, що дозволяють отримати об'ємні наноструктурні матеріали: електроосадження, шарове розмелювання, інтенсивна пластична деформація (ІПД) і компактування. Усі ці методи дають можливість синтезувати метали з розмірами зерен близько 100 нм, а в деяких випадках – до 5 нм. Проте застосування саме методів ІПД дає можливість одержати об'ємні металеві зразки з практично безпористою субмікрокристалічною (СМК) чи нанокристалічною (НК) структурою, що неможливо отримати шляхом звичайного термомеханічного оброблення.

Фізичні процеси, що відбуваються у твердих тілах під час ІПД, з одного боку, є досить складними, а з іншого – універсальними. Більшість експериментальних досліджень зводиться до вивчення кінцевих (граничних) структурних станів та властивостей без аналізу природи фізичних процесів, що проходять під час їх утворення. Крім того, відомі праці, де дуже часто трапляється проблема формування нестабільних конфігурацій чи прояву аномальних ефектів у властивостях матеріалу, що виникають за рахунок зміни умов оброблення зразка: швидкості, температури, тиску, кількості проходів та ін. Отже, підбір оптимального температурно-силового режиму оброблення для матеріалів різних класів є важливим фактором формування стійкої СМК чи НК структури під час ІПД. Таким чином, розвиток теоретичних моделей, що дозволяють якісно описати процес фрагментації металеві структури при ІПД та встановити необхідні умови для формування рівноважних СМК чи НК структур із високими фізико-механічними властивостями, набуває вагомого значення.

Відомо ряд теоретичних підходів, що частково описують процеси, які відбуваються під час ІПД, проте до цього часу не існує єдиного методу чи теорії, здатної охопити повну картину. Кожен із відомих методів розкриває свій бік різноманітного прояву закономірностей у процесах деформації та руйнування твердих тіл, і всі разом вони дозволяють скласти більш повне та об'єктивне уявлення про предмет дослідження. Зокрема, існує низка питань, що стосуються ІПД, які на сьогодні ще не вирішені, а методи дослідження в основному зводяться до узагальнення експериментальних даних. Наприклад, теоретично не було передбачено можливості формування декількох «граничних» структур – мінімального середнього розміру зерен, не описано утворення фрактальних структур, що часто спостерігаються під час експериментальних досліджень, не виявлено умов виникнення різних режимів фрагментації, не досліджено кінетику

фазових перетворень, не знайдено умов формування стійких граничних структур, що є актуальним із практичної точки зору, не вивчено температурні аспекти проблеми, вплив флуктуацій основних параметрів і т. д. Таким чином, дослідження процесу фрагментації металів чи сплавів під час ІПД має високу актуальність, зокрема, дисертаційна робота розвиває у рамках єдиного підходу узагальнену феноменологічну теорію [1*], що дозволяє відобразити значну кількість ефектів і процесів, які проходять під час подрібнення полікристалічної структури металів.

Зв'язок роботи з науковими програмами, планами, темами. Дисертаційна робота виконана на кафедрі прикладної математики та моделювання складних систем Сумського державного університету і пов'язана з виконанням таких науково-дослідних робіт: «Нерівноважна термодинаміка фрагментації металів і тертя просторово-неоднорідних межових мастил між поверхнями з нанорозмірними нерівностями», за підтримки МОН (№ 0115U000692, 2014–2017 рр.), відповідальний виконавець; «Моделювання просторово неоднорідних явищ межового тертя в кінетичному і статичному режимах», за підтримки ДФФД у рамках гранта Президента України (№ 0115U004662, 2015 рр.), виконавець; «Фізичні властивості двовимірних наноматеріалів та металевих наночастинок», за підтримки МОН (№ 0117U003923, 2017–2019 рр.), виконавець; «Термодинамічна теорія фазових переходів між структурними станами межового мастила із урахуванням просторової неоднорідності», за підтримки МОН (№ 0116U006818, 2016–2018 рр.), виконавець.

Мета і завдання дослідження. Метою дисертаційної роботи є встановлення закономірностей структурних і кінетичних явищ, що відбуваються при фрагментації металів чи сплавів під час ІПД, дослідження стійкості сформованих станів чи фаз полікристалічних металів, урахування впливу адитивних флуктуацій основних параметрів на процес еволюції структурних дефектів.

Для досягнення поставленої мети необхідно було вирішити такі **завдання**:

– використовуючи багатовимірний ефективний потенціал для густини внутрішньої енергії, розвинути кінетичний підхід, що дозволяє однозначно відобразити специфіку процесу фрагментації зернистої структури металу та супроводжувальні процеси під час ІПД;

– на основі отриманої феноменологічної моделі встановити умови формування стаціонарних станів системи та одержати фазову діаграму режимів фрагментації металу або сплаву при ІПД;

– провести детальне вивчення еволюції структурних дефектів під час їх взаємодії у процесі формування граничних (стаціонарних) структур, стійкості сформованих станів та дослідити утворення СМК чи НК структур із визначенням впливу часу релаксації на кінетику процесу фрагментації;

– на основі модифікованого виразу для ефективної густини внутрішньої енергії встановити вплив адитивного некорецьованого шуму основних параметрів системи на процес подрібнення зернистої структури під час ІПД та з'ясувати умови реалізації різних типів граничних структур;

– провести аналіз часових залежностей густин МЗ, що враховують флуктуації основних параметрів під час ПД, та порівняти одержані результати з експериментальними даними.

Об'єкт дослідження – фізичні процеси, що відбуваються у твердих тілах під час інтенсивної пластичної деформації.

Предмет досліджень – структурно-фазові перетворення, кінетика процесу та релаксаційні явища, що виникають у твердих тілах під час ПД.

Методи дослідження. У дисертаційній роботі проведено вивчення фрагментації металів у процесі ПД на основі теорій фазових переходів Ландау, пружності та положень класичної нерівноважної термодинаміки. Відповідно до поставлених завдань використано відомі методи математичної фізики та числового моделювання. Самоузгоджені нелінійні диференціальні рівняння розв'язуються з використанням адіабатичного наближення. Вивчення кінетики фрагментації металу проводилося за допомогою рівнянь Ландау – Халатнікова і Ланжевена. Стаціонарні розподіли побудовано на основі рівняння Фоккера – Планка, у процесі дослідження фазової кінетики процесу, що розглядається, використано метод фазової площини. Дослідження стійкості системи диференціальних рівнянь проводилося за допомогою першого методу Ляпунова. Аналіз впливу шуму здійснено в рамках методу ефективного потенціалу. Моделювання ґрунтується на сучасних числових методах розв'язання систем диференціальних рівнянь у детерміністичному випадку та під дією шуму. Диференціальні рівняння розв'язувалися методами Рунге – Кутта і Ейлера. Спектральний аналіз часових залежностей виконано за допомогою швидкого перетворення Фур'є.

Наукова новизна одержаних результатів:

1. Удосконалено підхід НЕТ, що дозволяє одержати більш повне уявлення про перебіг процесу фрагментації металів чи сплавів під час ПД. У рамках цього підходу відтворено еволюцію дефектної підсистеми (дислокацій і МЗ), що супроводжується подрібненням зернистої структури полікристалічних тіл та формуванням граничної СМК чи НК структури. У рамках адіабатичного наближення одержано фазову діаграму, що демонструє умови виникнення різних режимів фрагментації. Уперше вказано конкретні значення пружної деформації, що істотно впливають на виникнення граничної (стаціонарної) структури.

2. Уперше визначено умови формування граничних структур при зміні початкових значень та значень керувальних параметрів (пружних зсувних і стискальних деформацій). Установлено вплив ступеня взаємодії двох дефектних підсистем на кінетику процесу.

3. Уперше з'ясовано критичні умови для керувальних параметрів та побудовано діаграму, що визначає області формування і стійкість стаціонарних станів (граничних структур). Установлено вплив часів релаксації густини дефектів на фазову динаміку нерівноважних змінних.

4. На підставі дослідження процесу фрагментації матеріалу під час ПД з урахуванням адитивного гаусівського шуму основних параметрів уперше передбачено можливість виникнення принципово нових режимів фрагментації й

відповідно формування СМК чи НК структур із заданими властивостями. Побудовано фазові діаграми, що демонструють умови формування граничних структур різних типів з урахуванням стохастичності процесу.

5. Уперше одержано розподіл реалізацій густини МЗ, що дозволив кількісно оцінити склад зернистої структури в об'ємі металевого зразка. З аналізу часових залежностей густини МЗ виявлено, що процес фрагментації металевої полікристалічної структури при ПД залежить від передісторії нерівноважного процесу. Визначено час автокореляції в кінетиці випадкового процесу фрагментації, впродовж якого можна спрогнозувати розмір зерен чи стан (фазу) у кристалічній структурі металу чи сплаву.

Практичне значення одержаних результатів. Оскільки розвинений підхід описує та пояснює більшість експериментальних ефектів, що спостерігаються під час ПД, результати можуть бути використані для синтезування металів різних класів із метою виготовлення деталей чи конструкцій відповідного призначення. Зокрема, виявлено причини формування нестабільних конфігурацій чи прояву аномальних ефектів у властивостях матеріалів, що часто трапляються на практиці та можуть призвести до передчасного руйнування або виникнення проблем під час експлуатації.

Проведені дослідження дозволяють визначити конкретні параметри, що істотно впливають на формування СМК чи НК станів у металах. Побудована фазова діаграма відображає різні режими фрагментації та дозволяє в загальному вигляді відобразити можливі сценарії й режими поведінки структурних дефектів, що може відіграти важливу роль із точки зору технічних застосувань. Зокрема, одержана діаграма стійкості встановлює оптимальні значення для першого і другого інваріантів тензора пружних деформацій, що дозволяють сформувати стійку СМК або НК структуру з необхідною густиною дефектів і стабільними фізико-механічними властивостями. Дослідження в рамках нерівноважної термодинамічної моделі процесу ПД і впливу на нього білого шуму передбачає можливість виникнення нових режимів фрагментації залежно від параметрів термодинамічної системи і відповідно формування СМК чи НК матеріалів, що мають бажані фізико-механічні властивості. Одержані результати можуть бути використані в прикладних дослідженнях і розробках.

Особистий внесок дисертанта полягає в проведенні самостійного пошуку та аналізі літературних джерел за темою дисертації. Матеріал дисертації базується на результатах досліджень, отриманих як особисто автором, так і в результаті співпраці з науковим керівником – д-ром фіз.-мат. наук, професором О. В. Хоменком та д-ром фіз.-мат. наук, професором Л. С. Метловим. Постановка завдань, мети дослідження, вибір теоретичних і числових методів їх аналізу, а також обговорення одержаних результатів проводилися разом із науковим керівником – професором О. В. Хоменком.

Здобувач брала повноцінну участь на всіх етапах дослідження в усіх опублікованих працях: у ході проведення аналітичних розрахунків, розроблення комп'ютерних програм, інтерпретації одержаних результатів, оформленні та публікації наукових праць [1 - 22]. У праці [1] дисертант брала безпосередню

участь у вивченні літературних джерел, одержанні базових співвідношень, числовому розв'язанні системи диференціальних рівнянь та в обговоренні одержаних результатів.

У працях [2, 7] дисертант дослідила межі втрати стійкості дводефектної моделі та побудувала фазову діаграму режимів фрагментації металів чи сплавів при ПД.

У статті [3] здобувач провела моделювання кінетики процесу фрагментації металів чи сплавів під час ПД, визначила умови формування граничних (стаціонарних) структур різних типів і встановила вплив взаємодії структурних дефектів на кінетику процесу.

У праці [4] автор дисертації виконала якісне дослідження фазової кінетики процесу фрагментації при ПД, одержала узагальнений аналітичний вираз для показників Ляпунова та побудувала діаграму стійкості стаціонарних структур.

У статті [5] дисертант продовжила дослідження фазової кінетики дводефектної системи та встановила вплив часу релаксації на формування універсальної поведінки в процесі фрагментації.

У публікаціях [6, 8] автор дисертації модифікувала базовий ефективний потенціал для густини внутрішньої енергії та врахувала вплив адитивних некорельованих шумів основних параметрів на процес фрагментації металів при ПД. На основі розвиненої моделі отримано нову фазову діаграму, що залежно від інтенсивності шуму та пружної деформації визначає області реалізації різних граничних структур, та розподіл реалізації густини МЗ при ПД.

У працях [9, 10] дисертант отримала основні аналітичні вирази, що визначають процес формування дефектних структур при ПД, та провела моделювання зовнішнього періодичного впливу на кінетику густини МЗ.

Основну частину одержаних наукових результатів дисертант особисто представила на міжнародних та національних конференціях і семінарах, зокрема закордонних [11–22]. Усі наукові положення і висновки, винесені на захист, належать автору дисертації.

Апробація результатів дисертації. Основні наукові результати роботи викладено в доповідях та обговорено на конференціях і семінарах: 4th, 6th, 7th International Conference Nanomaterials: Applications and Properties (Львів, 2014, 2016 pp.; Затока, 2017 p.); 5th International research and practice conference «Nanotechnology and nanomaterials» NANO-2017 (Chernivtsi, 2017); 4th International conference «Nanotechnologie» Nano-2016 (Tbilisi, Georgia, 2016); 5th, 6th, 7th, 8th International conference «Low temperature physics» (Харків, 2014, 2015, 2016, 2017 pp.); XVII Міжнародному симпозиумі «Методи дискретних особливостей в задачах математичної фізики (МДОЗМФ-2015)» (Харків – Суми, 2015 p.); Міжнародній конференції молодих учених і аспірантів «ІЕФ-2015» (Ужгород, 2015 p.); Міжнародній конференції студентів та молодих вчених з теоретичної та експериментальної фізики «ЕВРИКА» (Львів, 2014, 2015, 2017 pp.); науково-технічній конференції «Інформатика, математика, автоматика (ІМА)» (Суми, 2017, 2018 pp.).

Публікації. Основні результати дисертаційної роботи опубліковані у 22

наукових працях: 6 статей у виданнях [1–6], що індексуються наукометричними базами Scopus та/або Web of Science, з яких 5 – у провідних фахових журналах [1–3, 5, 6]; 4 статті у матеріалах Міжнародних наукових конференцій [7–10], з яких 2 статті [8, 9] у виданнях, що індексуються наукометричними базами Scopus та Web of Science; 12 тез доповідей наукових конференцій [11–22].

Структура і зміст роботи. Дисертаційна робота складається із вступу, чотирьох розділів, загальних висновків та переліку використаних джерел. Зміст дисертації викладено на 189 сторінках друкованого тексту, з яких 137 сторінок – основний текст, та містить 24 рисунки, зокрема 3 рисунки на окремих аркушах, і 5 таблиць. Список використаних джерел складається із 178 найменувань, розміщених на 19 сторінках.

ОСНОВНИЙ ЗМІСТ РОБОТИ

У **вступі** обгрунтовано актуальність теми роботи, сформульовано мету і завдання дослідження, визначено її об'єкт та предмет, розкрито наукову новизну та практичне значення одержаних результатів, визначено особистий внесок здобувача, наведено відомості про апробацію результатів і структуру дисертації.

Перший розділ дисертаційної роботи «Наноструктурні матеріали: експериментальні дослідження та теоретичні підходи до опису (літературний огляд)» складається з трьох підрозділів.

У *першому* підрозділі розглянуто методи отримання ультрадрібнозернистих та наноструктурних матеріалів. Основна увага зосереджена на методах ППД: представлено відомі схеми та особливості процесу оброблення. Наведені деякі експериментальні дослідження, що вивчають закономірності отримання НК структур у різних металах чи сплавах у процесі ППД.

У *другому* підрозділі проведено огляд відомих теоретичних підходів щодо опису процесу фрагментації твердих тіл під час ППД.

У *третьому* підрозділі розглянуто підхід нерівноважної еволюційної термодинаміки [1*], що дозволяє однозначно встановити перебіг нерівноважних процесів під час оброблення твердих тіл. Наведено феноменологічні основи підходу, що об'єднують перший та другий закони термодинаміки, та викладено феноменологічну модель Л. С. Метлова, що дозволяє описати специфіку процесу фрагментації і формування граничної (стаціонарної) структури під час ППД. Розглядаючи дводефектне наближення, визначено основні співвідношення в термінах внутрішньої енергії та досліджено стадійність процесу фрагментації. Наведено додаткове співвідношення Тейлора, що демонструє самоузгоджений зворотний зв'язок між процесом формування граничної структури та умовою її формування у вигляді діючих напружень. Зроблено висновок, що існує ряд недостатньо досліджених питань, які стосуються ППД. Саме на вирішення цих моментів спрямована дисертаційна робота.

У **другому розділі** дисертації «Феноменологічна модель фрагментації металів чи сплавів при ППД» проведено дослідження особливостей процесу подрібнення полікристалічної структури металів чи сплавів під час ППД, використовуючи як основу запропоновану Л. С. Метловим термодинамічну

модель. Цей розділ складається з трьох підрозділів.

У *першому* підрозділі наведено базовий вираз для густини внутрішньої енергії в рамках дводефектної моделі з урахуванням густини МЗ та дислокацій:

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

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

$$\varphi_{0m} = \varphi_{0m}^* + g_m \varepsilon_{ii}^e + \frac{1}{2} \bar{M}_m (\varepsilon_{ii}^e)^2 + 2\bar{\mu}_m I_2, \quad \varphi_{1m} = \varphi_{1m}^* + 2e_m \varepsilon_{ii}^e, \quad (3)$$

де u_0 – частина внутрішньої енергії, що не залежить від дефектності матеріалу; h_g , h_D – густини МЗ та дислокацій; $M = \lambda + 2\mu$ – модуль одностороннього стиснення матеріалу; λ , μ – сталі Ламе; 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; φ_{0m}^* – власна енергія дефекту з урахуванням його розмірності (на одиницю довжини для дислокацій і поверхнева густина для МЗ); φ_{0m} – та сама енергія з урахуванням впливу пружних деформацій у лінійному (константа g_m) і квадратичному наближеннях; додатна стала g_m відповідає за процес генерації структурних дефектів при розтягненні $\varepsilon_{ii}^e > 0$ або за їх анігіляцію у разі реалізації стиснення $\varepsilon_{ii}^e < 0$; \bar{M}_m , $\bar{\mu}_m$ – пружні сталі, які відображають зменшення відповідних пружних модулів, що обумовлено існуванням структурних дефектів; φ_{1m}^* , φ_{1m} – коефіцієнти, що відповідають за процеси рекристалізації (анігіляції дефектів) без урахування та з урахуванням впливу пружної деформації в лінійному наближенні (константа e_m); відповідно e_m відображає прискорення процесу анігіляції при додатному значенні $\varepsilon_{ii}^e > 0$, у випадку від'ємного $\varepsilon_{ii}^e < 0$ розуміють зворотно-спрямований процес; значення індексів $m = g$ відносять до МЗ, а $m = D$ – до дислокацій; φ_{gD} – параметр, що відображає енергію взаємодії обраних структурних дефектів.

Відзначимо, що в роботі використано методу, що розроблена для опису нерівноважних процесів, оскільки відомі класичні підходи в цій області не працюють. Згідно з цим підходом формування стаціонарного стану пов'язане з максимумами внутрішньої енергії, що представляється можливим за рахунок використання деякого «ефективного» потенціалу для густини внутрішньої енергії. Цей потенціал є конструкцією, що пов'язана з оригінальною внутрішньою енергією за рахунок певного перетворення (коли ентропійний фактор та оригінальна внутрішня енергія об'єднуються в «ефективну» внутрішню енергію) [1*], проте немає її прямого фізичного змісту. Подібна властивість внутрішньої енергії схожа з властивостями термодинамічного потенціалу, що введено раніше для опису сильно нерівноважних процесів [2*]. Крім того, формування максимуму внутрішньої енергії має вагоме значення для

магнетизму та впорядкування сплавів. У нашому випадку енергетичне накачування реалізується завдяки ПД у ході фрагментації зернистої структури металу чи сплаву. В подальшому для уникнення непорозумінь ці два поняття ототожнено, таким чином, співвідношення (1) розглядається як аналог внутрішньої енергії.

Для розрахунків прийнято набір параметрів, що є обґрунтованими в ряді праць та враховують реально спостережувані закономірності в процесі оброблення міді. Значення першого і другого інваріантів тензора пружних деформацій ε_{ii}^e , I_2 є керувальними параметрами і представляють зовнішній механічний вплив (тиск) під час ПД.

У *другому* підрозділі шляхом диференціювання базового енергетичного потенціалу (1) одержано еволюційні рівняння для нерівноважних змінних:

$$\tau_{h_D} \frac{\partial h_D}{\partial t} = \varphi_{0D} - \varphi_{1D} h_D + \varphi_{gD} h_g, \quad (4)$$

$$\tau_{h_g} \frac{\partial h_g}{\partial t} = \varphi_{0g} - \varphi_{1g} h_g + \varphi_{2g} h_g^2 - \varphi_{3g} h_g^3 + \varphi_{gD} h_D, \quad (5)$$

де τ_{h_m} – обернено пропорційні величини до кінетичних коефіцієнтів, що мають зміст часу релаксації відповідних дефектних підструктур та відображають інерційні властивості системи; h_m – густини відповідних дефектів ($m = g, D$).

Застосовуючи адіабатичне наближення $\tau_{h_g} \gg \tau_{h_D}$, одержано рівняння типу Ландау – Халатнікова у термінах внутрішньої енергії:

$$\tau_{h_g} \frac{\partial h_g}{\partial t} = F(h_g), \quad (6)$$

де права частина (6) має вигляд

$$F(h_g) = \varphi_{0g} + \varphi_{gD} \frac{\varphi_{0D}}{\varphi_{1D}} - \left(\varphi_{1g} - \frac{\varphi_{gD}^2}{\varphi_{1D}} \right) h_g + \varphi_{2g} h_g^2 - \varphi_{3g} h_g^3. \quad (7)$$

Водночас система характеризується ефективним потенціалом

$$V(h_g) = \int_0^{h_g} F(h_g) dh_g. \quad (8)$$

На рисунку 1 представлено залежність стаціонарних значень густини МЗ, одержаної шляхом використання необхідної умови існування екстремумів до рівняння (8), від керувального параметра I_2 за різних значень першого інваріанта ε_{ii}^e . Показано, що в полі дії стискальних деформацій система може функціонувати у двох стійких станах, що відповідають формуванню крупнозернистої полікристалічної чи НК структури (штрихові та суцільні сегменти кривих 1–4), та одному нестійкому (пунктирні ділянки).

Досліджуючи межі втрати стійкості стаціонарних станів, побудовано фазову діаграму (ФД) (рисунок 2), що визначає режими фрагментації металевих зразків під час ПД. Визначено, що в області А реалізуються два ненульові стаціонарні

стани системи, тобто можливе одночасне співіснування двох граничних структур із великими розмірами зерен та більш дрібною СМК або НК структурою. В області A^* перше стаціонарне значення густини МЗ набуває нульового значення. У цьому випадку вважається, що зразок є монокристалом або має близьку до нього структуру (крупнозернистого полікристала). Єдиний нульовий стаціонарний стан формується в області малих деформацій B^* . За великих деформацій з області B можливе утворення лише однієї граничної структури. Зазначимо, що реальній поведінці матеріалів під час ПД найбільше відповідають випадки, які реалізуються в областях A та B .

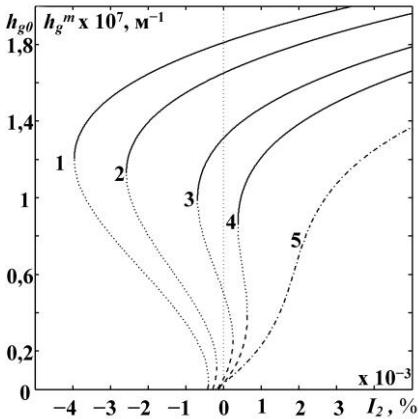


Рисунок 1 – Залежність стаціонарних значень густини МЗ h_{g0} , h_g^m m^{-1} від другого інваріанта тензора деформацій I_2 %. Криві 1–5 відповідають значенням $\epsilon_{ii}^e = (-0,35; -0,25; -0,1; -0,001; 0,2)$ %

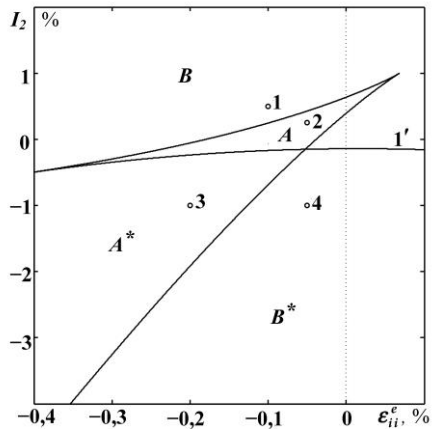


Рисунок 2 – Фазова діаграма режимів фрагментації з областями формування двох (A , A^*) та однієї (B , B^*) граничних структур

У третьому підрозділі досліджено кінетику процесу фрагментації металів чи сплавів під час ПД. Показано, яким чином залежно від початкових значень густин дефектів, що відповідають чистим знеміцненим металам та матеріалам із високою дефектністю, і значень керувальних параметрів, – пружних зсувних і стискальних деформацій, – формуються граничні (стаціонарні) структури різних типів (рисунок 3). Одержані залежності порівняно з експериментальними даними. Установлено вплив на кінетику процесу ступеня взаємодії двох дефектних підсистем. Виявлено, що зміна станів системи має характер структурно-фазового переходу. Зі способів опису випливає, що гранична (стаціонарна) структура формується як результат динамічного врівноваження процесів генерації та анігіляції структурних дефектів, що відповідає експериментально встановленим закономірностям.

Третій розділ дисертації «Фазова кінетика процесу фрагментації металів чи сплавів при ПД» узагальнює результати, що одержані в попередньому розділі.

Проведено вивчення фазової кінетики дводефектної системи в процесі формування стаціонарних СМК чи НК структур та дослідження стійкості сформованих станів. Розділ складається з трьох підрозділів.

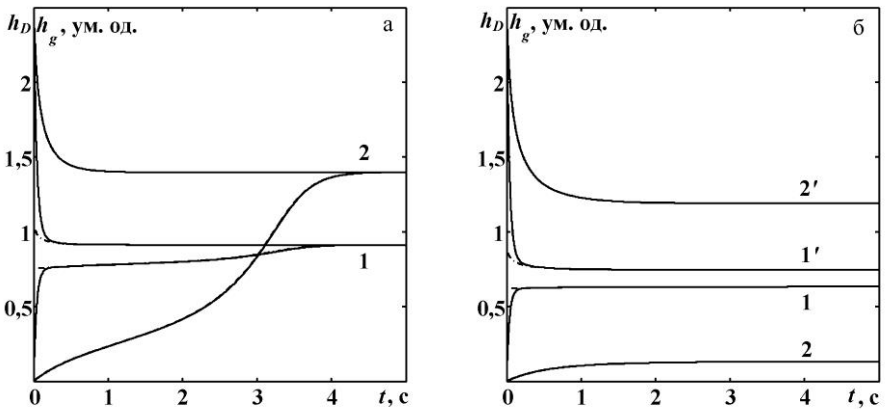


Рисунок 3 – Кінетика фрагментації металів чи сплавів у процесі ПД. Криві 1 та 1' представляють еволюцію густини дислокацій $h_D(t)$, а криві 2 та 2' відповідають часовим змінам густини МЗ $h_g(t)$, що є розв'язками системи (4), (5). Штрихові криві відображають еволюцію густини МЗ $h_g(t)$ відповідно до розв'язків рівняння (6). Релаксаційні залежності на рисунках а, б відповідають точкам 1, 2 на ФД (рисунок 2)

У першому підрозділі досліджено в рамках адіабатичного наближення $\tau_{h_g} \gg \tau_{h_D}$ кінетику процесу встановлення стаціонарних значень густини МЗ під час ПД залежно від значень пружної деформації (рисунок 4). Показано, що з наближенням до стаціонарних станів швидкість еволюції густини МЗ має експоненціальний характер, водночас виявлено, що процес фрагментації значно сповільнюється.

У другому підрозділі проведено аналіз стійкості фазової кінетики дводефектної системи у ході процесу, що розглядається. Використовуючи метод фазової площини, побудовано фазові портрети (рисунок 5), що дозволило вивчити поведінку системи в процесі формування стаціонарних СМК чи НК структур.

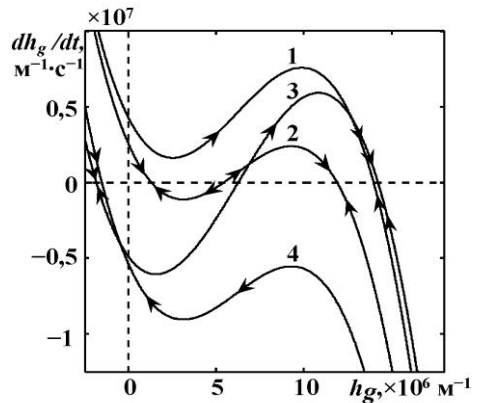


Рисунок 4 – Залежність швидкості зміни густини МЗ (6) від $h_g \text{ м}^{-1}$. Криві 1–4 відповідають точкам 1–4 на рисунку 2

Одержано загальний вираз для показників Ляпунова, що визначають

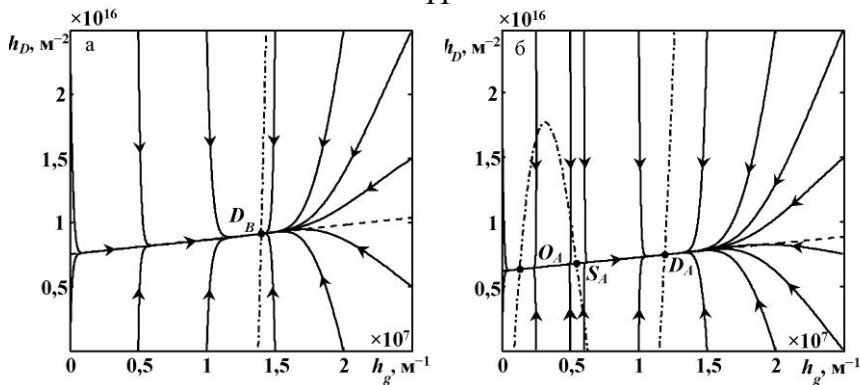


Рисунок 5 – Фазові портрети дводефектної системи (4), (5), що відображають різні режими фрагментації металів чи сплавів у процесі ПД: а, б – залежності обчислено для відповідних точок 1, 2 на рисунку 2. Штрихпунктирні лінії відображають точки, в яких фазові траєкторії мають вертикальні дотичні, а штрихові – горизонтальні стійкість граничних (стаціонарних) структур:

$$\lambda_{1,2} = \frac{1}{2} \left(-B_\lambda \pm \sqrt{D_\lambda} \right), \quad (9)$$

$$B_\lambda = \frac{\varphi_{1D}}{\tau_{h_D}} + \frac{\varphi_{1g}}{\tau_{h_g}} - 2 \frac{\varphi_{2g}}{\tau_{h_g}} h_{gn}^{st} + 3 \frac{\varphi_{3g}}{\tau_{h_g}} \left(h_{gn}^{st} \right)^2, \quad (10)$$

$$D_\lambda = 4 \frac{\varphi_{gD}^2}{\tau_{h_D} \tau_{h_g}} + \left[-\frac{\varphi_{1D}}{\tau_{h_D}} + \frac{\varphi_{1g}}{\tau_{h_g}} - 2 \frac{\varphi_{2g}}{\tau_{h_g}} h_{gn}^{st} + 3 \frac{\varphi_{3g}}{\tau_{h_g}} \left(h_{gn}^{st} \right)^2 \right]^2. \quad (11)$$

Знайдено критичні умови для керувальних параметрів та побудована діаграма на рисунку 6, що визначає стійкість сформованих станів системи. Показано, що система в загальному випадку характеризується наявністю трьох особливих точок (стаціонарних структур), реалізація яких залежить від навантаження під час ПД і які можуть бути лише двох типів: стійкий «вузол» чи «сідло».

У третьому підрозділі

вивчаються особливості фазової кінетики при ПД залежно від впливу кінетичних коефіцієнтів, що дозволило розглянути різні сценарії формування граничних СМК чи НК структур (рисунк 7). Показано, що з

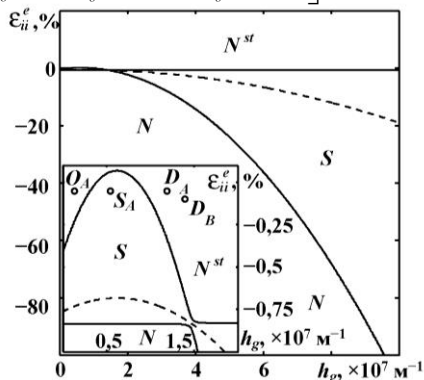


Рисунок 6 – Діаграма областей формування полікристалічних структур різних типів. Области N^{st} та N визначають умови утворення стійких і нестійких особливих точок (стаціонарних структур) типу «вузол», а область S – реалізації «сідла»

наближенням як до прямого $\tau_{h_g} \gg \tau_{h_D}$, так і до зворотного адіабатичного наближення $\tau_{h_D} \gg \tau_{h_g}$ система демонструє універсальну кінетичну поведінку.

Виявлено формування особливих ділянок, які мають притягувальний характер. Установлено, що процес фрагментації металу або сплаву під час ПД здійснюється двома етапами, що являють собою швидку релаксацію до особливих ділянок та повільний розвиток уздовж них.

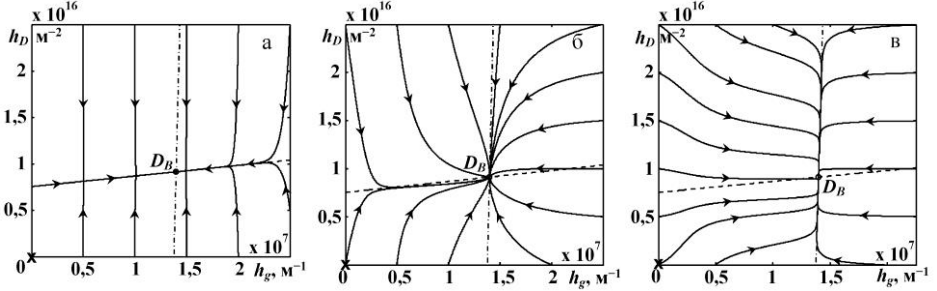


Рисунок 7 – Фазові портрети дводефектної системи (4), (5) за пружних деформацій $\varepsilon_{ii}^e = -0,05\%$, $I_2 = 2,5 \cdot 10^{-4}\%$ (точка 1 на рисунку 2) та значень часів релаксації: а – $\tau_{h_g} > 10^{-1} \tau_{h_D}$; б – $10^{-1} \tau_{h_g} > \tau_{h_D}$; в – $10^{-2} \tau_{h_g} > \tau_{h_D}$

Четвертий розділ «Вплив адитивного гаусівського шуму на процес фрагментації металів чи сплавів при ПД» присвячений вивченню впливу флуктуацій нерівноважних параметрів на еволюцію системи та її властивості.

У першому підрозділі визначено енергетичний потенціал для густини внутрішньої енергії:

$$u(h_g, h_D) = u_0 + \sum_{m=g, D} \left(\varphi_{0m} h_m - \frac{1}{2} \varphi_{1m} h_m^2 + \frac{1}{3} \varphi_{2m} h_m^3 - \frac{1}{4} \varphi_{3m} h_m^4 \right) + \varphi_{gD} h_g h_D - \psi_{gD} h_g^2 h_D - \phi_{gD} h_g h_D^2, \quad (12)$$

де u_0 , φ_{km} , φ_{gD} , ψ_{gD} , ϕ_{gD} – сталі коефіцієнти, що відображають рівень відліку внутрішньої енергії та енергію взаємодії дефектів один з одним і відповідно з дефектами інших структурних рівнів.

Урахування додаткових змінних у розвиненні густини внутрішньої енергії та введення в еволюційні рівняння адитивних некорельованих шумів основних параметрів дозволило більш точно описати самоузгоджену поведінку структурних дефектів у процесі утворення граничних СМК чи НК структур.

У другому підрозділі досліджується вплив шуму нерівноважних параметрів на еволюцію дводефектної системи, що визначається такими рівняннями

$$\tau_{h_D} \frac{\partial h_D}{\partial t} = \varphi_{0D} - \varphi_{1D} h_D + \varphi_{gD} h_g - \psi_{gD} h_g^2 + \sqrt{N_D} \xi_D(t), \quad (13)$$

$$\tau_{h_g} \frac{\partial h_g}{\partial t} = \varphi_{0g} - \varphi_{1g} h_g + \varphi_{2g} h_g^2 - \varphi_{3g} h_g^3 + \varphi_{gD} h_D - 2\psi_{gD} h_g h_D + \sqrt{N_g} \xi_g(t). \quad (14)$$

У правих частинах рівнянь наявні стохастичні доданки, що моделюють вплив шумів основних параметрів з інтенсивностями $N_{D, g}$, які виникають унаслідок впливу різних структурних неоднорідностей (фаз речовини, домішків, включень, вакансій, структурних дефектів інших рівнів, теплових флуктуацій та ін.) і дії зовнішнього силового поля. Функції $\xi_i(t)$ ($i = D, g$) відображають випадкові гаусівські величини (білий шум), що задовільняють таким моментам:

$$\langle \xi_i(t) \rangle = 0, \langle \xi_i(t) \xi_j(t') \rangle = 2\delta_{ij} \delta(t - t'). \quad (15)$$

Використовуючи адіабатичне наближення $\tau_{h_g} \gg \tau_{h_D}$, одержуємо нелінійне рівняння типу Ланжевена:

$$\tau_{h_g} \dot{h}_g = F(h_g) + \sqrt{N(h_g)} \xi(t), \quad (16)$$

$$F(h_g) \equiv \varphi_{0g} + \frac{\varphi_{0D} \varphi_{gD}}{\varphi_{1D}} + \left(\frac{\varphi_{gD}^2}{\varphi_{1D}} - 2 \frac{\psi_{gD} \varphi_{0D}}{\varphi_{1D}} - \varphi_{1g} \right) h_g + \left(\varphi_{2g} - 3 \frac{\psi_{gD} \varphi_{gD}}{\varphi_{1D}} \right) h_g^2 + \left(2 \frac{\psi_{gD}^2}{\varphi_{1D}} - \varphi_{3g} \right) h_g^3, \quad (17)$$

$$N(h_g) \equiv \frac{(\varphi_{gD} - 2\psi_{gD} h_g)^2}{\varphi_{1D}^2} N_D + N_g. \quad (18)$$

Очевидно, що $N(h_g)$ залежить від параметра порядку h_g , тому шум у рівнянні (16) має мультиплікативний характер.

Визначено рівняння Фоккера – Планка у формі Стратоновича, що дозволило одержати стаціонарні співвідношення для густини МЗ, закон розподілу ймовірності реалізації стаціонарних станів h_g та визначити ефективний синергетичний потенціал:

$$p(h_g) = Z^{-1} \exp(U_{ef}(h_g)), \quad F_p(h_g) = \int_{-\infty}^{h_g} p(h_g) dh_g, \quad (19)$$

$$U_{ef}(h_g) = -\frac{1}{2} \ln(N(h_g)) + \tau_{h_g} \int_0^{h_g} \frac{F(\hat{h}_g)}{N(\hat{h}_g)} d\hat{h}_g. \quad (20)$$

Дослідження умов формування стаціонарних станів системи за відносного стиснення металевго зразка $\varepsilon_{ii}^e = -0,1\%$ дозволило визначити можливі сценарії та режими процесу фрагментації полікристалічної структури. Побудовано фазову діаграму (рисунок 8), що залежно від інтенсивності шуму та пружної деформації

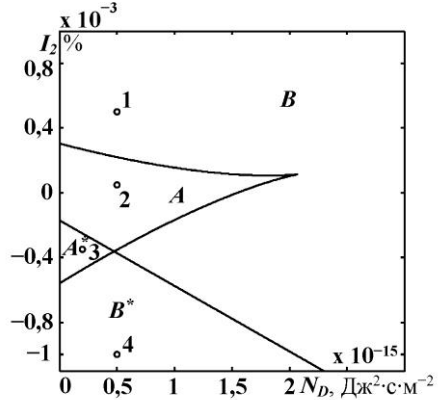


Рисунок 8 – Фазова діаграма режимів фрагментації полікристалічних металів у ході ПД з урахуванням інтенсивності флуктуацій N_D за сталого значення $\varepsilon_{ii}^e = -0,1\%$

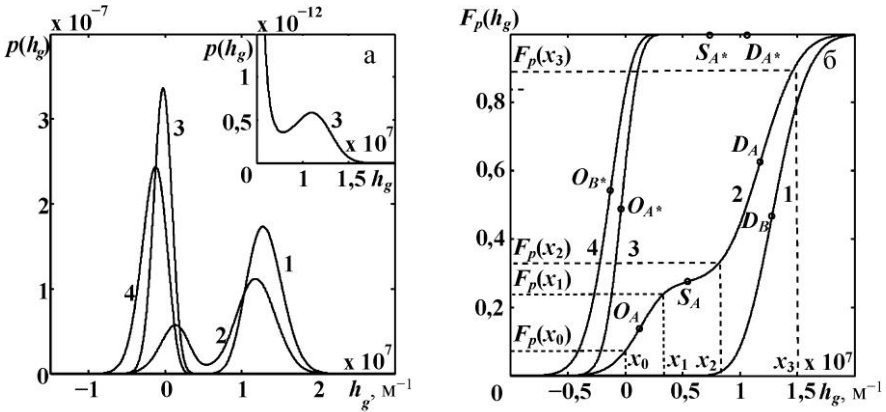


Рисунок 9 – Розподіл густини МЗ у металевій структурі при ПД: а – функція густини розподілу $p(h_g)$ (19); б – інтегральний закон розподілу $F_p(h_g)$ (19). Криві 1–4 побудовано для відповідних точок ФД (рисунок 2)

визначає області реалізації граничних (стаціонарних) структур різних типів.

Побудовано розподіли реалізації густин МЗ (рисунок 9), які дозволяють кількісно оцінити склад зернистої структури в об'ємі металевого зразка. Показано, що у випадку існування двох стаціонарних станів чи фаз (крива 2) гранична структура металу визначається сумішшю зерен різного розміру: доля СМК зерен із розмірами до 285 нм становить 15 %, а НК зерна з розмірами в межах $d \sim 66\text{--}125$ нм становлять 60 % від об'єму металевого зразка.

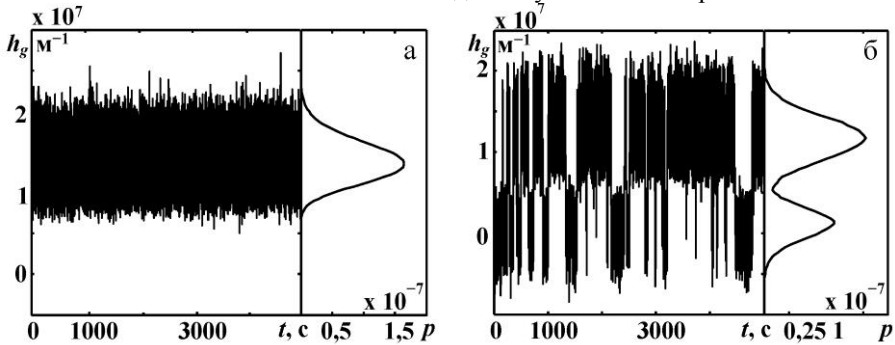


Рисунок 10 – Часові залежності $h_g(t)$ режимів фрагментації відповідно до областей (B, A) на ФД за параметрів $N_g = 1 \text{ Дж}^2 \cdot \text{с} \cdot \text{м}^{-4}$, $\varepsilon_{ii} = -0,1\%$, $N = 10^6$, $T = 5 \cdot 10^3 \text{ с}$, $\Delta t = 0,005 \text{ с}$: а, б – побудовані в рамках числення Стратоновича та відповідають точкам 1, 2 на ФД

У третьому підрозділі досліджено кінетику густин МЗ з урахуванням шуму. Побудовано часові залежності густин МЗ (рисунок 10), що враховують флуктуації основних параметрів та демонструють процес динамічної перебудови кристалічної структури металу чи сплаву у ході ПД. Виявлено, що за достатньої інтенсивності флуктуацій стохастичного джерела система може здійснювати

динамічні переходи між станами чи фазами матеріалу, що відповідають реалізації граничних структур із різними розмірами зерен.

Проведено аналіз часових залежностей густин МЗ за допомогою швидкого перетворення Фур'є. Виявлено, що спектральна густина еволюційної залежності густини МЗ залежить від частоти та відображає наявність у системі корельованих флукутацій. Установлено, що процес фрагментації полікристалічної структури металу чи сплаву під час ПД залежить від передісторії нерівноважного процесу. Дослідження автокореляційної функції випадкових переходів h_g дозволило визначити частотні характеристики процесу фрагментації. Установлено, що впродовж визначеного періоду часу хід еволюції густини МЗ найбільш імовірно буде зберігати тенденцію процесу. Внаслідок цього зроблено висновок, що одержані результати відтворюють реальні умови оброблення ПД та можуть бути корисними з точки зору технічних застосувань, оскільки дозволяють спрогнозувати розмір зерен чи стан (фазу) у кристалічній структурі металу чи сплаву впродовж визначеного часу кореляції та встановити необхідні умови оброблення для досягнення бажаного результату – стійкої граничної структури з СМК чи НК розмірами зерен.

Перелік та стислу характеристику результатів роботи наведено у висновках.

ВИСНОВКИ

Проведені у дисертації дослідження дали можливість сформулювати такі узагальнювальні висновки.

1. Розвинено феноменологічну модель, що описує взаємоузгоджений процес дефектоутворення під час впливу інтенсивної пластичної деформації, де в якості основних структурних дефектів розглянуто межі зерен та дислокації, що відповідають за формування дрібнозернистої структури і межі пластичної течії відповідно. Отримано фазову діаграму, що встановлює умови (значення пружних деформацій) формування граничних (стаціонарних) структур різних типів. Одержано кінетичні залежності формування субмікрокристалічних чи нанокристалічних структур, хід еволюції яких визначається залежно від початкових значень густин структурних дефектів і значень керувальних параметрів, що відповідають експериментально-спостережуваним закономірностям (лінійним розмірам зерен $d \approx 100$ нм і густині дислокацій в межах $h_D \approx 10^{15} - 10^{16} \text{ м}^{-2}$).

2. Одержано діаграму, на основі якої визначено оптимальні значення для першого і другого інваріантів тензора пружних деформацій, що дозволяють отримати стійку конфігурацію з необхідною густиною дефектів і стабільними фізико-механічними властивостями. У ході аналізу впливу часів релаксації на фазову динаміку нерівноважних змінних дводефектної моделі виявлено, що система демонструє універсальну кінетичну поведінку, яка полягає у формуванні на фазових портретах особливих ділянок, до яких незалежно від початкових умов швидко еволюціонують густини структурних дефектів.

3. Під час дослідження процесу фрагментації металеві структури у ході

інтенсивної пластичної деформації з урахуванням впливу адитивного гаусівського шуму визначено умови формування стаціонарних станів системи за відносного стиснення металевго зразка $\varepsilon_{ii}^e = -0,1\%$. Показано, що у разі монокристала чи крупнозернистого полікристала процес оброблення розпочинається з поступового накопичення пружної деформації до моменту виникнення пластичної течії, що є необхідною умовою активації процесу фрагментації.

4. Одержано фазову діаграму, що визначає інтенсивності флуктуацій стохастичного джерела, за яких система може здійснювати динамічні переходи між станами матеріалу, які відповідають утворенню граничних структур різних типів. Побудовано розподіл реалізацій густини меж зерен, що дозволив кількісно оцінити склад зернистої структури в об'ємі металевго зразка. Показано, що за визначених умов оброблення можливе формування однієї граничної структури з розмірами зерен у межах $d \sim 57-133$ нм. За умови формування одночасно двох стаціонарних станів чи фаз гранична структура визначається сумішшю зерен різного розміру. Доля субмікрокристалічних зерен із розмірами до 285 нм становить 15 %, а нанокристалічні зерна з розмірами в межах $d \sim 66-125$ нм становлять 60 % від об'єму металевго зразка.

5. На основі розрахованих часових залежностей густини меж зерен показано, що у випадку існування єдиного стаціонарного стану у металевом зразку формується нанокристалічна структура з розмірами зерен у межах устанавленого середнього значення $d \sim 76$ нм. Виявлено, що за випадкових переходів між двома стаціонарними станами системи формується фрагментована структура з розмірами кристалітів $d \sim 714$ нм та $d \sim 83$ нм. З аналізу часових залежностей густин меж зерен устанавлено, що процес фрагментації металевго полікристалічної структури залежить від передісторії нерівноважного процесу. Показано, що одержані результати можуть бути корисними з точки зору технічних застосувань, оскільки дозволяють спрогнозувати розмір зерен чи стан (фазу) у кристалічній структурі металу впродовж визначеного часу кореляції та встановити необхідні умови оброблення для досягнення бажаного результату – стійкої граничної структури з розмірами зерен у субмікро- та нанодіапазоні.

СПИСОК ЦИТОВАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

- 1*. Метлов Л. С. Неравновесная эволюционная термодинамика и ее приложения / Л. С. Метлов. – Донецк: Ноудидж, 2014. – 250 с.
- 2*. Панин В. Е. Неравновесная термодинамика деформируемого твердого тела как многоуровневой системы. Корпускулярно-волновой дуализм пластического сдвига / В. Е. Панин, В. Е. Егорушкин // Физическая мезомеханика. – 2008. – Т. 11, № 2. – Р. 5–26.

СПИСОК ОПУБЛІКОВАНИХ ПРАЦЬ ЗА ТЕМОЮ ДИСЕРТАЦІЇ

1. Наукові праці, в яких опубліковані основні наукові результати

1. Влияние внешнего периодического воздействия на кинетику фрагментации металлов при интенсивной пластической деформации / А. В. Хоменко, Д. С. Трощенко,

Д. В. Бойко, М. В. Захаров // Журнал нано- и электронной физики. – 2015. – Т. 7, № 1. – С. 01039 (11 сс).

2. Khomenko A. V. Thermodynamics and kinetics of solids fragmentation at severe plastic deformation / A. V. Khomenko, **D. S. Troshchenko**, L. S. Metlov // Condensed Matter Physics. – 2015. – Vol. 18, № 3. – P. 33004 (14 pp).

3. Хоменко А. В. Моделирование кинетики режимов фрагментации материалов при интенсивной пластической деформации / А. В. Хоменко, **Д. С. Трошенко**, Л. С. Метлов // Металлофизика и новейшие технологии. – 2017. – Т. 39, № 2. – С. 265–284.

4. Хоменко А. В. Фазовая динамика фрагментации металлов при мегапластической (интенсивной) деформации / А. В. Хоменко, **Д. С. Трошенко**, Л. С. Метлов // Деформация и разрушение материалов. – 2017. – № 8. – С. 2–10.

5. Особенности фазовой кинетики фрагментации металлов при интенсивной пластической деформации / А. В. Хоменко, **Д. С. Трошенко**, Л. С. Метлов, П. Е. Трофименко // Наносистемы, наноматериалы, нанотехнологии. – 2017. – Т. 15, № 2. – С. 203–220.

6. Вплив адитивного гаусового шуму на фазову діаграму режимів фрагментації металу при інтенсивній пластичній деформації / О. В. Хоменко, **Д. С. Трошенко**, Я. О. Кравченко, М. О. Хоменко // Журнал нано- та електронної фізики. – 2017. – Т. 9, № 3. – С. 03045 (8 сс).

2. Наукові праці апробаційного характеру

7. Phase diagram of metals fragmentation modes at severe plastic deformation / A. V. Khomenko, **D. S. Troshchenko**, K. P. Khomenko, I. O. Solonar // Proceedings of 2016 International Conference on Nanomaterials: Application and Properties (NAP-2016) (Lviv, 14–19 September 2016). – Sumy, 2016. – P. 01PCSI07 (4 pp).

8. Modeling of the noise influence on the metals fragmentation modes at severe plastic deformation / A. V. Khomenko, **D. S. Troshchenko**, I. O. Solonar, P. E. Trofymenko // Proceedings of 2017 IEEE 7th International Conference on Nanomaterials: Application and Properties (NAP-2017) (Zatoka, 10–15 September 2017). – Sumy, 2017. – P. 01PCSI12 (5 pp).

9. Thermodynamics of fragmentation of solids at severe plastic deformation / A. V. Khomenko, **D. S. Troshchenko**, D. V. Boyko, M. V. Zaharov // Proceedings of the 4th International Conference «Nanomaterials: Applications and Properties» (Lviv, 21–27 September 2014). – Sumy, 2014. – Vol. 3, № 1. – P. 01PCSI16 (4 pp).

10. **Трошенко Д. С.** Вплив зовнішньої періодичної дії на фазову діаграму режимів фрагментації металів при інтенсивній пластичній деформації / Д. С. Трошенко, О. В. Хоменко // Праці XVII Міжнародного симпозиуму «Методи дискретних особливостей в задачах математичної фізики» (Харків–Суми, 8–13 Червня 2015). – Харків, 2015. – С. 245–248.

11. Хоменко А. В. Вплив шуму на фазову діаграму режимів фрагментації при інтенсивній пластичній деформації / А. В. Хоменко, **Д. С. Трошенко**, Л. С. Метлов // Збірник тез Міжнародної конференції студентів та молодих науковців з теоретичної та експериментальної фізики «ЕВРИКА-2014» (Львів, 15–17 травня 2014 р.). – Львів, 2014. – С. 27.

12. Khomenko A. V. Modeling noise effect on phase diagram of fragmentation regime at severe plastic deformation / A. V. Khomenko, **D. S. Troshchenko**, L. S. Metlov // Conference Programme and Book of Abstracts of 5th International Conference for Young Scientists «Low Temperature Physics-2014» (Kharkov, 2–6 June 2014). – Kharkov, 2014. – P. 135.

13. Хоменко О. В. Моделювання зовнішнього періодичного впливу на фазову діаграму та кінетику фрагментації металів при інтенсивній пластичній деформації / О. В. Хоменко, **Д. С. Трошенко**, М. О. Хоменко // Збірник тез Міжнародної конференції

студентів та молодих науковців з теоретичної та експериментальної фізики «ЕВРИКА-2015» (Львів, 13–15 травня 2015 р.). – Львів, 2015. – С. F8.

14. Хоменко А. В. Термодинамика и кинетика фрагментации твердых тел при интенсивной пластической деформации / А. В. Хоменко, **Д. С. Трошенко**, Е. П. Хоменко // Матеріали Міжнародної конференції молодих учених і аспірантів «ІЕФ – 2015» (Ужгород, 18–25 травня 2015 р.). – Ужгород, 2015. – С. 213.

15. Khomenko A. V. Modeling of phase dynamics and kinetics of fragmentation at severe plastic deformation / A. V. Khomenko, **D. S. Troshchenko**, L. S. Metlov // Conference Programme and Book of Abstracts of 6th International Conference for Young Scientists «Low Temperature Physics-2015» (Kharkov, 1–5 June 2015). – Kharkov, 2015. – P. 117.

16. Khomenko A. V. Modeling of kinetics of the materials fragmentation modes at severe plastic deformation / A. V. Khomenko, **D. S. Troshchenko**, L. S. Metlov // Conference Programme and Abstracts Book of 7th International Conference for Young Scientists «Low Temperature Physics-2016» (Kharkov, 6–10 June 2016). – Kharkov, 2016. – P. 117.

17. **Troshchenko D. S.** Modeling of the phase diagram and kinetics of materials fragmentation modes under severe plastic deformation / D. S. Troshchenko, A. V. Khomenko // Conference Programme and Abstracts of the 4th International Conference «Nanotechnologie» «Nano-2016» (Tbilisi, Georgia, 24–27 October 2016). – Tbilisi, 2016. – P. 208.

18. Khomenko A. V. Stability diagram of metals fragmentation during severe plastic deformation / A. V. Khomenko, **D. S. Troshchenko**, I. O. Solonar // Conference Programme and Abstracts Book of 8th International Conference for Professionals and Young Scientists «Low temperature physics-2017» (Kharkov, 29 May – 2 June 2017). – Kharkov, 2017. – P. 198.

19. **Troshchenko D. S.** The noise influence on the materials fragmentation modes at severe plastic deformation / D. S. Troshchenko, A. V. Khomenko, I. O. Solonar // Abstracts Book of 5th International Research and Practice Conference «Nanotechnology and Nanomaterials» «NANO-2017» (Chernivtsi, 23 – 26 August 2017). – Chernivtsi, 2017. – P. 534.

3. Праці, які додатково відображають наукові результати

20. Влияние шума на режимы фрагментации материалов при интенсивной пластической деформации / А. В. Хоменко, **Д. С. Трошенко**, И. О. Солоняра, К. В. Васюхно // Матеріали та програма науково-технічної конференції «Інформатика, математика, автоматика-2018» (Суми, 5–9 лютого 2018 р.). – Суми, 2018. – С. 182.

21. Діаграма стійкості фрагментації металів при інтенсивній пластичній деформації / О. В. Хоменко, **Д. С. Трошенко**, М. О. Хоменко, И. О. Солоняра // Збірник тез Міжнародної конференції студентів та молодих науковців з теоретичної та експериментальної фізики «ЕВРИКА- 2017» (Львів, 16–18 травня 2017 р.). – Львів, 2017. – С. С1.

22. Хоменко А. В. Двухуровневая и двухмодовая кинетика фрагментации металлов при интенсивной пластической деформации / А. В. Хоменко, **Д. С. Трошенко**, И. О. Солоняра // Матеріали та програма науково-технічної конференції «Інформатика, математика, автоматика-2017» (Суми, 17–21 квітня 2017 р.). – Суми, 2017. – С. 176.

АНОТАЦІЯ

Трошенко Д. С. Нерівноважна еволюційна термодинаміка фрагментації металів з урахуванням стохастичності. – Рукопис.

Дисертація на здобуття наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.07 – фізика твердого тіла. – Сумський державний університет, Суми, 2018.

Дисертаційна робота присвячена теоретичному опису процесу фрагментації

металевої структури, що зазнає інтенсивної пластичної деформації, встановленню особливостей структурних та кінетичних явищ, які відбуваються в металах під час оброблення, стійкості сформованих стаціонарних станів та дослідженню впливу адитивних флуктуацій нерівноважних змінних на хід еволюції структурних дефектів.

За результатами проведеного дослідження встановлено умови оброблення (значення пружних деформацій), які істотно впливають на формування стійких субмікрокристалічних чи нанокристалічних структур. Побудовані фазові діаграми, що демонструють різні режими фрагментації та дозволяють у загальному вигляді відобразити сценарії поведінки структурних дефектів під час оброблення. Показано, що одержані результати добре пояснюють та дають можливість прогнозувати експериментальні дані: формування стійкої граничної структури з бажаними розмірами зерен та високими фізико-механічними властивостями.

Ключові слова: межа зерна, дислокація, інтенсивна пластична деформація, фазовий перехід, фазова діаграма, гранична структура, внутрішня енергія, фрагментація, пружна деформація, адитивний шум.

АННОТАЦІЯ

Трошенко Д. С. Неравновесная эволюционная термодинамика фрагментации металлов с учетом стохастичности. – Рукопись.

Диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика твердого тела. – Сумский государственный университет, Сумы, 2018.

Диссертация посвящена теоретическому описанию процесса фрагментации металлической структуры, подверженной интенсивной пластической деформации, установлению особенностей структурных и кинетических явлений, происходящих в металах при обработке, устойчивости сформировавшихся стационарных состояний и исследованию влияния аддитивных флуктуаций неравновесных переменных на ход эволюции структурных дефектов.

По результатам проведенного исследования установлены условия обработки (значения упругих деформаций), существенно влияющие на формирование устойчивых субмикрокристаллических или нанокристаллических структур. Построены фазовые диаграммы, которые демонстрируют различные режимы фрагментации и позволяют в общем виде отразить сценарии поведения структурных дефектов во время обработки. Показано, что полученные результаты хорошо объясняют и дают возможность прогнозировать экспериментальные данные: формирование устойчивой предельной структуры с желаемыми размерами зерен и высокими физико-механическими свойствами.

Ключевые слова: граница зерна, дислокация, интенсивная пластическая деформация, фазовый переход, фазовая диаграмма, предельная структура, внутренняя энергия, фрагментация, упругая деформация, аддитивный шум.

SUMMARY

Troshchenko D. S. Nonequilibrium evolutionary thermodynamics of metals fragmentation with taking into account stochasticity. – Manuscript.

PhD thesis submitted for the degree of a candidate of physical and mathematical sciences, speciality 01.04.07 – physics of solid state. – Sumy State University, Sumy, 2018.

PhD thesis is devoted to the several aspects: (I) the theoretical description of the process of fragmentation of a metal structure subjected to severe plastic deformation, (II) the establishment of structural and kinetic phenomena peculiarities occurring in metals during processing, (III) the stability of the formed stationary states, (IV) the study of the influence of the additive fluctuations of the main parameters on the evolution process of structural defects.

Processing conditions (the value of elastic strains), which significantly influence on the formation of stable submicrocrystalline or nanocrystalline structures, were established by results of study. The phase diagrams were constructed. It demonstrates various modes of fragmentation and allow to reflect the scenarios of behavior of structural defects in a general view during processing. It is shown that the obtained results well explain and make it possible to predict the experimental data: the formation of a stable limiting structure with the desired grain size and high physical and mechanical properties.

Key words: grain boundary, dislocation, severe plastic deformation, phase transitions, phase diagram, limiting structure, internal energy, fragmentation, elastic strain, additive noise.

Підписано до друку 16.03.2018.
Формат 60×90/16. Ум. друк. арк. 1,1. Обл.-вид. арк. 0,9. Тираж 100 пр. Зам. № 452

Видавець і виготовлювач
Сумський державний університет,
вул. Римського-Корсакова, 2, м. Суми, 40007
Свідоцтво суб'єкта видавничої справи ДК № 3062 від 17.12.2007.