

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ  
СУМСЬКИЙ ДЕРЖАВНИЙ УНІВЕРСИТЕТ

Кваліфікаційна наукова праця  
на правах рукопису

Трощенко Дар'я Сергіївна

УДК 536.9:539.951-034-022.531(043.5)

## ДИСЕРТАЦІЯ

Нерівноважна еволюційна термодинаміка фрагментації металів  
з урахуванням стохастичності

01.04.07 – фізика твердого тіла

Фізико-математичні науки

Подається на здобуття наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук  
Дисертація містить результати власних досліджень. Використання ідей, резуль-  
татів і текстів інших авторів мають посилання на відповідне джерело



Д.С. Трощенко

Науковий керівник – Хоменко Олексій Віталійович, д-р фіз.-мат. наук, професор

Суми – 2018

## АНОТАЦІЯ

*Трощенко Д. С.* Нерівноважна еволюційна термодинаміка фрагментації металів з урахуванням стохастичності. – Кваліфікаційна наукова праця на правах рукопису.

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

Дисертаційна робота присвячена розвиненню узагальненої феноменологічної моделі, що дозволяє описати процес фрагментації полікристалічної структури металів чи сплавів під час інтенсивної пластичної деформації (ІПД), встановленню закономірностей структурних та кінетичних явищ, які відбуваються під час ІПД, дослідженню стійкості сформованих станів чи фаз у структурі металів, урахуванню впливу адитивних флуктуацій основних параметрів на процес еволюції структурних дефектів.

Для досягнення поставленої мети узагальнено термодинамічну модель, що описує фрагментацію металів чи сплавів при ІПД. В якості основних структурних дефектів розглянуто межі зерен (МЗ) та дислокації, що відповідають за формування дрібнозернистої структури та межі пластичної течії. Шляхом безпосереднього диференціювання багатовимірного ефективного потенціалу для густини внутрішньої енергії, отримано еволюційні рівняння нерівноважних змінних системи, що дозволяють однозначно відобразити специфіку процесу фрагментації зернистої структури металу та супроводжувальні процеси під час ІПД. Використовуючи адіабатичне наближення, що визначає характер еволюції основних нерівноважних змінних, отримано рівняння типу Ландау-Халатнікова, співвідношення для ефективного потенціалу системи та побудовано стаціонарні залежності, що дозволяють спостерігати утворення різних граничних (стаціонарних) структур. Вперше проведено дослідження втрати стійкості стаціонарних станів термодинамічної системи, що дозволило побудувати ФД режимів фрагментації металу або сплаву при ІПД. Одержана діаграма встановлює умови формування

граничних структур різних типів та дозволяє у загальному вигляді відобразити можливі сценарії та режими поведінки дводефектної системи. Вказано конкретні параметри, що істотно впливають на виникнення субмікрокристалічної (СМК) чи нанокристалічної (НК) граничної (стаціонарної) структури.

У відповідності до отриманих результатів, проведено детальне дослідження еволюції густин дефектів та їх взаємодії у процесі формування різних граничних (стаціонарних) структур з лінійними розмірами зерен  $d \approx 100$  нм і густиною дислокацій в межах  $h_D \approx 10^{15} - 10^{16} \text{ м}^{-2}$ . Показано, яким чином, залежно від початкових значень: початкового стану матеріалу (густини дефектів), пружних зсувних і стискальних деформацій, – формуються ці структури. Встановлено, що кінетика процесу фрагментації супроводжується тісною взаємодією двох дефектних підсистем. Виявлено, що зміна станів системи має характер структурно-фазових переходів, оскільки еволюція густини дефектів супроводжується різкими переходами. Зі способів опису впливає, що гранична (стаціонарна) структура являє собою динамічну рівновагу процесів генерації й анігіляції структурних дефектів, що відповідає експериментально-спостережуваним закономірностям.

Проведено вивчення та описання фазової кінетики густин дефектів у процесі формування стаціонарних СМК чи НК структур. Побудовано залежності швидкості зміни густини МЗ від величини пружних деформацій та фазові портрети кінетики нерівноважних змінних. Використовуючи перший метод Ляпунова, вперше проведено дослідження стійкості вихідної системи еволюційних рівнянь та отримано загальний вираз для показників Ляпунова, що в цілому характеризують поведінку динамічної системи у фазовому просторі. Виявлено, що система у загальному випадку має три стаціонарні стани, реалізація яких залежить від характеру прикладеного навантаження під час ІПД, і які відповідають формуванню особливих точок двох типів: “вузол” або “сідло”. Вперше проведено аналіз показників Ляпунова, що дозволило побудувати діаграму, яка наочно демонструє області формування стійких і нестійких граничних (стаціонарних) СМК чи НК структур. Таким чином, встановлено оптимальні значення для першого і другого інваріантів тензора пружних деформацій, що дозволя-

ють сформувати конфігурацію з необхідною густиною дефектів і стабільними фізико-механічними властивостями.

Вивчено вплив часів релаксації на фазову динаміку нерівноважних змінних системи, що дозволило розглянути різні сценарії формування граничних (стаціонарних) СМК чи НК структур. Показано, що з наближенням як до прямого  $\tau_{h_g} \gg \tau_{h_D}$ , так і до оберненого адіабатичного наближення  $\tau_{h_D} \gg \tau_{h_g}$  система демонструє універсальну кінетичну поведінку. На фазових портретах виявлено формування особливих ділянок, які визначаються як “русло великої річки”. Показано, що ці ділянки мають притягувальний характер, оскільки незалежно від початкових умов до них швидко еволюціонують всі фазові траєкторії. Досліджуючи наближення до зворотної адіабатики  $\tau_{h_D} \gg \tau_{h_g}$ , виявлено, що зі зменшенням параметра  $\tau_{h_g}$  в універсальній поведінці системи спостерігається плавний перехід від майже горизонтальних лінійних ділянок до більш вертикальних, що також проявляється у прискоренні еволюції системи до стійких стаціонарних станів. У випадку одночасного існування двох граничних структур, виявлено формування трьох особливих ділянок, дві з яких мають притягувальний характер і визначаються як “русло великої річки”, а третя – має протилежну природу “репелера”. Разом із тим встановлено, що процес фрагментації металу чи сплаву під час ПД здійснюється в два етапи, що представляють швидку еволюцію густин структурних дефектів до певної притягувальної ділянки та подальший повільний розвиток уздовж неї. Крім того, дослідження фазової кінетики дводефектної моделі демонструє, що система незалежно від виду адіабатичного наближення еволюціонує до єдиних стаціонарних станів, що формуються за однакові за порядком інтервали часу.

Продовжено дослідження, яке спрямоване на подальший розвиток теорії, а саме на вивчення впливу флуктуацій нерівноважних параметрів на еволюцію системи і її властивості в цілому. Вперше, врахування додаткових змінних у розвитку густини внутрішньої енергії та введення в еволюційні рівняння адитивних некорельованих шумів основних параметрів дозволили більш точно описати самоузгоджену поведінку структурних дефектів у процесі утворення граничних

СМК чи НК структур. Дослідження умов формування стаціонарних станів системи при відносному стисненні металевго зразка  $\varepsilon_{ii}^e = -0,1\%$  задає можливі сценарії та режими процесу фрагментації полікристалічної структури. Побудовано фазову діаграму, що залежно від інтенсивності шуму та пружної деформації визначає області реалізації граничних (стаціонарних) структур різних типів. 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. Побудовано розподіли реалізацій густин МЗ, які дозволяють кількісно оцінити склад зернистої структури в об'ємі металевго зразка. Показано, що у випадку існування двох стаціонарних станів чи фаз, гранична структура металу визначається сумішшю зерен різного розміру: доля СМК зерен з розмірами до 285 нм становить 15%, а НК зерна з розмірами в межах  $d \sim 125 - 66$  нм складають 60% об'єму металевго зразка.

Використовуючи системи числення Іто та Стратоновича, побудовано часові залежності густин МЗ, що враховують флуктуації основних параметрів та демонструють процес динамічної перебудови кристалічної структури металу чи сплаву при ІПД. Виявлено, що при достатній інтенсивності флуктуацій стохастичного джерела система може здійснювати динамічні переходи між станами чи фазами матеріалу, що відповідають реалізації граничних структур з різними розмірами зерен, які неможливо досягти при розгляді детерміністичного підходу. Показано, що у випадку існування єдиного стаціонарного стану, у металевому зразку формується НК структура з розмірами зерен в межах встановленого середнього значення  $d \sim 76$  нм. Випадкові переходи між двома стаціонарними станами системи дозволяють сформувати фрагментовану структуру, що визначається розмірами кристалітів:  $d \sim 714$  нм та  $d \sim 83$  нм.

Вперше проведено аналіз часових залежностей густин МЗ за допомогою швидкого перетворення Фур'є. Виявлено флуктуації зі спектральною густиною потужності сигналу, що відображає наявність у системі корельованих флукту-

ацій. Встановлено, що процес фрагментації полікристалічної структури металу чи сплаву під час ІПД залежить від передісторії нерівноважного процесу. Дослідження автокореляційної функції випадкових коливань дозволило визначити вид кореляційної функції та виявити частотні характеристики процесу фрагментації. Зроблено висновок, що одержані результати відтворюють реальні умови оброблення ІПД та можуть бути корисними з точки зору технічних застосувань, оскільки дозволяють спрогнозувати розмір зерен чи стан (фазу) у кристалічній структурі металу чи сплаву протягом визначеного часу кореляції та встановити необхідні умови оброблення для досягнення бажаного результату – стійкої граничної структури з СМК чи НК розмірами зерен.

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

### Список публікацій здобувача за темою дисертації

#### 1. Наукові праці, в яких опубліковані основні наукові результати

1. Хоменко А. В. Моделирование кинетики режимов фрагментации материалов при интенсивной пластической деформации / А. В. Хоменко, Д. С. Трощенко, Л. С. Метлов // Металлофиз. новейшие технол. – 2017. – Т. 39, № 2. – С. 265–284.

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

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

4. Вплив адитивного гаусового шуму на фазову діаграму режимів фрагментації металу при інтенсивній пластичній деформації / О. В. Хоменко, Д. С. Трощенко, Я. О. Кравченко, М. О. Хоменко // Ж. нано-електрон. фіз. – 2017. – Т. 9, № 3. – С. 03045 (8 сс).

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

6. Влияние внешнего периодического воздействия на кинетику фрагментации металлов при интенсивной пластической деформации / А. В. Хоменко, **Д. С. Трощенко**, Д. В. Бойко, М. В. Захаров // *Ж. нано-электрон. физ.* – 2015. – Т. 7, № 1. – С. 01039 (11 сс).

## 2. Наукові праці апробаційного характеру

7. 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(5pp).

8. 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).

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

10. 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).

11. **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 5<sup>th</sup> International Research and Practice Conference*

“Nanotechnology and Nanomaterials” “NANO-2017” (Chernivtsi, 23–26 August 2017). – Chernivtsi, 2017. – P. 534.

12. 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 8<sup>th</sup> International Conference for Professionals and Young Scientists “Low temperature physics-2017” (Kharkov, 29 may – 2 June 2017). – Kharkov, 2017. – P. 198.

13. **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.

14. 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 7<sup>th</sup> International Conference for Young Scientists “Low Temperature Physics-2016” (Kharkov, 6–10 June 2016). – Kharkov, 2016. – P. 117.

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 6<sup>th</sup> International Conference for Young Scientists “Low Temperature Physics-2015” (Kharkov, 1–5 June 2015). – Kharkov, 2015. – P. 117.

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

17. Хоменко О. В. Моделювання зовнішнього періодичного впливу на фазову діаграму та кінетику фрагментації металів при інтенсивній пластичній деформації / О. В. Хоменко, **Д. С. Трощенко**, М. О. Хоменко // Збірник тез Міжнародної конференції студентів та молодих науковців з теоретичної та екс-



периментальної фізики “ЕВРИКА-2015” (Львів, 13–15 травня 2015 р.). – Львів, 2015. – С. F8.

18. 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 5<sup>th</sup> International Conference for Young Scientists “Low Temperature Physics-2014” (Kharkov, 2–6 June 2014). – Kharkov, 2014. – P. 135.

19. Хоменко А. В. Вплив шуму на фазову діаграму режимів фрагментації при інтенсивній пластичній деформації / А. В. Хоменко, **Д. С. Трощенко**, 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.

**3. Праці, які додатково відображають наукові результати** 20. Влияние шума на режимы фрагментации материалов при интенсивной пластической деформации / А. В. Хоменко, **Д. С. Трощенко**, И. О. Солонар, 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. Трощенко**, М. О. Хоменко, И. О. Солонар // 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. Трощенко**, И. О. Солонар // Матеріали та програма науково-технічної конференції “Інформатика, математика, автоматика-2017” (Суми, 17–21 квітня 2017 р.). – Суми, 2017. – С. 176.

## 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 (doctor of philosophy), speciality 01.04.07 Physics of solid state. – Sumy State University, Sumy, 2018.

PhD thesis is devoted to the several aspects: (I) development of a generalized phenomenological model which allows to describe the process of fragmentation of the polycrystalline structure of metals or alloys during the severe plastic deformation (SPD); (II) establishment of regularities of structural and kinetic phenomena occurring during the SPD; (III) investigation of stability of the formed states or phases in the metals structure; (IV) consideration of the influence of the additive fluctuations of the main parameters on the evolution process of structural defects.

The thermodynamic model that describes the fragmentation of metals or alloys during SPD were generalized to achieve the stated goal. As the main structural defects, the grain boundaries (GBs) and the dislocations that are responsible for the formation of the fine-grained structure and the limits of the plastic flow were considered. Evolution equations of nonequilibrium variables of the system were obtained by direct differentiation of the multidimensional effective potential for the density of internal energy. These equations allow to reflect the specifics of the fragmentation process of the grain metal structure and the accompanying processes during the SPD unambiguously. Using the adiabatic approximation that determines the nature of the evolution of the main nonequilibrium variables the Landau-Khalatnikov equation was obtained, the relation for the effective potential of the system and stationary dependencies that allow observing the formation of various limiting (stationary) structures were constructed. For the first time, a study of the stability loss of stationary states of the thermodynamic system was carried out. This made possible the construction of phase diagram of metals or alloys fragmentation modes at SPD. The obtained diagram establishes the conditions for the formation of

limiting structures of different types and allows to generalize possible scenarios and modes of the behavior of the two-defect system. Specific parameters were specified that significantly effect on the appearance of the submicrocrystalline (SMC) or nanocrystalline (NC) limiting (stationary) structure.

According to obtained results, a detailed investigation of the evolution of defects density and their interaction in the process of formation of various limiting (stationary) structures with linear grain sizes  $d \approx 100$  nm and dislocation density within  $h_D \approx 10^{15} - 10^{16} \text{ m}^{-2}$  was conducted. It was shown how, depending on the initial values (the initial state of the material (defects density), elastic shear and compressive strain) these structures are formed. It was established that the kinetics of the fragmentation process is accompanied by the close interaction of two defective subsystems. It was found that the change in the system states has the character of structural phase transition since the evolution of the defects density is accompanied by sharp transitions. From the methods of description, it follows that the limiting (stationary) structure is a dynamic equilibrium of the processes of generation and annihilation of structural defects that corresponds to experimentally observed regularities.

The study and description of the phase kinetics of the defects density in the process of the formation of stationary SMC or NC structures were performed. The dependences of the velocity of change in the GBs density from the magnitude of elastic strain were built. Also phase portraits of the kinetics of nonequilibrium variables were built. Using the first method of Lyapunov, the study of the stability of the output system of evolution equations was firstly conducted. A general expression for Lyapunov's characteristic exponents that characterize the behavior of the dynamical system in the phase space was obtained. It is revealed that the system in general has three stationary states, which correspond to the formation of special points of two types: "node" or "saddle". Their implementation depends on the nature of the applied load during the SPD. For the first time, Lyapunov's analysis was performed, which made it possible to construct a diagram that clearly demonstrates the areas of the formation of stable and unstable limiting (stationary) SMC or NC structures. Thus,

the optimal values for the first and second invariants of the elastic strain tensor were established, which allow to form the metal configuration with the required defects density and stable physical and mechanical properties.

The influence of relaxation times on phase dynamics of nonequilibrium variables of the system was studied. It allowed to consider different scenarios for the formation of limiting (stationary) SMC or NC structures. It was shown, with approaching the direct  $\tau_{h_g} \gg \tau_{h_D}$  or inverse adiabatic approximation  $\tau_{h_D} \gg \tau_{h_g}$ , the system demonstrates universal kinetic behaviour. The formation of singular sections called as “mainstreams” is revealed. It is shown that these sections have an attractive nature, since all phase trajectories are rapidly evolve to them regardless of the initial conditions. Investigating the inverse adiabatic approximation  $\tau_{h_D} \gg \tau_{h_g}$ , it was found that with a decrease in parameter of  $\tau_{h_g}$  the universal behavior of the system characterized by a smooth transition from almost horizontal lines to more vertical ones. It also manifests itself in accelerating the evolution of the system to stable stationary states. In the case of the simultaneous existence of two limiting structures, three singular sections are formed. Two of which have an attractive character and are defined as “mainstreams”, and the third has the opposite nature of “repeller”. As found out, the process of metals or alloys fragmentation during SPD is carried out in two stages, which represent the fast relaxation to singular sections and the slow movement on them. Moreover, the study of the phase kinetics of a two-defect model demonstrates that the system regardless of the type of adiabatic approximation evolves to united stationary states, which are formed during the same time intervals.

The research, which is aimed at the further development of the theory, namely the study of the influence of the fluctuations of nonequilibrium parameters on the evolution of the system and its properties in general was continued. For the first time, the both consideration of additional variables in the power series expansion for the density of internal energy and introduction of additive uncorrelated noise of the main parameters in the evolution equations allowed us to describe more accurately the self-consistent behavior of structural defects in the process of the formation of limiting SMC or NC structures. The investigation of the conditions of the formation

of system stationary states at a relative compression  $\varepsilon_{ii}^e = -0,1 \%$  demonstrates the possible scenarios and modes of the fragmentation processes of polycrystalline structure. The phase diagram was constructed. It shows the domains of the formation of the various types of limiting (stationary) structures, which depend on the both noise intensity and elastic strain. It was established that with increase of both the intensity of fluctuations and the values of elastic strains, the size of grains in limiting structures decreases. Conditions of simultaneous existence of two limiting (stationary) structures, which correspond to the mode of the formation of phases with different grain sizes, were found. The distribution of the realization of GBs density, which allows to estimate quantitatively the composition of grain structure over the volume of metal sample, was built. Thus, the limiting structure is determined by a mixture of grains of different sizes, subject to the simultaneous formation of two stationary states or phases. The bulk of SMC grains with sizes up to 285 nm is 15%, while the NC grains with sizes within  $d \sim 125 - 66$  nm is 60% of the volume in metal sample.

Using the Ito and Stratonovich calculus systems, the time dependences of the GBs density were constructed. These dependences take into account the fluctuations of the basic parameters and demonstrate the process of dynamic reorganization of the crystalline structure of the metal or alloy during the SPD. It was found out that a system can perform dynamic transitions between states or phases of material at sufficient fluctuation intensity of a stochastic source. These states correspond to the implementation of limiting structure with different grain sizes, which cannot be achieved by considering the deterministic approach. It is shown that in the case of the existence of a single stationary state, the NC structure with grain sizes near the established average value  $d \sim 76$  nm is formed in a metal sample. Random transitions between two stationary states allow to form a fragmented structure determined by crystallites sizes  $d \sim 714$  nm and  $d \sim 83$  nm.

For the first time, an analysis of the time dependences of GBs density was carried out by using a fast Fourier transform. Fluctuations are detected with the spectral power density of the signal, which demonstrates the realization of color noise. It shows the presence of correlated fluctuations in the system. It was found that the

behavior of the spectrum is related to the course of the prehistory of nonequilibrium process of metals fragmentation during SPD. Research of autocorrelation function of random fluctuations of GBs density allowed to determine the form of the correlation function and to reveal the frequency characteristics of fragmentation process. The obtained results reflect the real conditions of processing by SPD and can be used for predicting the grain sizes or system states (phases) in metallic structure during a certain correlation time  $\tau$ . Moreover, it is possible to establish the necessary processing conditions to achieve the desired result (stable limiting structure with SMC or NC grain sizes).

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

### **The publication list of the applicant of PhD thesis**

#### **1. The scientific works containing the main published scientific results**

1. Khomenko A. V. Modelling of Kinetics of Modes of a Fragmentation of Materials at a Severe Plastic Deformation / A. V. Khomenko, **D. S. Troshchenko**, L. S. Metlov // *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.* – 2017. – Vol. 39, № 2. – P. 265–284 (in Russian).

2. Khomenko A. V. Phase dynamics of metal fragmentation during megaplastic (severe) deformation / A. V. Khomenko, **D. S. Troshchenko**, L. S. Metlov // *Deformatsiya i Razrusheniye materialov.* – 2017. – № 8. – P. 2–10 (in Russian).

3. Features of the Phase Kinetics of Metals' Fragmentation at the Severe Plastic Deformation / A. V. Khomenko, **D. S. Troshchenko**, L. S. Metlov, P. E. Trofymenko // *Nanosistemi, Nanomateriali, Nanotehnologii.* – 2017. – Vol. 15, № 2. – P. 203–220 (in Russian).

4. 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 // *J. Nano- Electron. Phys.* – 2017. – Vol. 9, № 3. – P. 03045 (8 pp) (in Ukrainian).

5. Khomenko A. V. Thermodynamics and kinetics of solids fragmentation at

severe plastic deformation / A. V. Khomenko, **D. S. Troshchenko**, L. S. Metlov // *Condens. Matter Phys.* – 2015. – Vol. 18, № 3. – P. 33004 (14 pp).

6. The External Periodic Influence Effect on the Kinetics of Metals Fragmentation during the Severe Plastic Deformation / A. V. Khomenko, **D. S. Troshchenko**, D. V. Boyko, M. V. Zaharov // *J. Nano- Electron. Phys.* – 2015. – Vol. 7, № 1. – P. 01039 (11 pp) (in Russian).

## 2. The scientific works of an approbatory character

7. 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).

8. 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).

9. **Troshchenko D. S** Influence of External Periodic Force on the Phase Diagram of Fragmentation Regimes of Metals under Severe Plastic Deformation / D. S. Troshchenko, A. V. Khomenko // *Proceedings of XVII International Symposium “Methods of discrete features in mathematical physics”*, (Kharkov-Sumy, 8–13 June 2015). – Kharkov, 2015. – P. 245–248 (in Ukrainian).

10. 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).

11. **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 5<sup>th</sup> International Research and Practice Conference “Nanotechnology and Nanomaterials” “NANO-2017”*, (23 – 26 August 2017). –

Chernivtsi, 2017. – P. 534.

12. 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 8<sup>th</sup> International Conference for Professionals and Young Scientists “Low temperature physics-2017”, (29 May – 2 June 2017). – Kharkov, 2017. – P. 198.

13. **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 4<sup>th</sup> International Conference “Nanotechnologie” “Nano-2016”, (Tbilisi, Georgia, 24–27 October 2016). – Tbilisi, 2016. – P. 208.

14. 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 7<sup>th</sup> International Conference for Young Scientists “Low Temperature Physics-2016”, (Kharkov, 6–10 June 2016). – Kharkov, 2016. – P. 117.

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 6<sup>th</sup> International Conference for Young Scientists “Low Temperature Physics-2015” (Kharkov, 1–5 June 2015). – Kharkov, 2015. – P. 117.

16. Khomenko A. V. Thermodynamics and kinetics of solids fragmentation at severe plastic deformation / A. V. Khomenko, **D. S. Troshchenko**, K. P. Khomenko // Materials of the International Conference of Young Scientists and Postgraduate Students “IEP-2015”, (Uzhhorod, 18–25 May 2015). – Uzhhorod, 2015. – P. 213 (in Russian).

17. Khomenko A. V. Modeling of external periodic effects on phase diagram and kinetics of metal fragmentation at severe plastic deformation / A. V. Khomenko, **D. S. Troshchenko**, M. A. Khomenko // Collection of Abstracts Of International Conference of Students and Young Researchers in Theoretical and Experimental



Physics “Heureka-2015”, (Lviv, 13–15 May 2015). – Lviv, 2015. – P. F8 (in Ukrainian).

18. 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 5<sup>th</sup> International Conference for Young Scientists “Low Temperature Physics-2014”, (Kharkov, 2–6 June 2014). – Kharkov, 2014. – P. 135.

19. Khomenko A. V. Noise effect on the phase diagram of fragmentation modes at severe plastic deformation / A. V. Khomenko, **D. S. Troshchenko**, L. S. Metlov // Collection of Abstracts Of International Conference of Students and Young Researchers in Theoretical and Experimental Physics “Heureka-2014”, (Lviv, 15–17 May 2014). – Lviv, 2014. – P. 27 (in Ukrainian).

**3. The works which additionally reflect scientific results** 20. Effect of noise on the fragmentation modes of materials under severe plastic deformation / A. V. Khomenko, **D. S. Troshchenko**, I. O. Solonar, K. V. Vasyukhno // Proceedings and Program of Scientific and Technical Conference “Computer Science, Mathematics, Automation-2018”, (Sumy, 5–9 February 2018). – Sumy, 2018. – P. 182 (in Russian).

21. Stability diagram of metals fragmentation during severe plastic deformation / A. V. Khomenko, **D. S. Troshchenko**, M. A. Khomenko, I. O. Solonar // Collection of Abstracts Of International Conference of Students and Young Researchers in Theoretical and Experimental Physics “Heureka-2017”, (Lviv, 16–18 May 2017). – Lviv, 2017. – P. C1 (in Ukrainian).

22. Khomenko A. V. Two-level and two-mode kinetics of metal fragmentation at severe plastic deformation / A. V. Khomenko, **D. S. Troshchenko**, I. O. Solonar // Proceedings and Program of Scientific and Technical Conference “Computer Science, Mathematics, Automation-2017”, (Sumy, 17–21 April 2017). – Sumy, 2017. – P. 176 (in Russian).

## ЗМІСТ

ПЕРЕЛІК УМОВНИХ СКОРОЧЕНЬ .....	21
ВСТУП .....	22
1. НАНОСТРУКТУРНІ МАТЕРІАЛИ: ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНІ ДОСЛІДЖЕННЯ ТА ТЕОРЕТИЧНІ ПІДХОДИ ДО ОПИСУ (ЛІТЕРАТУРНИЙ ОГЛЯД) .....	30
1.1. Методи отримання наноструктурних матеріалів .....	30
1.1.1. Процеси та методи ІПД .....	31
1.1.1.1. Основні схеми та особливості оброблення методами ІПД .	33
1.1.2. Експериментальні дослідження дефектної мікроструктури при ІПД .....	35
1.2. Моделювання ІПД. Теоретичні методи представлення процесу фрагментації твердих тіл .....	38
1.2.1. Теорія фрагментації дислокаційних структур Г. О. Малигіна .	38
1.2.2. Теорія диспергування у процесі ІПД В. І. Копилова та В. М. Чувільдєєва .....	39
1.2.3. Інженерна теорія Я.Ю. Бейгельзімера .....	41
1.3. Підхід нерівноважної еволюційної термодинаміки опису процесу фрагментації дефектної структури твердих тіл (модель Л. С. Метлова) .....	43
1.3.1. Феноменологічні основи НЕТ .....	43
1.3.2. Зв'язок НЕТ і теорії фазових переходів Ландау .....	48
1.3.3. Система еволюційних рівнянь у термінах внутрішньої енергії .	50
1.3.3.1. Двомодова дворівнева модель ІПД .....	51
Висновки до розділу 1 .....	53

2.	ФЕНОМЕНОЛОГІЧНА МОДЕЛЬ ФРАГМЕНТАЦІЇ МЕТАЛІВ ЧИ СПЛАВІВ ПРИ ІПД .....	55
2.1.	Основні співвідношення в термінах внутрішньої енергії.....	56
2.2.	Фазова діаграма режимів фрагментації.....	63
2.3.	Кінетика дводефектної підструктури в ході ІПД.....	78
	Висновки до розділу 2.....	89
3.	ФАЗОВА КІНЕТИКА ПРОЦЕСУ ФРАГМЕНТАЦІЇ МЕТАЛІВ ЧИ СПЛАВІВ ПРИ ІПД .....	91
3.1.	Особливості встановлення стаціонарних значень густини дефектів .....	92
3.2.	Аналіз стійкості фазової кінетики дводефектної системи .....	96
3.2.1.	Фазові портрети та визначення особливих точок системи . . .	96
3.2.2.	Визначення показників Ляпунова . . . . .	99
3.2.3.	Діаграма стійкості стаціонарних структур . . . . .	102
3.3.	Вплив часу релаксації на кінетику дводефектної системи.....	109
	Висновки до розділу 3.....	119
4.	ВПЛИВ АДИТИВНОГО ГАУСІВСЬКОГО ШУМУ НА ПРОЦЕС ФРАГМЕНТАЦІЇ МЕТАЛІВ ЧИ СПЛАВІВ ПРИ ІПД .....	122
4.1.	Ефективний потенціал.....	123
4.2.	Вплив адитивного шуму.....	125
4.3.	Часові залежності густин МЗ.....	142
	Висновки до розділу 4.....	158
	ОСНОВНІ ВИСНОВКИ.....	161

СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ.....163

Додаток А ..... 183

Додаток Б ..... 184

Додаток В ..... 186

## ПЕРЕЛІК УМОВНИХ СКОРОЧЕНЬ

АКФ – автокореляційна функція

ГЕ – гвинтова екструзія

ЗДР – звичайне диференціальне рівняння

ІПД – інтенсивна пластична деформація

ІПДК – інтенсивна пластична деформація крученням

КЗПК – крупнозернистий полікристал, крупнозернистий полікристалний(а)

МЗ – межа зерна

НЕТ – нерівноважна еволюційна термодинаміка

НК – нанокристал, нанокристалічний(а)

ПП – параметр порядку

РККП – рівноканальне кутове пресування

СМК – субмікростристал

СФП – структурно-фазовий перехід (перетворення)

ФД – фазова діаграма

ФП1 – фазовий перехід першого роду

ФП2 – фазовий перехід другого роду

## ВСТУП

**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 [1–13]. 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 [2–5].

Фізичні процеси, що відбуваються у твердих тілах під час ІПД, з одного боку, є досить складними, а з іншого – універсальними [14, 15]. 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 [16–22], 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 металевої 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 [7, 23–31], 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 [32, 33, 41], 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. Результати роботи отримано під час виконання держбюджетних 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.); “Моделювання просторово неоднорідних явищ межового тертя в кінетичному і статичному режимах”, за підтримки ДФФД у рамках гранта Президента України (№ 0115U004662, 2015 рр.); “Фізичні вла-

стивості двовимірних наноматеріалів та металевих наночастинок”, за підтримки МОН (№ 0117U003923, 2017–2019 рр.); “Термодинамічна теорія фазових переходів між структурними станами межового мастила із урахуванням просторової неоднорідності”, за підтримки МОН (№ 0116U006818, 2016–2018 рр.).

**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 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 некорельованого 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 ІПД, та порівняти одержані результати з експериментальними даними.

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



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

*Методи дослідження.* У дисертаційній роботі проведено вивчення фрагментації металів у процесі ІПД на основі теорій фазових переходів Ландау, пружності та положень класичної нерівноважної термодинаміки. Відповідно до поставлених завдань використано відомі методи математичної фізики та числового моделювання [42]. 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 [43]. 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 [44, 45].

### **Наукова новизна одержаних результатів:**

1. Удосконалено підхід НЕТ, що дозволяє одержати більш повне уявлення про перебіг процесу фрагментації металів чи сплавів під час ІПД. 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 під-

систем 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 ІПД 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 ІПД 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 отриманих результатів.** Оскільки розвинений підхід описує та пояснює більшість експериментальних ефектів, що спостерігаються під час ІПД, 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 дефек-

тів, 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 ІПД 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. У статті [46] дисертант брала безпосередню участь у вивченні літературних джерел, одержанні базових співвідношень, числовому розв'язанні системи диференціальних рівнянь та в обговоренні одержаних результатів. У працях [47, 48] дисертант дослідила межі втрати стійкості дводефектної моделі та побудувала фазову діаграму режимів фрагментації металів чи сплавів при ІПД. У статті [49] здобувач провела моделювання кінетики процесу фрагментації металів чи сплавів під час ІПД, визначила умови формування граничних (стаціонарних) структур різних типів і встановила вплив взаємодії структурних дефектів на кінетику процесу. У праці [50] автор дисертації вико-

нала якісне дослідження фазової кінетики процесу фрагментації при ІПД, одержала узагальнений аналітичний вираз для показників Ляпунова та побудувала діаграму стійкості стаціонарних структур. У статті [51] дисертант продовжила дослідження фазової кінетики дводефектної системи та встановила вплив часу релаксації на формування універсальної поведінки в процесі фрагментації. У публікаціях [53, 54] автор дисертації модифікувала базовий ефективний потенціал для густини внутрішньої енергії та врахувала вплив адитивних некорельованих шумів основних параметрів на процес фрагментації металів при ІПД. 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 ІПД. У працях [55, 56] дисертант отримала основні аналітичні вирази, що визначають процес формування дефектних структур при ІПД, 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 [57–68]. Усі наукові положення і висновки, винесені на захист, належать автору дисертації.

**Апробація результатів дисертації.** Основні наукові результати дисертаційної роботи викладено в доповідях та обговорено на наступних конференціях і семінарах: 4<sup>th</sup>, 6<sup>th</sup>, 7<sup>th</sup> International Conference Nanomaterials: Applications and Properties (Львів, 2014, 2016 pp.; Затока, 2017 p.); 5<sup>th</sup> International research and practice conference “Nanotechnology and nanomaterials” NANO-2017 (Chernivtsi, 2017); 4<sup>th</sup> International conference “Nanotechnologie” Nano–2016 (Tbilisi, Georgia, 2016); 5<sup>th</sup>, 6<sup>th</sup>, 7<sup>th</sup>, 8<sup>th</sup> 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 рр.).

**Публікації.** Основні результати дисертаційної роботи опубліковані у 22 наукових працях [46–51, 53–68]:

6 статей у виданнях, що індексуються наукометричними базами Scopus та/або Web of Science [46, 47, 49–51, 53], з яких 5 – у провідних фахових журналах [46, 47, 49, 51, 53]; 4 статті у матеріалах Міжнародних наукових конференцій [48, 54–56], 2 з яких [48, 54] у виданнях, що індексуються наукометричними базами Scopus та Web of Science; 12 тез доповідей конференцій [57–68].

**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 рисунків, зокрема 3 рисунки на окремих аркушах, і 5 таблиць. Список використаних джерел складається із 178 найменувань, розміщених на 19 сторінках.

## РОЗДІЛ 1

# НАНОСТРУКТУРНІ МАТЕРІАЛИ: ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНІ ДОСЛІДЖЕННЯ ТА ТЕОРЕТИЧНІ ПІДХОДИ ДО ОПИСУ (ЛІТЕРАТУРНИЙ ОГЛЯД)

### 1.1. Методи отримання наноструктурних матеріалів

Останнім часом велику кількість науково-дослідних робіт у промислово-розвинених країнах присвячено дослідженню та технологіям отримання ультрадрібнозернистих та наноструктурних матеріалів. Це обумовлено розвитком сучасного технологічного процесу: збільшенням силових та термічних навантажень, наявністю різноманітних та агресивних середовищ експлуатації, високою собівартістю виготовлення. Таким чином, виникла потреба у покращенні фізико-хімічних властивостей матеріалів, зокрема у збільшенні строку експлуатації новітніх конструкцій та їхніх деталей [2–5].

Можна виділити два відомі механізми формування наноструктурних матеріалів, що відрізняються використанням технологій збірки (виготовлення) чи отриманням, із застосуванням різних методик оброблення. За допомогою першого методу при розкладанні, осадженні чи синтезі речовини отримуються різноманітні наночастинки (твердотільні нанокластери, нанопроволоки, нанотрубки), плівки та покриття, нанорозмірні порошки та компактовані з них матеріали, у тому числі нанокомпозити, утворені шляхом уведення наночастинок до різних матриць. Другий метод полягає у тому, що процес наноструктурування відбувається у результаті сильного впливу на отримані іншими методами мікроструктурні матеріали – відпалення аморфних сплавів, ІПД вихідної металеві структури, механохімічний синтез і т.д. [3]. У цьому випадку має місце формування композиційних матеріалів, що містять різні аморфні та кристалічні нанофази.

Прийнято вважати, що найголовнішим структурним фактором будь-якого матеріалу є розмір зерен, оскільки він охоплює майже всі аспекти фізичної та механічної поведінки полікристалічних матеріалів, а також їх хімічну реакцію на

навколишнє середовище [4]. Керування розмірами зерен вже довгий час вважається основним способом виготовлення матеріалів з бажаними властивостями, що мають достатню міцність, твердість, тріщиностійкість, пружність, пластичність, в'язкість, зносостійкість і т.д. Разом із тим відомо, що більшість із згаданих властивостей сильно залежать від зменшення розміру зерен у структурі матеріалу [3, 4]. Таким чином, постійно триває розробка та удосконалення технологій виготовлення та оброблення матеріалів, що дозволяють покращити якість продукції. У ряді випадків постають проблеми, що пов'язані з усуненням залишкової пористості під час компактування, з введенням домішок під час їх консолідації, а також зі збільшенням розмірів отриманих зразків та практичним використанням даних методів.

Більшість із зазначених проблем вирішуються завдяки застосуванню методів ІПД. Використовуючи ці методи, вдалося одержати об'ємні наноструктурні зразки та заготовки для найрізноманітніших металів і сплавів, включаючи промислові сплави та інтерметаліди [2–5]. В останні роки методи ІПД також використовуються для оброблення деяких композиційних матеріалів і навіть напівпровідників. Крім того, методи ІПД успішно застосовуються для компактування порошків, в тому числі ультрадисперсних [3, 10].

### **1.1.1. Процеси та методи ІПД**

Застосування методів ІПД є ефективним способом отримання об'ємних (макроскопічних) металевих зразків з практично безпористою СМК чи НК структурою, які неможливо одержати шляхом звичайного термомеханічного оброблення [2–5, 69]. В умовах прикладення великих напружень, при відносно низьких температурах, відбувається подрібнення мікроструктури зразка до субмікро- (100 – 1000 нм) або нанорозмірів ( $< 100$  нм) з висококутовою розорієнтацією кристалічних решіток сусідніх зерен (до  $20^\circ$ ). Отримані матеріали придатні до механічних випробувань та мають, як правило, високі фізичні та механічні властивості.

У цілому, для отримання наноструктур в об'ємних зразках та заготовках, методи ІПД повинні задовольняти наступним вимогам [3–5]: 1) забезпечувати можливість отримання ультрадрібнозернистих структур, що мають переважно висококутові МЗ, оскільки саме в цьому випадку відбувається якісна зміна властивостей матеріалів; 2) забезпечувати можливість формування однорідних наноструктур по всьому об'єму, що є необхідною умовою виникнення стабільних властивостей матеріалів; 3) незважаючи на інтенсивну деформацію, зразки не повинні мати механічних пошкоджень чи руйнувань.

Досягнення великих пластичних деформацій у зразку є технічно складним завданням. Оскільки процес потребує значних затрат для конструкції установки, яка з одного боку, повинна бути досить міцною, щоб витримувати повторювані високі навантаження під час формування матеріалу, а з іншого боку, забезпечувати оброблення матеріалів без руйнування [4].

Як зазначалося раніше, відмінною рисою оброблення ІПД є застосування великих навантажень, що не викликають суттєвих змін у розмірі зразка. Це досягається за рахунок спеціальних геометричних інструментів, що запобігають вільному потоку матеріалу і тим самим створюють значний гідростатичний тиск. Наявність цього гідростатичного тиску є ключовим аспектом для досягнення великих деформацій, які необхідні виключно для подрібнення зернистої структури. У даний час існує безліч варіантів методів ІПД: кручення під високим тиском (чи ІПДК) [3, 10, 13, 69–73], РККП [11, 28, 69, 74, 75], прокатка [76], багаторазовий вигин [23] і випрямлення смуги [3], всебічне кування [12, 77], ГЕ [5, 8] і т.д. В основі цих методів лежить багаторазова інтенсивна пластична деформація зсуву (як результат виникнення високого гідростатичного тиску), що дозволяє отримати різноманітні ультрадисперсні матеріали з бажаними високими фізико-механічними властивостями.

Далі розглянемо основні методи одержання об'ємних наноструктурних матеріалів, їхні схеми та принципові особливості.



### 1.1.1.1. Основні схеми та особливості оброблення методами ІПД

**Рівноканальне кутове пресування.** Сьогодні цей метод є найбільш високорозвиненою технологією оброблення (див. схему на рис. 1.1а), оскільки дозволяє отримати об'ємні наноструктурні заготовки з різноманітних металевих матеріалів [3–5, 69]. Метод РККП здійснює деформацію масивних зразків за допомогою принципу простого зсуву під час продавлення заготовки через два канали, що мають однакові поперечні перерізи та перетинаються зазвичай під прямим кутом ( $90^\circ$ ). Особливість цього методу полягає в тому, що розміри поперечного перерізу заготовки до і після оброблення залишаються незмінними, що дозволяє проводити повторне пресування та призвести до накопичення дуже великих деформацій.

Зазначимо, що основні переваги та концепцію методу РККП, включаючи механіку екструзії, виведення оптимальних умов процесу, що передбачають баланс між процесом тертя, геометрією інструмента, шляхом деформації та ефективністю фрагментації зерна, були сформульовані В. Сегалом у серії ранніх публікацій [28, 74, 75], які в подальшому були розвинені іншими дослідниками [2].

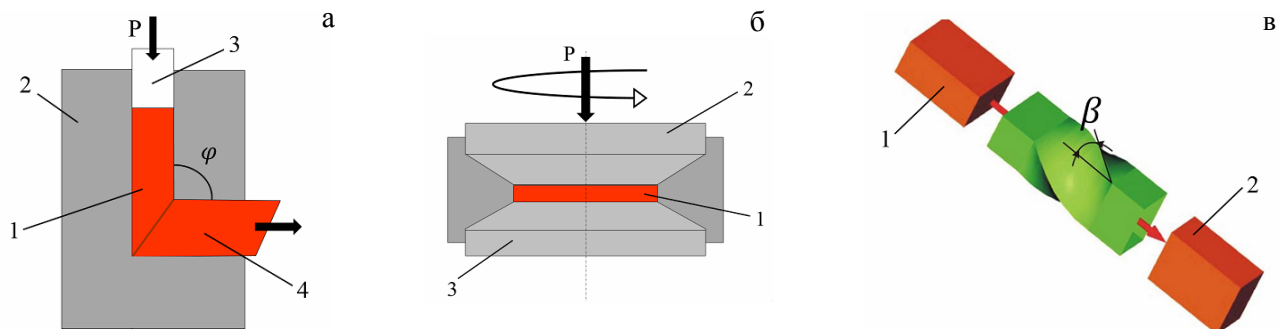


Рис. 1.1. Принципові схеми методів ІПД: а – РККП: 1– зразок; 2 – оснащення; 3 – пуансон; 4 – в'язкопластичне середовище [3]; б – кручення під високим тиском: 1– зразок; 2 – пуансон; 3 – оснащення [4, 5]; в – процес ГЕ: 1, 2 – зразок відповідно до і після оброблення [8]

**Кручення під високим тиском.** Принципова схема ІПДК зображена на рис. 1.1б. Цей метод базується на концепції наковальні Бріджмена [77], що полягає у реалізації взаємного повороту площин кристалічної структури зразка на кути від десятків градусів до декількох оборотів при застосуванні нормального тиску в 10–15 ГПа. Таким чином, метод є результатом комбінації високого тиску

(діапазон ГПа) з обертальним напруженням. Сьогодні ця методика оцінюється багатьма дослідниками як така, що дозволяє найбільш ефективно подрібнити зерно [4].

При застосуванні ІПДК під високим тиском (кілька ГПа) в умовах гідростатичного стиснення, згідно з наведеною схемою на рис. 1.1б, одержані зразки мають форму дисків діаметром від 10 до 20 мм та товщиною 0,2 – 0,5 мм. Зразок розміщується між бойками та стискається під прикладеним тиском ( $P$ ) в декілька ГПа. За рахунок обертання бойки виникають сили поверхневого тертя, що викликають зсувні деформації. Разом із тим геометрична форма зразків така, що основний об'єм матеріалу деформується в умовах гідростатичного стиснення під дією прикладеного тиску та тиску, що виникає з боку зовнішніх шарів зразка. Для створення однорідної наноструктури зазвичай потрібна деформація в декілька оборотів. Такі умови деформування дозволяють реалізувати дуже високий ступінь деформації без руйнування матеріалу [3, 69]. У зв'язку з обмеженням розміру зразків, які одержано за допомогою ІПДК під високим тиском, вони використовуються в основному для дослідницьких цілей.

**Гвинтова екструзія.** Цей метод є ще одним варіантом простого процесу деформації зсуву, який було запропоновано Я. Бейгельзімером [5, 8]. Особливість методу ГЕ полягає у поєднанні процесів екструзії і ІПДК. Разом із тим заготовка продавлюється через оснащення, що має гвинтову лінію осі каналу (рис. 1.1в). Тобто зразок під час оброблення проходить через матрицю “скручування”. Незважаючи на те, що перевагою цього методу є висока пропускна здатність, він страждає від практично такої ж загальної проблеми, як і метод ІПДК під високим тиском: деформація, що виникає у структурі матеріалу, – неоднорідна та має найменше значення вздовж осі екструзії. Дослідження Д. Орлова та співавторів [78] показали, що для отримання ультрадрібнозернистої структури метод ГЕ є менш ефективним у порівнянні з РККП та ІПДК.

### 1.1.2. Експериментальні дослідження дефектної мікроструктури при ІПД

У даний час існує велика кількість експериментальних напрацювань, що спрямовані на дослідження закономірностей отримання НК структур в різних металах і сплавах у процесі ІПД. Зокрема, виявлено, що для різних груп металів існує деякий граничний мінімальний розмір зерен. Подальша фрагментація нижче цього значення є неможливою [3, 10–12]. Так, у випадку відносно пластичних та малозміцнених металів і сплавів (таких як: Al, Cu, Ni, Fe і ін.), застосування методу РККП не дозволяє сформувати ультрадисперсну зернисту структуру з розмірами дрібніше за 0,3 – 1 мкм [3, 11]. Навіть найсильніші застосування деформацій зсуву під високим тиском не дають можливості отримати структуру з розмірами кристалітів, дрібнішими за 50 – 200 нм [3, 10, 13].

Проте останні дослідження показують, що кристалічна решітка таких субмікронних зерен, у свою чергу, має специфічну будову. У результаті великих пружних спотворень кристаліти фрагментуються на області когерентного розсіювання, які за рентгенівським даними мають значно менші розміри ( $\ll 100$  нм) [3, 10, 70, 71]. Крім того, існує ряд матеріалів, у яких застосування методів ІПД дозволяє одержати граничний мінімальний розмір зерен, що складає 10 – 30 нм [3, 11]. В основному, такими матеріалами є різноманітні інтерметалідні з'єднання, сплави метал-металоїд, напівпровідникові матеріали, сплави з взаємно нерозчинними елементами. Формування НК структури може бути пов'язане з низькою рухливістю дислокацій та точкових дефектів у цих металах.

Останнім часом особливий розвиток отримали дослідження, в основі яких лежить ефективно застосування ІПДК при консолідації порошків, що дозволяють одержати об'ємні наноструктурні зразки з високою густиною дефектів [3, 10]. Наприклад, дослідження ІПДК порошкової міді продемонструвало формування рівноважної НК структури з середнім розміром зерен 100 нм та густиною дислокацій  $2 \cdot 10^{15} \text{ м}^{-2}$  [10]. У роботі показано, що застосування попереднього компактування під тиском 0,35 ГПа при кімнатній температурі призвело до

отримання зразків у вигляді предкомпактів, що мають досить велику об'ємну долю пор 0,64 (рис. 1.2а). Підвищення тиску попереднього компактування до 1,95 ГПа дозволило знизити пористість до величини 0,24 (рис. 1.2б). Разом із тим середній розмір порошинок у предкомпактах склав 37 мкм. У той же час виявлено, що застосування ІПДК для консолідації порошків при температурі 150° С призвело до підвищення середнього розміру зерен до 167 нм (рис. 1.2в). Таким чином, основну увагу роботи [10] спрямовано на дослідження механізмів, закономірностей та умов росту зерен у НК міді під час оброблення ІПДК.

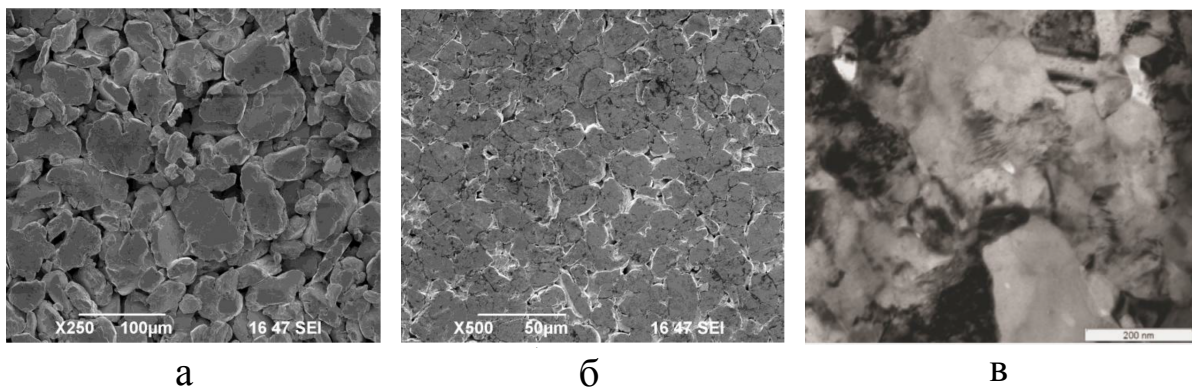


Рис. 1.2. Світлопільне зображення: а, б – мікронних порошків міді підданих криогенному помолу і компактуванню під тиском 0,35 ГПа та 1,95 ГПа; в – структура після ІПДК при температурі 150° С, що ілюструє середній розмір зерен 167 нм [10]

Відомо, що тверді і тугоплавкі матеріали краще піддаються наноструктуруванню, однак, як правило, в умовах дії високого тиску зі зсувом. Найчастіше у сплавах розмір зерен в умовах ІПД може бути значно меншим [3, 11, 13], ніж у чистих металах, що пояснюється гальмуванням процесів рекристалізації за рахунок виникнення вторинних фаз (атомів домішок). У роботі А.А. Мазилкіна та інш. [79] досліджувалася структура та фазовий склад сплавів Al-Zn, Al-Mg і Al-Mg-Zn в стані до і після ІПДК. Разом із тим електронно-мікроскопічний аналіз свідчить, що в результаті деформації зерен структура сплавів зазнала значного подрібнення. На рис. 1.3 представлено структури трьох сплавів Al – 10% Zn, Al-Mg і Al-Zn-Mg після деформації при  $N = 5$  (кількість оборотів). У структурі сплаву Al – 10% Zn присутні зерна двох фаз: (Al) з розміром 600 нм (до деформації – 500 мкм) і (Zn) з розміром 200 нм (до деформації – 3–5 мкм). Структура

сплаву визначається низькою для такої великої деформації густиною дислокацій:  $10^{12} \text{ м}^{-2}$ . Середній розмір зерна у сплавах Al-Mg становить 150 і 90 нм для 5 і 10% Mg; для сплавів Al – 5% Zn – 2% Mg і Al – 10% Zn – 4% Mg величина зерна дорівнює відповідно 150 і 120 нм (до деформації – 500 мкм). Структура сплавів характеризується високою густиною дислокацій ( $> 10^{14} \text{ м}^{-2}$ ) [79]. Таким чином, робота демонструє, що ІПДК призвела до формування фазового стану, що у порівнянні з недеформованим станом є ближчим до термодинамічно рівноважного.

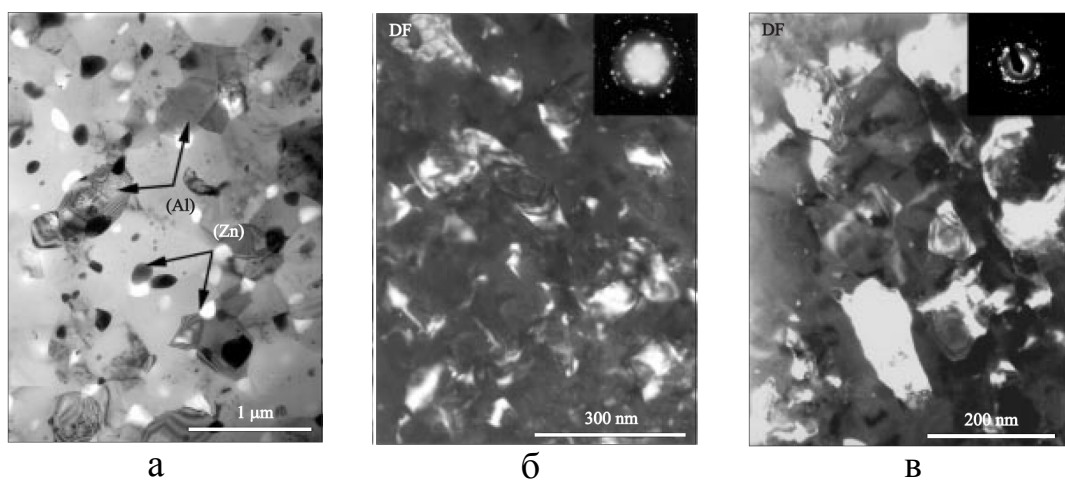


Рис. 1.3. Мікроструктура сплавів: а – Al-10% Zn після ІПД, стрілками показано зерна (Al) та (Zn); б – Al-5% Mg; в – Al-2% Mg-5% Zn [79]

Важливими факторами, що визначають формування субмікро- чи нанозерен під час ІПД, є умови деформування: швидкість, температура, прикладений тиск, кількість проходів. Одержані розміри зерен є граничними лише для певного набору параметрів. Існує безліч досліджень, що вивчають структурні перетворення та властивості металів у процесі ІПД, проте дуже часто зустрічається проблема формування нестабільних конфігурацій чи прояву аномальних ефектів у властивостях матеріалу, що виникають за рахунок зміни температури чи інтенсивності оброблення (величини прикладеного тиску та зсуву під тиском) [16–19, 21, 22]. У даний час питання підбору оптимального температурно-силового режиму оброблення для матеріалів різних класів, що забезпечує найбільш сприятливі умови для формування рівноважних СМК чи НК структур з рівномірним розподі-

лом розмірів зерен та високими фізико-механічними властивостями, залишається відкритим.

## **1.2. Моделювання ІПД. Теоретичні методи представлення процесу фрагментації твердих тіл**

Фізичні процеси, що відбуваються у твердих тілах під час ІПД мають свої специфічні особливості та пов'язані з наявністю в їх структурі порушень у вигляді цілої ієрархії структурних дефектів [3–5, 69]. Більшість експериментальних досліджень зводяться до вивчення кінцевих (граничних) структур і відповідних властивостей матеріалів, без аналізу разом із тим природи фізичних процесів, що протікають під час їх утворення. Крім того, отримана інформація на жаль має неоднозначний характер, оскільки у багатьох експериментах спостерігається формування, як правило, різних структурних станів із розмірами зерен порядку 100 нм при однакових умовах оброблення та для одних і тих же матеріалів. Таким чином, розвиток теоретичних моделей, що дозволяють описати формування граничної структури, набуває вагомого значення.

Наразі відомо декілька теоретичних методів опису процесу ІПД. Відмітимо, що у роботі [32] представлено детальний огляд існуючих методів, наведемо найбільш розповсюджені з них.

### **1.2.1. Теорія фрагментації дислокаційних структур Г. О. Малигіна**

Теорія фрагментації дислокаційних структур Г. О. Малигіна, яка, фактично, описує формування висококутових МЗ при великих пластичних деформаціях, базується на механізмі деформування, в основу якого покладено уявлення про самоорганізацію дислокацій [23–25, 80–82]. Деформації, що виникають у процесі РККП та в умовах ударного навантаження матеріалу, призводять до генерації великої кількості геометрично необхідних дислокацій, однак поведінка останніх, після того як вони виникли, нічим не відрізняється від поведінки дислокацій, що

виникають хаотично. Автор фактично поширив ідеї, які він розвинув раніше для опису формування пористої структури [23, 24, 83], на опис формування більшого дефекту – МЗ.

В основу моделі покладено нелінійне рівняння реакційно-дифузійного типу для густини дислокацій, що включає в себе процеси розмноження, анігіляції і дифузії дислокацій з урахуванням сильного поглинання дислокацій межами нанозерен [25, 80–82].

Таким чином, теорія описує процес розмноження, анігіляції та дифузії дислокацій під впливом оброблення з урахуванням кінетичних особливостей НК матеріалів, а саме сильного поглинання дислокацій межами нанозерен. Однак, викладена теорія дещо порушує ієрархічну послідовність подій, оскільки було б більш логічно уявити формування МЗ у результаті самоорганізації пористих структур, а не елементарних дислокацій. На 4-й і 5-й стадії зміцнення матеріалу [84, 85] знову сформована структура повинна перетинати кілька елементарних дислокаційних осередків, зберігши разом із тим деяку цілісність. Можна вважати, що дислокаціям більш вигідно покинути об'єм дислокаційної комірки чи зерен та “осісти” на їхніх межах. Саме останнє має здатність підвищити рівень надлишкової енергії (нерівноважності) та призвести у результаті до формування нової межі, що відбувається завдяки процесу релаксації надлишкової енергії меж.

### **1.2.2. Теорія диспергування у процесі ІПД В. І. Копилова та В. М. Чувільдєєва**

Теорія диспергування матеріалу у процесі ІПД В. І. Копилова та В. М. Чувільдєєва [26–29, 86] базується на конкретному механізмі деформування, в основу якого покладено уявлення про міжзеренні прослизання і аномально високу дифузю на МЗ. Крім того, в основу теорії покладено уявлення про вільний об'єм, що запозичено із теорії аморфних матеріалів.

Відповідно до підходу вважається, що вільний об'єм межі при абсолютному нулі температури – геометрично необхідний вільний об'єм, що задає вихідний

(нульовий) рівень нерівноважності межі [26, 28, 29, 86]. Однак носіями вільного об'єму є і інші дефекти кристалічної решітки: вакансії та дислокації. Поглинання цих дефектів межею за визначених умов призводить до перерозподілу вільного об'єму дефектів і збільшення вільного об'єму межі. Межа, що визначається надлишковим (по відношенню до геометрично необхідного) вільним об'ємом, який утворився за рахунок поглинання інших дефектів, може бути названа нерівноважною. Мірою нерівноважності у цьому випадку виступає величина надлишкового вільного об'єму.

У запропонованій феноменологічній моделі враховуються три типи дефектів: граничні дислокації, дислокації орієнтаційної невідповідності та відповідно МЗ. Таким чином, опис процесу деформації, повернення та рекристалізації матеріалів полягає у розв'язанні системи рівнянь, що відображають кінетику накопичення вказаних дефектів на МЗ [26–29, 86].

На думку В. М. Чувільдєєва, запропонована теорія є ефективною для матеріалознавства, оскільки визначає можливість знаходити підходи до вирішення різноманітних практичних завдань. Проте цей підхід, з нашої точки зору, має де-що суперечливу природу. Так, у експериментальних роботах В. О. Хоніка [87–89] поставлено під серйозний сумнів той факт, що вільний об'єм можна використовувати в якості визначального термодинамічного параметра для опису аморфних сплавів, принаймні, в тому класичному трактуванні, яке прийняте в переважній більшості робіт. Дійсно, надлишковий об'єм визначає міру збільшення середньої відстані між атомами, що призводить до зростання середньої потенціальної енергії цих атомів, які розійшлися на відстань, більшу рівноважної. Однак у твердому тілі збільшення відстані між одними атомами в силу замкнутості силових ліній неминуче призводить до зменшення відстаней між іншими атомами (локальне стиснення). Причому, оскільки зміна потенціальної енергії відштовхування атомів має значно більш різкий характер, ніж потенціальна енергія слабкого Ван-дер-Ваальсівського притягання, то при меншій зміні об'єму за рахунок стиснення, потенціальна енергія, що збережена у цій області, може значно перевищувати потенціальну енергію, яка накопичена в області надлишкового вільного об'єму.



Тому дуже важливо в теорії враховувати не лише надлишковий вільний об'єм, але і “спресований об'єм”, якого не вистачає, чого до теперішнього часу ніхто не робив. Крім того, в роботах А. М. Глезера [1, 15, 90] говориться, що вільний об'єм має, принаймні, двомодову структуру за розмірами. Разом з тим, аморфні матеріали, що мають більш дрібноструктурований вільний об'єм, є пластичнішими, у той час як крупноструктурований вільний об'єм – крихкішими. Очевидно, що співвідношення між вільним і спресованим об'ємом для них буде різним.

До того ж, роль власне дифузійного масоперенесення у теорії В. М. Чувільдеєва представляється перебільшеною. З нашої точки зору, під дією надлишкової енергії нерівноважної межі і, пов'язаних з нею внутрішніх напружень, мається на увазі перебудова структури матеріалу, в якому МЗ беруть активну участь. Межа істотно полегшує таку перебудову, забезпечуючи додаткові ступені свободи. Разом із тим, сам процес перебудови супроводжується масопереносом, проте він не пов'язаний безпосередньо з надлишковою концентрацією атомів.

### **1.2.3. Інженерна теорія Я.Ю. Бейгельзімера**

Відома теорія, яка базується на узагальненні експериментальних даних в області ІПД, – інженерна теорія Я.Ю. Бейгельзімера. В її основі лежать прості механічні уявлення про процес деформування [5, 7, 30, 31, 91]. Система лінійних кінетичних рівнянь конструюється на підставі узагальнення результатів і закономірностей, які спостерігаються в експериментах.

Так, у роботах [30, 31] розглядається виникнення дезорієнтованих меж у кристалах та утворення мікропор, в якості додаткового механізму релаксації внутрішньої деформації при ІПД полікристалів. Разом із тим, кінетичні рівняння одержуються з припущення про самоподібність процесу фрагментації зерна. В якості основних параметрів виступають величини, що характеризують структуру матеріалу: загальну площу меж фрагментів та загальний об'єм мікропор на одиницю об'єму матеріалу. Таким чином, запропонована модель описує основні закономірності ІПД металів, що мають високу енергію дефекту упаковки. Разом

із тим, проведений у роботах [30, 31] аналіз надає цілий ряд рекомендацій щодо підвищення ефективності процесів ІПД.

Зазначимо, що підхід Я.Ю. Бейгельзімера дозволяє описати широкий клас процесів, що спостерігаються при ІПД. Зокрема, математичне моделювання процесу ГЕ дозволило визначити умови отримання композиту типу СМК оболонка-крупнокристалічна серцевина [7]. Дослідження демонструє умови, які впливають на формування міцності матеріалу при збереженні досить великих деформацій однорідного (рівномірного) подовження. Разом з тми, у якості основи для прогнозування структури і властивостей металів під час великих деформаціях використовується описана у роботі [30] модель, яка дозволяє розрахувати такі важливі показники структури як характерний розмір зерен і мікропористість (пошкодженість) металу, що визначають його механічні характеристики.

Проте в рамках інженерного підходу Я.Ю. Бейгельзімера важко пояснити багато важливих особливостей процесу ІПД, зокрема, він не може описати формування “граничної” структури металів – мінімального середнього розміру зерен. Для того щоб описати процес фрагментації зерен в теорію “руками” вводиться деякий притягальний аттрактор, який примушує систему прямувати до стану з потрібним (заданим) розміром зерен. Крім того, не встановлений зв’язок між утворенням декількох типів дефектів, таких як МЗ та дислокація. Саме взаємодія цих дефектів описує виникнення та формування стаціонарних областей на фазовій діаграмі [32, 33, 46, 47, 49–51, 53, 92, 93].

У той же час більш логічно припустити, що досягнення граничного розміру зерна у результаті диспергування під час ІПД є спільною властивістю досягнення матеріалу стаціонарного стану і може бути досліджено у загальному вигляді незалежно від конкретного механізму деформування. У зв’язку з цим, у наступному підрозділі 1.3 викладено основи запропонованої Л. С. Метловим узагальненої теорії процесу ІПД, в основі якої лежить мезоскопічна нерівноважна термодинаміка. Формування граничної структури в рамках цієї теорії зв’язується з мінімумом або максимумом термодинамічного потенціалу і будується за аналогією з теорією фазових переходів на основі загального кінетичного рівняння

типу Ландау – Халатнікова [32, 33, 41, 92–95]. Особливість даного підходу полягає у тому, що на відміну від звичайної термодинаміки, яка є безструктурною теорією, аналогічно до мезоскопічної термодинаміки [96, 97], дефектна структура враховується шляхом явного введення відповідних доданків у базовому термодинамічному співвідношенні. Мезоскопічність моделі полягає у тому, що в якості структурних елементів середовища в такому розгляді можуть бути досить великі утворення типу зерен, МЗ, скупчення дислокацій і т.д.

### **1.3. Підхід нерівноважної еволюційної термодинаміки опису процесу фрагментації дефектної структури твердих тіл (модель Л. С. Метлова)**

#### **1.3.1. Феноменологічні основи НЕТ**

Як відомо, звичайна термодинаміка втрачає свою силу у ході розгляду дуже малих систем та об'ємів. Намагаючись встановити детальну термодинамічну рівновагу між двома нанозернами, класична термодинаміка працює все гірше з поступовим зменшенням розміру зерен. У той час як НЕТ, навпаки, не прагне встановити детальну рівновагу між кожним нанозерном, а тому працює набагато краще з переходом до більш дрібніших зерен за рахунок того, що число елементів середовища в об'ємі зростає. Таким чином, перейдемо до розгляду основних положень НЕТ.

Очевидно, що будь-яка фізична система, яка складається з великої кількості частинок, не може порушувати закон збереження енергії, навіть якщо їхня взаємодія між собою має складних характер. Непорушність цього принципу математично виражається першим законом термодинаміки

$$dU = \delta A + \delta Q, \quad (1.1)$$

де  $dU$  – приріст внутрішньої енергії деякої фізичної системи,  $\delta A$  – величина роботи зовнішніх сил,  $\delta Q$  – потік теплоти. Відомо, що повна внутрішня енергія системи може змінюватися тільки за рахунок зовнішнього впливу. Внутрішні

процеси, що протікають у системі, лише перетворюють один вид енергії в інший, але не змінюють її загальної кількості.

Такий вид співвідношення (1.1) відповідає визначенню простих систем, оскільки є лише два види обміну енергії, що враховується, із зовнішніми системами, – це механічний і тепловий обміни. У загальному вигляді взаємодія виділеної системи із зовнішнім світом може здійснюватися через радіаційні дії, електромагнітні та гравітаційні поля і т. д. Також можливі обміни масою, компонентним складом чи інформацією. Проте саме прості системи, які представляються співвідношенням (1.1), мали велике значення у розробці загальних принципів класичної термодинаміки, тому вони є гарною стартовою базою для вивчення всієї проблеми.

Відзначимо важливу особливість у співвідношенні (1.1): тільки приріст внутрішньої енергії записаний через повний диференціал, на відміну від приростів роботи і теплоти. Повний диференціал означає, що для рівноважних процесів приріст внутрішньої енергії може бути виражений простою лінійною комбінацією приростів від змінних стану системи, наприклад, для простих систем

$$dU = -pdV + TdS. \quad (1.2)$$

Зрозуміло, що тут  $\delta A = -pdV$  і  $\delta Q = TdS$ , і якщо  $dU$  – повний диференціал, то за визначенням повного диференціала

$$p = -\frac{\partial U}{\partial V}, \quad T = \frac{\partial U}{\partial S}, \quad (1.3)$$

тобто змінні  $p$  (тиск) і  $T$  (температура) знаходяться автоматично простим диференціюванням внутрішньої енергії за умови наявності явної аналітичної форми. У той же час зрозуміло, що частина повного диференціала сама по собі повним диференціалом не є.

Поведінка твердих тіл різної природи при сильних зовнішніх механічних діях супроводжується процесами руйнування та фрагментації [3, 5, 77, 98, 99]. З точки зору термодинаміки ці процеси розрізняються між собою лише каналами дисипації енергії, отриманої від роботи зовнішніх сил. Наприклад, у випадку квазікріхких тіл енергія від зовнішнього механічного напруження іде на генерацію мікро-

тріщин, їхній розвиток і злиття [98], у випадку ІПД металів – утворення нових висококутових меж і, як наслідок, подрібнення (фрагментації) зерен [3, 5, 77, 99]. Зазначимо, що всі ці процеси з точки термодинаміки є сильно нерівноважними, тому для їх опису потрібно розвивати спеціальний підхід.

На думку Л. С. Метлова, процес фрагментації є стаціонарним, сильно нерівноважні потоки, що виникають, збалансовані й слабо впливають на протікання останніх квазірівноважних процесів [32]. Система фактично розбивається на дві відносно слабо взаємозв'язані підсистеми, в одній з яких по межах фрагментів протікають сильно нерівноважні процеси, а в другій, в об'ємі частинок, процеси деформації мають квазірівноважний характер. Частинки деформуються і фрагментуються під дією відносно невеликого “залишкового” пружного напруження, що залишилося від неповної дисипації енергії в першій підсистемі. З іншого боку, наявність надпластичного аморфного простору між частинками, роль якого у разі ІПД відіграють процеси міжзеренного прослизання, визначає відносно слабку взаємодію частинок другої підсистеми між собою. Внаслідок цього, незважаючи на контакт частинок уздовж великої поверхні, їх формально можна описувати в наближенні розрідженого газу. У такому випадку, під сильною взаємодією частинок слід вважати взаємодію, що супроводжується подрібненням зерен, а під слабкою – взаємодію, в ході якої подрібнення зерен відсутнє або істотно сповільнюється. З досягненням режиму ІПД, за якого розміри частинок стабілізуються і перестають змінюватися, активізується область слабкої взаємодії. Таким чином, саме для опису ефекту досягнення граничного розміру зерна та близької до неї області будуть справедливими принципи квазірівноважної термодинаміки, що наведено у розглянутому нижче підході [32].

Отже, основний закон термодинаміки для простих тіл можна записати у вигляді:

$$du = \delta A + \delta Q = \sigma_{ij} \delta \varepsilon_{ij} + T \delta s', \quad (1.4)$$

де  $u$  – густина внутрішньої енергії;  $\delta A$ ,  $\delta Q$  – прирости роботи зовнішніх сил та теплоти;  $\sigma_{ij}$ ,  $\varepsilon_{ij}$  – тензори напружень і деформацій;  $T$ ,  $s'$  – температура та густина ентропії (отримана за рахунок зовнішніх джерел тепла) [32, 33].

Перша частина рівності (1.4) відображає закон збереження енергії – внутрішня енергія системи змінюється пропорційно тому, яка робота здійснена зовнішніми тілами і скільки тепла надійшло до системи через її зовнішні межі. Ця частина рівності справедлива як для рівноважних (оборотних), так і для нерівноважних (необоротних) процесів. Друга частина рівності (1.4) справедлива лише для рівноважних процесів, оскільки для її запису використовується специфічно визначена величина – ентропія. У цьому випадку приріст ентропії від зовнішніх джерел повністю співпадає з приростом  $\delta s = \delta s'$  (власні джерела ентропії відсутні). Разом із тим, змінні  $\varepsilon_{ij}$  та  $s$  виражаються через повні диференціали та цілком визначають термодинамічний стан системи у зворотних процесах.

Оскільки в реальних системах частина роботи зовнішніх сил іде на внутрішнє розігрівання, то роботу зовнішніх сил можна представити у вигляді суми оборотної та необоротної частин [32, 33]:

$$du = \sigma_{ij} d\varepsilon_{ij}^e + \sigma_{ij} \delta\varepsilon_{ij}^n + T\delta s'. \quad (1.5)$$

Очевидно, що пружні деформації в одержаному співвідношенні за своєю природою є оборотними, тому їх приріст записано через повний диференціал<sup>1</sup>.

Необоротна частина роботи зовнішнього напруження (другий доданок в (1.5)) йде на утворення об'єктів із надлишковою потенціальною енергією – теплових фонів, мікротріщин, МЗ і т. д., які й визначають канали дисипації енергії. Якщо припустити, що є лише тепловий канал дисипації, то вся необоротна частина роботи перетворюється на тепло

$$\sigma_{ij} \delta\varepsilon_{ij}^n = \delta Q^{in} \equiv T\delta s'', \quad (1.6)$$

де  $s''$  – додаткове утворення ентропії за рахунок внутрішніх процесів [32].

Зазначено, що  $\delta Q$  – це частина приросту теплової енергії за рахунок зовнішніх джерел у формі теплових потоків від термостатів, у той час як  $\delta Q^{in}$  – це та частина теплової енергії, яка виробляється всередині твердого тіла внаслідок незворотності. Вона не є потоком, а має об'ємне походження від рівномірно розподілених у просторі джерел ентропії, які можуть бути ототожнені з процесами,

<sup>1</sup>Вважається, що напруження на пружному та непружному елементі середовища однакові (тіло Максвелла).

що протікають на структурних дефектах. Оскільки ця частина ентропії генерується у формі квазімонохроматичних фононів (акустична емісія) в момент зародження і руху дефектів, вона знаходиться у нерівноважній формі. Таким чином, через  $\delta s''$  позначено ту частину теплової енергії від внутрішніх джерел, яка за час зовнішнього впливу встигла відрелаксувати і перейти до рівноважної форми, а через  $\delta \tilde{s}$  – частину, яка залишається у нерівноважній формі та якій належить релаксувати в наступні моменти часу. Об'єднавши обидві частини рівноважної теплової енергії від зовнішніх і внутрішніх джерел ( $\delta Q + \delta Q^{in} \equiv T ds$ ), одержано термодинамічну тотожність, що об'єднує перший і другий закони термодинаміки для простих тіл [32, 33]:

$$du = \sigma_{ij} d\varepsilon_{ij}^e + T \delta s' + T \delta s'' = \sigma_{ij} d\varepsilon_{ij}^e + T ds. \quad (1.7)$$

Вважається, що кожна окрема частина ентропії від зовнішніх і внутрішніх джерел не може визначати стан середовища, тому їх прирости записано через  $\delta$ -символи.

Оскільки не вся теплота, що виникла за рахунок внутрішніх джерел, здатна повернутися до рівноважного стану (наприклад, присутній тепловий рух у формі нерівноважних фононів), тому використовувати рівноважну температуру, що забезпечує виконання закону збереження енергії по всій системі, ми не маємо права. У зв'язку з цим, у співвідношенні (1.7) введено додатковий доданок для нерівноважної частини теплового руху [32]

$$du = \sigma_{ij} d\varepsilon_{ij}^e + T ds + \tilde{T} \delta \tilde{s}. \quad (1.8)$$

Останній доданок враховує загальний енергетичний баланс, оскільки внутрішню енергію визначають всі види внутрішнього руху незалежно від того, в якій формі (рівноважній чи нерівноважній) вони перебувають. Вважається, що нерівноважна теплота може бути присутня у системі у вигляді теплових флуктуацій чи за рахунок генерації нерівноважних фононів, що виникають у результаті утворення та руху структурних дефектів.

Якщо необоротна частина роботи йде не лише на розігрівання, але і на створення високоенергетичних об'єктів типу різного роду дефектів, і, зокрема, до-

даткових меж при ІПД, то тотожність (1.6) слід переписати відповідно до вигляду [32]:

$$\sigma_{ij}\delta\varepsilon_{ij}^n \equiv T\delta s'' + \varphi\delta h, \quad (1.9)$$

де  $\varphi$  і  $h$  – зв'язана пара термодинамічних змінних (статична температура та ентропія), яка характеризує дефектність матеріалу. Таким чином, термодинамічна тотожність для тіла з одним видом дефектів матиме вигляд

$$du = \sigma_{ij}d\varepsilon_{ij}^e + Tds + \tilde{T}\delta\tilde{s} + \varphi\delta h. \quad (1.10)$$

Цей вираз відображає об'єднаний 1-й та 2-й закони термодинаміки у формі рівності або слабкої нерівності [33]. Проте це наближене співвідношення, оскільки враховує не всі можливі канали дисипації, а тільки деякі основні.

За визначенням, внутрішня енергія визначається однозначною функцією всіх своїх аргументів [32]

$$u = u(\varepsilon_{ij}^e, s, \tilde{s}, h). \quad (1.11)$$

Формально всі змінні, що визначають термодинамічний стан системи, є рівноправними. На думку Л. С. Метлова, це дає нам можливість замінити у співвідношенні (1.10) прирости нерівноважних змінних їх повними диференціалами

$$du = \sigma_{ij}d\varepsilon_{ij}^e + Tds + \tilde{T}d\tilde{s} + \varphi dh. \quad (1.12)$$

Співвідношення (1.12) визначає узагальнене співвідношення Гіббса у разі сильно нерівноважних процесів генерації структурних дефектів у твердих тілах. Причому в класичній термодинаміці таке співвідношення має форму нерівності [100], проте явне врахування основних каналів дисипації енергії дозволило знизити степінь нерівності і записати це співвідношення у формі рівності або рівняння.

### 1.3.2. Зв'язок НЕТ і теорії фазових переходів Ландау

Теорію Л. Д. Ландау ФП2 було запропоновано у середині ХХ ст. [101, 102], але інтерес до неї не слабшає до теперішнього часу, наприклад, у теорії фазових



полів [103,104]. Пізніше, О. З. Паташинський та В. Л. Покровський у роботі [105] встановили дуже важливий однозначний зв'язок між ПП і конфігураційною ентропією. Такий зв'язок дозволяє вибрати у якості незалежної термодинамічної змінної одну з цих величин. А отже, надає можливість викласти теорію ФП2, наприклад, не в термінах ПП, а в термінах конфігураційної ентропії. Таким чином, можливе використання аналогічного підходу для широкого діапазону явищ, у тому числі для моделювання процесів ПД.

Традиційно вивчення ФП2 базується на використанні термодинамічного потенціалу вільної енергії, проте підхід Л. С. Метлова демонструє принципову можливість розглядати варіант теорії, де у якості термодинамічного потенціалу фігурує внутрішня енергія. Разом із тим показано, що обидва підходи є еквівалентними.

Згідно з підходом НЕТ, термодинамічний потенціал вільної енергії представлено розвиненням у ряд за ПП та його похідними. За допомогою перетворення Лежандра можна здійснювати переходити у відповідності до виразу

$$F = U - TS \quad (1.13)$$

від вільної енергії до внутрішньої енергії, і навпаки залежно від того, що буде задано спочатку [32].

Отже, відповідно до зв'язку між конфігураційною ентропією і ПП, автором роботи [32] встановлено перетворення між вільною та внутрішньою енергією та знайдено альтернативну форму еволюційних рівнянь у термінах внутрішньої енергії. Крім того, вважається, що конфігураційна ентропія, концентрація дефектів і параметр порядку, у різній формі характеризують одну і ту ж структурну реалію твердого тіла – його дефектність [106]. У разі фазових переходів дефектність може бути пов'язана зі спонтанним виникненням зародків нової фази [107].

### 1.3.3. Система еволюційних рівнянь у термінах внутрішньої енергії

Новий підхід Л. С. Метлова, феноменологічні основи якого викладено в попередніх підрозділах, дозволяє одночасно описати процеси енергетичного накачування, що відбуваються за рахунок виконання роботи, і дії зовнішніх теплових джерел та процеси релаксації під час ІПД металів [32, 33, 41, 92–95]. Згідно з теорією, релаксація системи здійснюється двома шляхами: зростанням кількості структурних дефектів і утворенням теплоти (через продукування ентропії). Енергетичне накачування розпочинається з першого процесу, що призводить до загального зростання внутрішньої енергії за рахунок дефектності. Це зростання безпосередньо викликане збільшенням густини дефектів  $h$  і збільшенням середньої енергії дефекту  $\varphi$ , що пропорційно внеску  $\varphi h$ . Із часом утворення дефектів перестає бути ефективним механізмом дисипації енергії й рівноважний (стаціонарний) стан системи буде сформований поблизу максимального значення внутрішньої енергії за дефектністю матеріалу.

Для опису ІПД металів Л. С. Метлов запропонував моделі: одномодову дворівневу модель [108], двомодову однорівневу модель [109] та двомодову дворівневу модель [33, 41, 92, 93, 95]. Кількість мод визначається кількістю стійких стаціонарних розв'язків або максимумів внутрішньої енергії – одна у наближенні квадратичного полінома і дві у наближенні полінома четвертого степеня. Кількість рівнів визначається кількістю типів врахованих дефектів.

У загальному випадку, що на відміну від співвідношення (1.12) враховує  $N$  типів дефектів, еволюція нерівноважних параметрів описується за допомогою системи еволюційних рівнянь типу Ландау-Халатнікова [32]

$$\frac{\partial \tilde{s}_l}{\partial t} = \gamma_{sl} \left( \frac{\partial u}{\partial \tilde{s}_l} - \tilde{T}_{ls} \right), \quad \frac{\partial h_l}{\partial t} = \gamma_{hl} \left( \frac{\partial u}{\partial h_l} - \varphi_{ls} \right). \quad (1.14)$$

Похідні від внутрішньої енергії за нерівноважними змінними представляють узагальнені термодинамічні сили, а  $\tilde{T}_{ls}$  і  $\varphi_{ls}$  визначають значення нерівноважних параметрів  $l$ -ї дефектної підсистеми у стаціонарному стані.

### 1.3.3.1. Двомодава дворівнева модель ІПД

Вважається, що основним структурним дефектом при ІПД є МЗ. Разом з тим дислокації грають не менш важливу роль у процесах фрагментації, оскільки вони представляють “будівельний матеріал” і через зміцнення матеріалу створюють силові умови для формування МЗ. Таким чином, у термінах дводефектної моделі, що враховує внески густини дефектів до четвертої степені, густина внутрішньої енергії має вигляд [32, 33]:

$$u(h_g, h_D) = u_0 + \sum_{l=g,D} \left( \varphi_{0l} h_l - \frac{1}{2} \varphi_{1l} h_l^2 + \frac{1}{3} \varphi_{2l} h_l^3 - \frac{1}{4} \varphi_{3l} h_l^4 \right) + \varphi_{gD} h_g h_D, \quad (1.15)$$

де  $u_0$ ,  $\varphi_{kl}$  ( $k = 0, 1, 2, 3$ ,  $l = g, D$ ),  $\varphi_{gD}$  – деякі коефіцієнти, які залежать від рівноважних змінних  $s$  і  $\varepsilon_{ij}^e$  як від керувальних параметрів:

$$u_0 = \frac{1}{2} \lambda (\varepsilon_{ii}^e)^2 + \mu (\varepsilon_{ij}^e)^2 + \beta s^2, \quad (1.16)$$

$$\varphi_{0l} = \varphi_{0l}^* + g_l \varepsilon_{ii}^e + \left( \frac{1}{2} \bar{\lambda}_l (\varepsilon_{ii}^e)^2 + \bar{\mu}_l (\varepsilon_{ij}^e)^2 \right) - \beta_l s + \beta_{gl} s \varepsilon_{ij}^e, \quad (1.17)$$

$$\varphi_{1l} = \varphi_{1l}^* - 2e_l \varepsilon_{ii}^e. \quad (1.18)$$

Фізичний зміст і приблизний діапазон зміни параметрів теорії, тобто коефіцієнтів полінома, яким апроксимується внутрішня енергія, встановлюється для кожного випадку окремо. Наприклад, таким чином, як це описано в роботах [33, 92]. У той же час, точні експериментальні методи визначення параметрів теорії на даний момент відсутні, відсутні також нефеноменологічні теорії, які могли б обчислити їх з перших принципів чи з моделей більш глибокого мікроскопічного рівня.

Система еволюційних рівнянь (1.14) для даної задачі набуває вигляду

$$\begin{aligned} \frac{\partial h_D}{\partial t} &= -\gamma_{h_D} [\varphi_{1D}(h_D - h_{D_s}) + \varphi_{gD}(h_g - h_{g_s})], \\ \frac{\partial h_g}{\partial t} &= -\gamma_{h_g} [\varphi_{gD}(h_D - h_{D_s}) + \Phi(h_g - h_{g_s})], \end{aligned} \quad (1.19)$$

де  $\Phi = \varphi_{1g} - \varphi_{2g}(h_g h_{g_s}) + \varphi_{3g}(h_g^2 + h_g h_{g_s} + h_{g_s}^2)$ ,  $h_{D_s}$ ,  $h_{g_s}$  – стаціонарні значення густини дислокацій та МЗ [33].

Відомо, що закон зміцнення є наслідком зменшення рухливості дислокацій за рахунок гальмування різними дефектами. В рамках теорії НЕТ закон зміцнення

описується співвідношенням

$$\varepsilon^e = \alpha b \sqrt{h_D}, \quad (1.20)$$

де  $\alpha$  – коефіцієнт, який набуває значення з інтервалу  $0,2 - 1$ ;  $\mu$  – модуль зсуву;  $b$  – вектор Бюргерса;  $h_D$  – густина дислокацій [33, 92, 93]. Ця залежність використовується як додаткове співвідношення до енергетичних і кінетичних співвідношень, що записані вище, та дозволяє встановити самоузгоджений зворотній зв'язок між процесом формування граничної структури та умовою її формування у вигляді діючих напружень.

З рис. 1.4а видно, що під час СФП кінетика МЗ і дислокацій тісно зв'язана між собою. Спочатку зростання кількості дислокацій ініціює зростання МЗ і провокує початок СФП. Під час СФП, коли густина дислокацій вже майже вийшла на стаціонарне плато, навпаки, зростання МЗ провокує зростання густини дислокацій. Таким чином, дислокації слідом за межами зерен повторюють в цій області форму кривої СФП, але в більш ослабленій мірі.

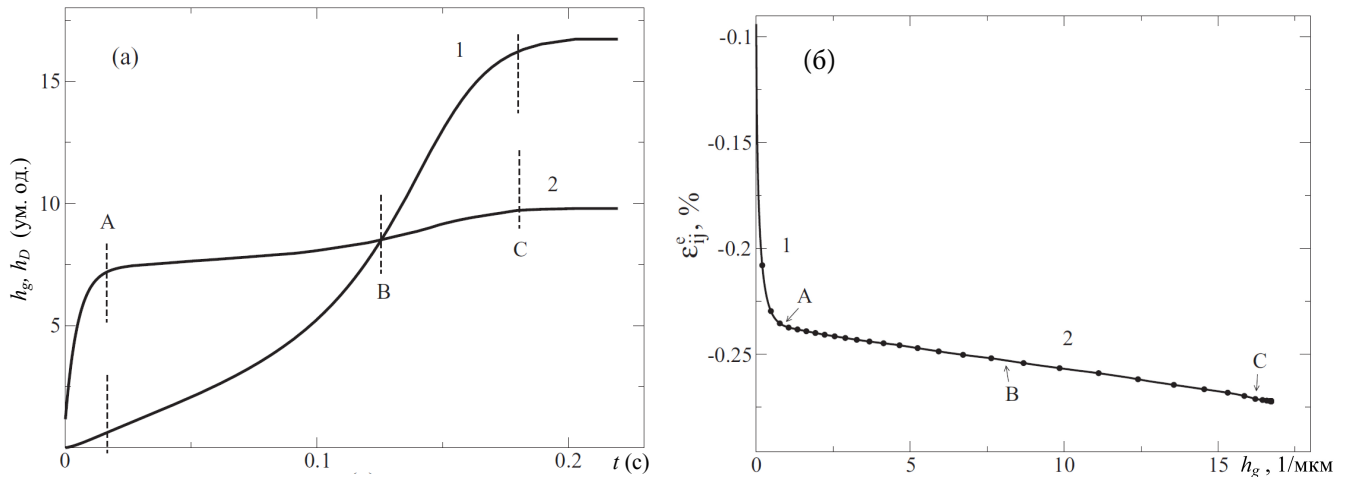


Рис. 1.4. Закономірності дефектоутворення під час ІПД: а – кінетика дефектів: 1 – густина МЗ; 2 – густина дислокацій; б – закон зміцнення (1.20): 1 – ділянка закону Холла – Петча; 2 – ділянка лінійного закону зміцнення. Точки  $A, B, C$  вказують моменти формування найбільш характерних ділянок кінетичних кривих і кривої зміцнення. Маркери на кривій зміцнення нанесені через однакові проміжки часу [33]

Стадійність деформації під час ІПД виявляється також і в зміні характеру закону зміцнення (1.20) на різних стадіях процесу. На першій стадії (область 1,

рис. 1.4б) закон зміцнення може бути апроксимований законом Холла – Петча. На пізнішій стадії закон має витриманий на великій ділянці лінійний характер (область 2, рис. 1.4б).

## Висновки до розділу 1

Детальний аналіз літературних джерел дозволяє зробити такі висновки.

1. Існує багато експериментальних досліджень, що вивчають процеси фрагментації металів чи сплавів під час оброблення методами ІПД. Проте питання визначення оптимальних температурно-силових умов оброблення, що дозволять забезпечити найбільш сприятливі умови для формування рівноважних СМК чи НК кристалічних структур із високими фізико-механічними властивостями, залишається відкритим. Більшість робіт обмежується вивченням кінцевих (сформованих після завершення оброблення) структур і відповідних властивостей матеріалів, у той час як фізичні процеси, що відбуваються при ІПД, залишаються без уваги. У зв'язку з цим, розвиток теоретичних методів для опису структурних перетворень при обробці ІПД набуває вагомого значення. Розглянуті базові теоретичні підходи дозволяють розкрити певні сторони різноманітного прояву закономірностей у процесах деформації та руйнування твердих тіл, а також у цілому дозволяють скласти більш повне та об'єктивне уявлення про предмет дослідження.

2. Ряд питань, що стосуються інтенсивної пластичної деформації, сьогодні не вирішено, а методи дослідження в основному зводяться до узагальнення експериментальних даних. Зокрема, теоретично не вдалося описати формування “граничної” структури металів – мінімального середнього розміру зерен, а також не було передбачено можливість утворення декількох граничних структур. Крім того, не описано ряд явищ, які часто спостерігаються під час експериментальних досліджень: реалізація фазових перетворень, наявність різних режимів процесу фрагментації, формування фрактальних структур, виникнення нестабільних конфігурацій, температурні аспекти проблеми, вплив флуктуацій основних параметрів і т.д. Таким чином, у представленій дисертаційній роботі запропоновано

узагальненуа феноменологічну модель процесу фрагментації металів чи сплавів при ІПД, що дозволяє описати процес подрібнення полікристалічної структури та формування граничної СМК чи НК структури.

3. Запропонований новий підхід НЕТ, який базується на комбінації техніки фазових перетворень Ландау у наближенні середнього поля й положень класичної нерівноважної термодинаміки, дозволяє отримати більш повну інформацію про поведінку систем під час ІПД. У рамках цього концептуального підходу вже розглянуто ряд завдань кінетики дефектів при ІПД, у тому числі одержано закони зміцнення металів. У той же час, недостатньо дослідженими ще залишилися: умови формування граничних СМК чи НК структур декількох типів; фазова динаміка нерівноважних змінних у процесі формування стаціонарних СМК чи НК структур; вплив часів релаксації на кінетику системи, що дозволяє розглянути різні сценарії формування граничних (стаціонарних) структур; стійкість запропонованої моделі; вплив флуктуацій основних параметрів, що може істотно змінити характер еволюції системи та призвести до утворення якісно нових режимів функціонування й станів. Саме ці моменти розглядаються в наявній дисертаційній роботі.

Частково матеріали літературного огляду опубліковано у статтях [46, 47].

## РОЗДІЛ 2

### ФЕНОМЕНОЛОГІЧНА МОДЕЛЬ ФРАГМЕНТАЦІЇ МЕТАЛІВ ЧИ СПЛАВІВ ПРИ ІПД

Останнім часом побудова теоретичних моделей, що дозволяють якісно описати супроводжувані процеси фрагментації (подрібнення) кристалічної структури матеріалу у процесі оброблення методами ІПД, набуває вагомого значення. Так, у підрозділі 1.3 літературного огляду представлено запропоновану Л. С. Метловим термодинамічну модель, що однозначно встановлює перебіг сильно нерівноважних процесів і дозволяє описати специфіку формування граничної (стаціонарної) зернистої структури матеріалу під час ІПД [32, 33, 41, 92–95]. В якості незалежних термодинамічних змінних моделі розглядаються густини дефектів, ентропія та компоненти тензора пружних деформацій. У подальшому представлені ідеї використано в якості основи для розв'язання конкретних завдань [46–55].

Метою цього розділу дисертаційної роботи є узагальнення термодинамічної моделі, що описує фрагментацію металів чи сплавів при ІПД, та дослідження особливостей і умов формування граничних (стаціонарних) структур різних типів. Таким чином, у наближенні дводефектної моделі з урахуванням густини дислокацій та МЗ побудовано ФД, що встановлює умови формування граничних (стаціонарних) структур різних типів. Крім того, у розділі детально вивчено еволюцію основних структурних дефектів та їх взаємодію у процесі реалізації стаціонарного режиму, а також встановлено пряму залежність типу граничної структури, що формується, від значень зсувної деформації та початкового стану матеріалу. Виявлено, що зміна станів системи має характер СФП. Зі способів опису впливає, що гранична (стаціонарна) структура не є незмінною, а являє собою динамічну рівновагу процесів генерації і анігіляції структурних дефектів.

## 2.1. Основні співвідношення в термінах внутрішньої енергії

На основі фундаментальної нерівності, що об'єднує перший та другий закони термодинаміки, та враховуючи основні канали дисипації енергії у роботах [32, 33, 41, 92–95] одержано узагальнене співвідношення Гіббса (див. вираз (1.12) у розділі 1.3), що дозволяє описати поведінку нерівноважних систем та визначити перебіг сильно нерівноважних процесів: нагрівання й генерації структурних дефектів. Крім того, запропонована теорія дозволяє правильно відобразити еволюцію структурних дефектів у процесі ІПД та формування граничної (стаціонарної) структури. Розширення системи незалежних термодинамічних змінних дозволило ввести поняття стану сильно нерівноважної системи.

Механічна робота, що продукується у процесі ІПД, призводить до зростання внутрішньої енергії металів. Оскільки процес протікає досить швидко, в межах долі секунди (один прохід в середньому триває  $10^{-2} - 10^{-1}$  с), тому виділена при ІПД теплота не встигає відводитися і процес протікає в умовах адіабатичності. Температура тіла разом із тим підвищується незначно (на  $50 - 60$  °С), тому тепловими ефектами у цьому процесі можна знехтувати. Під час холодного оброблення більша частина роботи йде на формування структурних дефектів [32, 41, 95]. Очевидно, що опис реального процесу фрагментації є досить складним, оскільки в процесі оброблення беруть участь усі рівні структурних дефектів: точкові дефекти (вакансії й міжвузлові атоми), лінійні дефекти (дислокації та дисклинації), плоскі 2D дефекти (МЗ) і об'ємні дефекти (мікропори, мікротріщини та кластери). Проте при теоретичному моделюванні доцільно обмежитися спрощеною моделлю і враховувати тільки ті дефекти, які відіграють найбільш істотну роль у формуванні дрібнозернистої структури і значно впливають на фізико-механічні властивості матеріалу. Таким чином, найбільший вплив на процес фрагментації металу чи сплаву при ІПД мають два типи дефектів – МЗ та дислокації. Перші безпосередньо визначають ступінь фрагментації твердих тіл, а другі відповідають за формування межі пластичної течії та міцність матеріалу [3, 5, 13, 110, 111]. Внесок інших, менш значимих, видів дефектів можна



врахувати за рахунок вибору значень феноменологічних коефіцієнтів теорії. Отже, моделювання процесу фрагментації металу чи сплаву при обробці методами ІПД на цій стадії вивчення проблеми зводиться до дослідженням дводефектної моделі.

Вираз для густини внутрішньої енергії в рамках розглянутого випадку зручно представити у формі поліноміальної залежності від густин обраних двох типів дефектів [32, 33, 46, 47, 92, 93]:

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

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

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

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

де  $u_0$  – частина внутрішньої енергії, що не залежить від дефектності матеріалу (рівень відліку);  $h_g$ ,  $h_D$  – густини МЗ та дислокацій;  $M = \lambda + 2\mu$  – модуль одностороннього стиснення матеріалу [98, 112, 113];  $\lambda$ ,  $\mu$  – сталі Ламе;  $\varepsilon_{ii}^e$ ,  $I_2 \equiv (-\varepsilon_{ii}^e \varepsilon_{jj}^e + \varepsilon_{ij}^e \varepsilon_{ji}^e)/2$  – перший та другий інваріанти тензора пружних деформацій;  $\varphi_{0m}^*$  – власна енергія дефекту з урахуванням його розмірності (на одиницю довжини для дислокацій і поверхнева густина для МЗ);  $\varphi_{0m}$  – та ж сама енергія з урахуванням впливу пружних деформацій в 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 випадку 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;  $\varphi_{1m}^*$ ,  $\varphi_{1m}$  – 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  $\varepsilon_{ii}^e < 0$  розуміється зворотно-направлений процес; значення індексів  $m = g$  відносяться до МЗ, а  $m = D$  – до дислокацій;  $\varphi_{gD}$  – параметр, що відображає енергію взаємодії

обраних структурних дефектів. У загальному випадку додатні внески у співвідношенні (2.1) визначають генерацію структурних дефектів, а від'ємні складові відповідають зворотним процесам – анігіляції дефектів (рекристалізації).

Степенеve розвинення (2.1) за умови позитивних значень коефіцієнтів  $\varphi_{km}$  ( $k = 0 - 3$ ) може формувати два максимуми. У випадку МЗ, максимуми відповідають утворенню двомодового розподілу за розмірами зерен. У разі дислокацій, мода, що відповідає меншому значенню дефектності, описує випадковий (однорідний) розподіл представленого дефекту, відповідно більше значення дефектності відображає ансамбль дислокацій, які утворюють комірчасту структуру. Зазначимо, що для опису формування граничної (стаціонарної) структури необхідна більш висока степінь наближення внутрішньої енергії (2.1) за значеннями густини МЗ, проте у випадку дислокацій досить обмежитися внесками тільки до другої степені за густиною дефекту ( $\varphi_{2D} = 0 \text{ Дж} \cdot \text{м}^3$ ,  $\varphi_{3D} = 0 \text{ Дж} \cdot \text{м}^5$ ). Такий вибір дозволяє досягти кращої відповідності з поведінкою реальних систем за умови великих пластичних деформаціях [32]. Чергування знаків у круглих дужках (2.1) відображає принцип Ле-Шательє: термодинамічний процес більш високого рівня спрямований на компенсацію ефектів від термодинамічних процесів нижчого рівня.

Тут повна деформація представляється у вигляді суми оборотної  $\varepsilon_{ij}^e$  (пружної) та необоротної  $\varepsilon_{ij}^p$  (пластичної або залишкової) складових [99] (див. додаток А). З проявом пластичної (залишкової) деформації пружна складова не зникає, проте має менший внесок. Відповідно до теорії пружності, вид виникаючої деформації визначається, в основному, характером прикладеного до тіла навантаження та формуванням відповідних напружень  $\sigma$ . Так, переважання тангенціальних складових напруження  $\sigma_\tau$  (або  $\sigma_{ij}$ ) сприяє розвитку пластичної деформації, а нормальних складових  $\sigma_n$  (або  $\sigma_{ii}$ ) призводить до розриву міжатомних зв'язків [114]. Відомо, що пластична деформація починає розвиватися з досягненням механічними напруженнями межі текучості (плинності)  $\sigma_T$ . Вважається, що процес фрагментації металу або сплаву при обробці ІПД може інтенсивно протікати тоді, коли пружні деформації  $\varepsilon_{ij}^e$  і пов'язані з ними напруження  $\sigma_{ij}^e$

перевищують цю межу. У разі, коли прикладені напруження не досягають значення  $\sigma_T$ , процес фрагментації неможливий, оскільки відсутня пластична течія, що відповідає за формування стаціонарних станів [94, 99].

Оскільки енергія системи не повинна залежати від вибору системи координат, то вона виражається через інваріанти тензора деформацій (див. додаток А). Відмітимо, що в рамках теорії НЕТ [32] значення пластичних (накопичених) деформацій  $\varepsilon_{ij}^p$  не представлено в явному вигляді. Відомо, що пластична деформація проявляється у результаті зародження та руху дислокацій, а також за рахунок взаємодії дефектних підструктур різних рівнів [3, 114], унаслідок чого в матеріалі формується СМК (утворюються зерна з середніми розмірами  $d = 100 - 10^3$  нм) або НК ( $d \leq 100$  нм) структура [10–12, 70, 71]. Крім того, встановлено, що за умови постійної швидкості деформування накопичена пластична деформація пропорційна часу, а у разі змінної швидкості деформування монотонно залежить від нього. Тому в механіці прийнято замість часу використовувати накопичену деформацію (мертвий час). Таким чином, у представленій теорії час використовується в явній формі, а пластична деформація присутня неявно, у формі густин дефектів (див. вивід узагальненого співвідношення Гіббса в розділі 1.3 [33]). Тепловий канал дисипації на цій стадії вивчення проблеми не враховується.

Відзначимо, що значення першого і другого інваріантів тензора пружних деформацій  $\varepsilon_{ii}^e$ ,  $I_2$  є керувальними параметрами і представляють зовнішній механічний вплив (тиск) при ПД<sup>2</sup>. У представленому дослідженні розглядається процес стиснення деформованого зразка (протитиск), тому перший інваріант тензора пружних деформацій  $\varepsilon_{ii}^e$  набуває від'ємних значень. Із огляду на це, на початковому етапі оброблення, згідно з виразом (2.3), переважає лінійний за  $\varepsilon_{ii}^e$  внесок (див. другий доданок), і за умови позитивного значення константи  $g_m$  стиснення буде призводити до уповільнення генерації дефектів. На більш пізніх стадіях, у результаті зміцнення, переважатиме квадратичний за  $\varepsilon_{ii}^e$  внесок, що незалежно від його знака буде призводити до прискорення процесу утворен-

<sup>2</sup>Загалом керувальними параметрами є повна ентропія і пружні деформації  $\varepsilon_{ij}^e$ , проте ентропія (тобто теплові ефекти) в представленій моделі не враховується, тому залишаються тільки пружні деформації у вигляді інваріантів (або пропорційні їм напруження).

ня дефектів. У цілому процес генерації дефектів, що задано коефіцієнтом (2.3), на завершальній стадії буде урівноважено процесом їх анігіляції (наприклад, у результаті рекристалізації), що описується коефіцієнтом (2.4).

Варто зазначити, що в рамках запропонованої теорії формування стаціонарних станів дводефектної системи пов'язано з утворенням максимумів внутрішньої енергії (2.1) (або (2.6)), що сильно відрізняється від класичного підходу в рамках рівноважної термодинаміки, оскільки згідно з останньою система завжди прагне досягнути мінімуму енергії. Вважається, що процес подрібнення металеві структури при обробці методами ІПД відповідає сильно нерівноважним процесам, оскільки в системі постійно відбувається перекачування енергії за рахунок зовнішнього впливу. Разом з тим відомо, що перебіг нерівноважних процесів неможливо коректно представити, використовуючи загальновідомі класичні методи, тому в роботі розвивається новий феноменологічний підхід, в основі якого введено поняття деякої “ефективної” внутрішньої енергії, коли система приходить до стаціонарних станів, які відповідають максимумам, та представляє собою комбінацію внутрішньої енергії та ентропійної складової [33–35]. Під формуванням максимуму внутрішньої енергії мається на увазі не абсолютний максимум, а лише максимум у перерізі за однією із змінних. Подібний принцип формування максимальних значень внутрішньої енергії досить часто реалізується на практиці. Наприклад, в магнетизмі така максимальна внутрішня енергія за магнітним моментом визначає феромагнітне упорядкування [36]. У теорії аморфних сплавів максимум внутрішньої енергії за концентрацією компонентів при додатному знаку енергії змішування обумовлює упорядкування сплавів [37, 38]. Ця властивість внутрішньої енергії схожа з властивостями термодинамічного потенціалу, що введено раніше для сильно нерівноважних процесів [39, 40]. Проте, з точки зору загальноприйнятого формалізму “ефективний” потенціал (2.1) (або (2.6)) є деякою конструкцією, що відіграє роль аналогу та не має фізичного змісту оригінальної внутрішньої енергії. В подальшому, для уникнення непорозумінь, ототожнимо ці два поняття, таким чином, співвідношення (2.1) та (2.6) будуть розглядатися в якості внутрішньої енергії.

Очевидно, що досліджувана модель (2.1) – (2.4) містить багато параметрів і коефіцієнтів, фізична інтерпретація та значення яких відіграють важливу роль у визначенні реального процесу фрагментації металу або сплаву в умовах ІПД. Основною метою теорії НЕТ є побудова узагальненої термодинамічної моделі, що дозволить провести якісне моделювання процесу оброблення металевого зразка методами ІПД та одержати порівнювані з експериментальними дослідженнями результати. Проте у даний час завдання фізичного трактування та введення інтервалів, що визначають межі зміни основних параметрів теорії, ще мало вивчено. Більшість параметрів є феноменологічними, оскільки досить складно врахувати всі можливі взаємодії, що відбуваються у структурі матеріалу, та, власне, визначити реальні розмірності величин, які представляють ці процеси. Техніку вибору основних параметрів і визначення явного фізичного сенсу деяких із них описано в роботах [32,33,92]. Таким чином, коефіцієнт  $\varphi_{gD}$  у співвідношенні (2.1), як уже зазначалося раніше, відображає енергію взаємодії між дефектами даної системи. Змінну  $\varphi_{0m}$  ( $m = g, D$ ), що визначається співвідношенням (2.3), можна інтерпретувати як загальну поверхневу густину енергії для відповідного виду дефекту. Перші доданки  $\varphi_{0m}^*$  у визначенні (2.3) представляють власну енергію дефектів з урахуванням розмірності за відсутності інших впливів, їхня поверхнева енергія є мінімальною по відношенню до всієї енергії розглянутої поверхні матеріалу. У роботах С.А. Фірстова [33, 115] загальна поверхнева енергія регулярної (нескінченної) МЗ для міді під час холодновальцьованої оброблення набуває подвоєного значення від енергії вільної межі розглянутого зразка (приблизно  $2 \times 2 = 4$  Дж/м<sup>2</sup>). Разом із тим, значення власної енергії, що можна розглядати як енергію добре відрелаксованої МЗ, становить 15 – 20% від енергії вільної поверхні (для міді – приблизно  $\varphi_{0g}^* = 0,2 \times 2 = 0,4$  Дж/м<sup>2</sup>) [33] (див. таблицю 2.1).

У полі стискальних гідростатичних напружень, що визначається від'ємними значеннями першого інваріанта тензора пружних деформацій  $\varepsilon_{ii}^e < 0$ , другий доданок у співвідношенні (2.3), поряд з коефіцієнтом  $g_m$ , обумовлює негативний внесок у визначенні загальної поверхневої енергії  $\varphi_{0m}$  для обох типів дефектів.

У випадку МЗ, оскільки цей вид двовимірного дефекту представляє деякий розподіл вздовж сильно спотвореної області кристалічної решітки<sup>3</sup>, саме нерівноважність цієї області найбільше впливає на визначення енергії межі. Під впливом механічного напруження об'єм цих розуцільнених областей може зменшуватися. Таким чином, має місце процес анігіляції або пригальмовування генерації дефектів, що власне і призводить до зменшення поверхневої енергії МЗ. Розглядаючи оброблення мідного зразка, для пружної деформації  $\varepsilon_{ij}^e = 0,2\%$ , якій відповідає напруження  $\sigma_{ij} \approx 180$  МПа, значення для коефіцієнта  $g_g$  (тобто зменшення енергії МЗ) визначається в межах 10 % від добре відрелаксованої МЗ (тобто  $g_g = 12$  Дж/м<sup>2</sup>) [32, 33, 92] (див. таблицю 2.1).

Аналогічне міркування дозволило встановити, що змінні  $\bar{M}_g$  і  $\bar{\mu}_g$  для напруження близько 180 МПа не повинні перевищувати значення загальної ефективною поверхневої енергії  $\varphi_{0g}$ , що у випадку міді – подвійної енергії вільної межі 4 Дж/м<sup>2</sup>. Таким чином, приймаються значення  $\bar{M}_g = 2,5 \cdot 10^5$  Дж/м<sup>2</sup> і  $\bar{\mu}_g = 3 \cdot 10^5$  Дж/м<sup>2</sup> [32, 33, 92] (див. таблицю 2.1). Основна відмінність між значеннями представлених коефіцієнтів полягає в тому, що врахування зсувних пружних деформацій є більш вагомим у процесі фрагментації металевої структури, оскільки саме зсувні деформації відповідають за формування і подальшу еволюцію дефектної підструктури.

Визначення основних оцінок дислокаційної підструктури проводиться аналогічним чином. Так, для мідного зразка [116] мінімальна надлишкова енергія для дислокації за відсутності інших впливів становить  $\varphi_{0D}^* = 5 \cdot 10^{-9}$  Дж /м. Разом із тим параметр, що відповідає за взаємодію дислокацій та МЗ, має значення  $\varphi_{gD} = 10^{-16}$  Дж [32, 33, 92] (див. таблицю 2.1).

У цілому, вибір значень основних постійних теорії здійснюється феноменологічно, виходячи з необхідності формування стаціонарних СМК або НК структур, які спостерігаються у ряді експериментальних робіт [3, 10–13, 70, 71, 110]. Наприклад, встановлення стаціонарних значень для густини МЗ реалізується в межах  $h_g^{st1} = 10^4$  м<sup>-1</sup> і  $h_g^{st2} = 10^7$  м<sup>-1</sup>, для яких характерні середні розміри зерен 100 мкм

<sup>3</sup>Аморфний простір між довільно розташованими зернами, що зазвичай охоплює 2 – 3 міжатомні відстані.

і 100 нм. Густина дислокацій для СМК і НК структур у середньому набуває рівноважних значень при  $h_D^{st} = 10^{14} - 10^{16} \text{ м}^{-2}$  [10, 13, 25].

Виходячи з вищезазначеного, у таблиці 2.1 запропоновано такий набір основних параметрів і коефіцієнтів теорії [32, 33, 92, 93], що, на відміну від попереднього набору сталих у роботах [46, 47, 55, 56], який демонструє тільки кількісні співвідношення, враховує реально спостережувані закономірності у процесі оброблення металу чи сплаву методами ІПД.

Таблиця 2.1

Параметри дводефектної моделі

$M = \mu$	$\varphi_{0g}^*$	$g_g$	$\bar{M}_g$	$\bar{\mu}_g$	$\varphi_{1g}^*$	$e_g$	$\varphi_{2g}$
$2,08 \cdot 10^{10}$ Па	0,4 Дж · м <sup>-2</sup>	12 Дж · м <sup>-2</sup>	$2,5 \cdot 10^5$ Дж · м <sup>-2</sup>	$3 \cdot 10^5$ Дж · м <sup>-2</sup>	$3 \cdot 10^{-6}$ Дж · м <sup>-1</sup>	$3,6 \cdot 10^{-4}$ Дж · м <sup>-1</sup>	$5,6 \cdot 10^{-13}$ Дж
$\varphi_{3g}$	$\varphi_{0D}^*$	$g_D$	$\bar{M}_D$	$\bar{\mu}_D$	$\varphi_{1D}^*$	$e_D$	$\varphi_{gD}$
$3 \cdot 10^{-20}$ Дж · м	$5 \cdot 10^{-9}$ Дж · м <sup>-1</sup>	$2 \cdot 10^{-8}$ Дж · м <sup>-1</sup>	0 Дж · м <sup>-1</sup>	$1,65 \cdot 10^{-4}$ Дж · м <sup>-1</sup>	$10^{-24}$ Дж · м	$6 \cdot 10^{-23}$ Дж · м	$10^{-16}$ Дж

## 2.2. Фазова діаграма режимів фрагментації

Диференціюючи базовий енергетичний потенціал для густини внутрішньої енергії (2.1), одержуємо еволюційні рівняння для нерівноважних змінних:

$$\tau_{h_m} \frac{\partial h_m}{\partial t} = \frac{\partial \bar{u}}{\partial h_m}, \quad (2.5)$$

де  $\tau_{h_m}$  – обернено пропорційні величини кінетичних коефіцієнтів, що мають зміст часу релаксації відповідних дефектних підструктур і відображають інерційні властивості системи;  $h_m$  – густини дефектів ( $m = g, D$ );  $\bar{u}$  – ефективна внутрішня енергія [32, 33], яка в даному випадку визначається співвідношенням

$$\bar{u} = u - \sum_{m=g,D} \varphi_m^{st} h_m, \quad (2.6)$$

де  $\varphi_m^{st}$  – енергія дефекту  $m$ -го типу в стаціонарному стані. У такому формулюванні стаціонарні стани будуть визначатися максимумами ефективної внутрішньої

енергії. Рівняння (2.5) описує передемпфовану і детерміністичну динаміку для незбережних та однорідних параметрів порядку [33]. Перетворення (2.6) можна інтерпретувати, як аналог перетворення Лежандра у рівноважній термодинаміці. У такому випадку доданки під знаком суми являють собою зв'язну дефектами енергію, а ефективна внутрішня енергія  $\bar{u}$  є аналогом вільної енергії, що також володіє екстремальними властивостями.

Таким чином, у наближенні дводефектної моделі рівняння (2.5) з урахуванням визначень (2.1) та (2.6) набувають явного вигляду [32]:

$$\tau_{h_D} \frac{\partial h_D}{\partial t} = \varphi_{0D} - \varphi_{1D} h_D + \varphi_{gD} h_g, \quad (2.7)$$

$$\tau_{h_g} \frac{\partial h_g}{\partial t} = \varphi_{0g} - \varphi_{1g} h_g + \varphi_{2g} h_g^2 - \varphi_{3g} h_g^3 + \varphi_{gD} h_D. \quad (2.8)$$

Оскільки стаціонарні значення  $\varphi_m^{st}$  входять у комбінації з лінійним за густинами дефектів внесками, то без збитку для загальності їх можна об'єднати з відповідними коефіцієнтами  $\varphi_{0m} = \varphi_{0m} - \varphi_m^{st}$  ( $m = g, D$ ).

Аналітичний розв'язок нормальної системи двох ЗДР першого порядку [117] досить складно отримати, тому застосуємо адіабатичне наближення  $\tau_{h_g} \gg \tau_{h_D}$ , що визначає характер еволюції нерівноважних змінних  $h_m$  ( $m = g, D$ ) у рамках принципу підпорядкування [118, 119]. Таким чином, на всьому часовому інтервалі зміна густини дислокацій слідує виключно за перетвореннями густини МЗ. Поклавши у рівнянні (2.7)  $\tau_{h_D} \approx 0$  та здійснивши певні перетворення, одержуємо рівняння типу Ландау – Халатнікова [46, 47, 49]:

$$\tau_{h_g} \frac{\partial h_g}{\partial t} = \frac{\partial V}{\partial h_g}, \quad (2.9)$$

де похідна у правій частині задається співвідношенням

$$F(h_g) = \varphi_{0g} + \varphi_{gD} \frac{\varphi_{0D}}{\varphi_{1D}} - \left( \varphi_{1g} - \frac{\varphi_{gD}^2}{\varphi_{1D}} \right) h_g + \varphi_{2g} h_g^2 - \varphi_{3g} h_g^3, \quad (2.10)$$

під впливом якої змінна  $h_g$  прямує до притягувального атрактора<sup>4</sup> – граничної структури. Відомо, що у процесі оброблення ІПД на початковій стадії відбувається подрібнення зернистої структури зразка, проте на границі великої кількості

<sup>4</sup>Деяка множина точок у фазовому просторі, до якої збігаються всі фазові траєкторії дисипативної системи.



циклів деформування розмір зерен, як і вся дефектна структура матеріалу, стабілізується. Структура, що сформована на границі великих часів деформування, у літературних джерелах з оброблення металів тиском отримала назву граничної структури [5]. З точки зору фізики цю структуру більш доречно назвати стаціонарною. Разом із тим, система характеризується ефективним потенціалом

$$V(h_g) = \int_0^{h_g} F(h'_g) dh'_g, \quad (2.11)$$

що збігається зі співвідношенням (2.1) для представленого типу дефекту.

У цілому, можливість реалізації різних стійких станів для одного типу дефекту залежить насамперед від самого процесу деформації, що активує різного роду взаємодії на мікроскопічному рівні. Таким чином, збільшення протяжності МЗ на початковій стадії є продуктивним механізмом дисипації енергії. Однак, після досягнення ультрадисперсної структури з середніми розмірами зерен близько 100 нм інші дефекти, наприклад, потрійні стики, які можна розглядати одночасно з зернами, впливають на загальну поверхневу енергію МЗ, що, власне, і може призвести до формування різних стаціонарних станів із більш дрібними кристалітами. Однак, у подальшому активізуються процеси рекристалізації або коалесценції зерен [10, 12, 72], які спрямовані у протилежну напрямку зменшення густини дефектів. У стаціонарному стані обидва ці процеси динамічно урівноважуються, ефективно перетворюючи енергію, отриману від роботи зовнішніх сил, у тепло.

Використовуючи необхідну умову існування екстремумів ( $\partial V / \partial h_g = 0$ ), визначимо екстремуми ефективного потенціалу  $V(h_g)$  (2.11). Поклавши у співвідношенні (2.9)  $\tau_{h_g} \dot{h}_g = 0$ , одержуємо кубічне рівняння

$$\varphi_{3g} h_g^3 - \varphi_{2g} h_g^2 + \left( \varphi_{1g} - \frac{\varphi_{gD}^2}{\varphi_{1D}} \right) h_g - \varphi_{0g} - \varphi_{gD} \frac{\varphi_{0D}}{\varphi_{1D}} = 0. \quad (2.12)$$

У загальному випадку, рівняння (2.12) може мати три різних розв'язки: два стійких стани (тобто формуються дві граничні структури) та один нестійкий (див. додаток Б). Стійкі стани відповідають максимумам ефективного потенціалу (2.11), нестійкий – мінімуму  $V(h_g)$ . Як відомо за основною теоремою алгебри,

рівняння (2.12) буде завжди мати хоча б один дійсний корінь (тобто завжди буде існувати хоча б один розв'язок, у даному випадку – стаціонарна структура). Інші два корені можуть бути як дійсними (залежно від знака визначника кубічного рівняння – кратними або різними), так і парою комплексно-спряжених розв'язків (див. додаток Б).

Очевидно, що положення екстремумів ефективного потенціалу  $V(h_g)$  безпосередньо залежать від параметрів задачі  $\varphi_{0g}, \varphi_{1g}, \varphi_{2g}, \varphi_{3g}, \varphi_{0D}, \varphi_{1D}$ , поряд із пружними деформаціями  $\varepsilon_{ij}^e$ , і не залежать від початкового значення енергії  $u_0$  (рівня відліку енергії у виразі (2.1)). Разом із тим, сформовані екстремальні значення ПП  $h_g$  дозволяють однозначно визначити можливі режими фрагментації металу або сплаву у процесі оброблення методами ПД. Слід зазначити, що розглянуте вище адіабатичне наближення ( $\tau_{h_g} \gg \tau_{h_D}$ ) не впливає на рівняння (2.12): одержаний вираз є точним. Що справедливо, оскільки розв'язки системи ЗДР (2.7), (2.8) розглядаються у тривалій асимптотиці, коли реалізуються стаціонарні умови для обох типів дефектів (тобто система функціонує у стаціонарному стані).

Варто зазначити, що реалізація першого максимуму ефективного потенціалу  $V(h_g)$  (2.11) помітно залежить від пружної деформацій  $\varepsilon_{ij}^e$  (значень першого і другого інваріантів), у той час як другий – нечутливий до виникаючих напружень та пов'язаних з ними деформаціями. Це обумовлено точністю врахування пружних деформацій  $\varepsilon_{ij}^e$  у степеневому розвиненні внутрішньої енергії (2.1)-(2.4). Розглянуті деформації введено тільки до 2-ї степені за густинами дефектів  $h_m$  у співвідношенні (2.1), що мають найбільший вплив на формування першого максимуму. Таке наближення здійснено в силу збереження приблизно однакового порядку в усьому співвідношенні для внутрішньої енергії (2.1). Сумарний порядок перших двох внесків за густинами дефектів  $h_m$  та пружними деформаціям  $\varepsilon_{ii}^e$ ,  $I_2$  приблизно дорівнює порядку останніх двох, що не враховують значення деформації. Однак, якщо експеримент покаже значну чутливість другого максимуму до пружних деформацій, то, відповідно, така поведінка може бути врахована більш високими степенями наближення за  $\varepsilon_{ii}^e$  і  $I_2$  в коефіцієнтах при  $h_m^3$

і  $h_m^4$ , що представлені у співвідношенні для внутрішньої енергії (2.1).

На рис. 2.1 представлено залежність стаціонарних значень густини МЗ, що одержана з розв'язку рівняння (2.12), від керувального параметра  $I_2$  за різних значень першого інваріанта  $\varepsilon_{ii}^e$ . Слід зазначити, що в даній роботі ми не розглядаємо питання про те, яким способом досягаються необхідні значення керувальних параметрів. Наприклад, у роботах [32, 33, 92], ці значення досягаються самоузгодженим чином, шляхом використання співвідношення Тейлора.

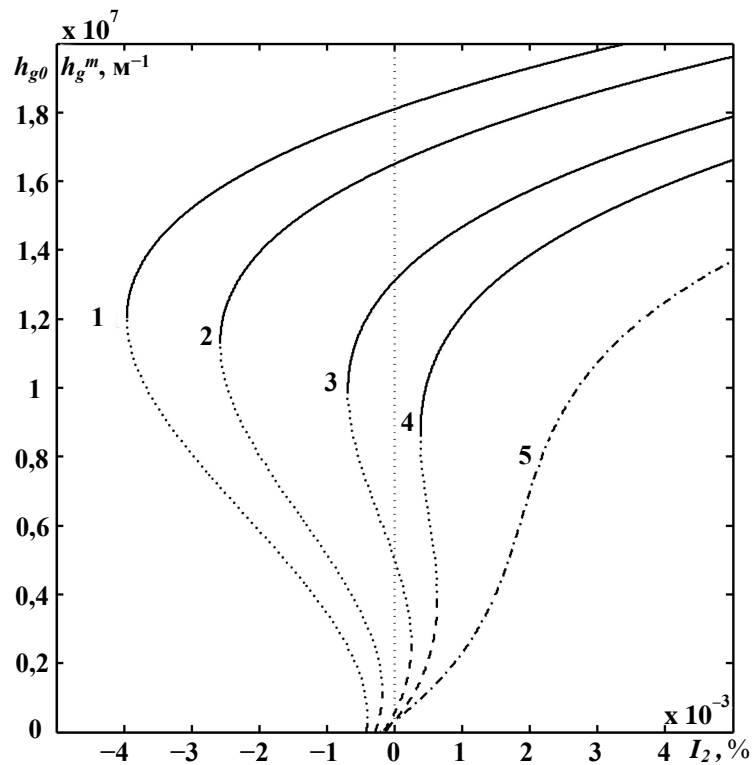


Рис. 2.1. Залежність стаціонарних значень густини МЗ  $h_{g0}$ ,  $h_g^m$  м<sup>-1</sup> від другого інваріанта тензора деформацій  $I_2$  %. Криві 1 – 5 відповідають значенням першого інваріанта  $\varepsilon_{ii}^e = (-0,35; -0,25; -0,1; -0,001; 0,2)$  %

Таким чином, у полі стискаючих пружних деформацій ( $\varepsilon_{ii}^e < 0$ ) при обраних параметрах теорії (див. таблицю 2.1) рівняння (2.12) має три розв'язки (криві 1 – 4 на рис. 2.1), що відповідає формуванню двох стійких стаціонарних станів (максимумів  $V(h_g)$ ), та одного нестійкого (мінімуму  $V(h_g)$ ). Стійкі стани представлено штриховими та суцільними сегментами на кривих 1 – 4, а нестійкі – відображено, відповідно, пунктирними ділянками. Реалізація першого максимуму ефективного потенціалу, залежно від значень другого інваріанта  $I_2$ , може

здійснюватися як при  $h_g = 0$ , так і при ненульових значеннях густини МЗ. Крім того, ненульові значення  $h_g^m$  починають формуватися тільки у тому випадку, коли пружні деформації  $\varepsilon_{ij}^e$  досягають певної критичної величини, що відповідає межі текучості  $\sigma_T$  (плинності). Як зазначалося раніше, ця умова є необхідною для активації процесу фрагментації кристалітів у металевій структурі під час ІПД. Таким чином, якщо пружні зсувні деформації  $\varepsilon_{ij}^e$  не досягають цієї межі, то розглянута теорія втрачає свою силу, оскільки відсутня пластична течія, як нова фундаментальна форма руху, що відповідає за формування стаціонарних станів [94]. Одержані у роботі [120] результати демонструють, що у збудженому стані (у процесі оброблення зразка) значення межі текучості збільшується до рівня в 10 %, порівняно з рівноважною фазою. Разом із тим експериментальні дослідження металів показують, що таке збільшення може досягати 50 % за рахунок впливу збуджених МЗ [3].

З рис. 2.1 видно, що штрихові ділянки на кривих 1 – 4 відповідають меншим стаціонарним значенням  $h_{g0}$  та, відповідно, визначають реалізацію монокристала чи КЗПК. Суцільні ділянки на кривих відображають великі значенням дефектності матеріалу  $h_g^m$  та відповідають формуванню дрібнозернистих СМК чи НК структур<sup>5</sup>. Зазначені стійкі стаціонарні конфігурації розділяються нестійкими станами чи фазами  $h_g^m$  (див. пунктирні частини кривих 1 – 4), що відповідають формуванню мінімумів ефективного потенціалу  $V(h_g)$ .

Вважається, що матеріал до початку процесу оброблення є монокристалом або КЗПК. З підвищенням пружних деформацій зсуву, тобто з підвищенням значень  $I_2$ , на початковому етапі система деякий час буде функціонувати у стійкому стані з низьким рівнем густини дефектів (реалізується перший максимум  $V(h_g)$  при  $h_{g0} \approx 0$ ). На цій стадії процес фрагментації не може відбутися, оскільки величина напружень, що виникають, у структурі матеріалу є недостатньою для активації внутрішньої перебудови зразка (не виникає пластична течія) та формування граничної структури. Активна стадія процесу подрібнення зерни-

<sup>5</sup>Тип сформованої кристалічної структури визначається наближено у відповідності до стаціонарних значень густини дефектів. Вважається, що середні розміри зерен у граничній структурі набувають обернено пропорційного значення відносно сформованої густини МЗ:  $d \sim 1/h_g$ .

стої структури зразка почне протікати виключно за умови виникнення СФП, що полягає у переході від нульового значення максимуму ефективного потенціалу  $V(h_g)$  до ненульового (штрихові сегменти кривих 1–4). Проте варто зазначити, що у випадку одночасного співіснування першого та другого максимумів ефективного потенціалу  $V(h_g)$ , реалізація неперервного процесу фрагментації також не є можливою, оскільки наявний потенціальний “бар’єр” кінцевої глибини (див. пунктирні ділянки на кривих 1–4), що відділяє систему від іншого стійкого стану. Із подальшим збільшенням  $I_2$  у певний момент відбувається злиття першого максимуму з мінімумом внутрішньої енергії, у результаті система втрачає стійкість і швидко переходить у стійкий стан в області високої густини дефектів (суцільні сегменти кривих 1–4). Цей перехід відображає ФП1 та відповідає інтенсивній стадії фрагментації, що супроводжується різким зменшенням розмірів зерен та покращенням фізико-механічних властивостей металу [3]. Відомо, що у випадку ФП1 система (матеріал) може одночасно функціонувати у двох метастабільних станах чи фазах [11, 47–50, 53, 54, 70, 71, 110, 121], що у такому випадку означає одночасне співіснування двох граничних структур з різними розмірами зерен (реалізація двох максимумів  $V(h_g)$ ).

Таким чином, видно, що процес фрагментації металеві структури почне протікати тільки за умови реалізації переходу від нульового значення максимуму ефективного потенціалу  $V(h_g)$  до ненульового, та у випадку, коли за певних умов (значень керувальних параметрів) зникає потенціальний “бар’єр”, що розділяє стійкі стани. У цілому, розглядаючи процес пружного стиснення металевого зразка, що реалізується при  $\varepsilon_{ii}^e < 0$ , очевидно, що криві 1–4 на рис. 2.1 характеризуються подібною поведінкою. Проте випадок, який представлено кривою 4, відрізняється, оскільки одночасне співіснування нульового і ненульового максимумів ефективного потенціалу є неможливим. Крім того, варто зазначити, що зменшення за абсолютним значенням внеску відносної деформації стиснення  $\varepsilon_{ii}^e$  призводить до зменшення області існування нестійкого розв’язку рівняння (2.12) (див. пунктирні частини кривих 1–4). Отже, за малих значень нормального тиску для реалізації СФП необхідні більші значення зсувних деформацій. Таким чи-

ном, зі збільшенням тиску поріг переходу до дрібнозернистого стану зменшується, що підтверджує експериментальні дослідження. Однак, як бачимо, у полі дії стискальних напружень  $\sigma_{ii}^e < 0$  та пов'язаних із ними деформацій, енергетичний “бар’єр” не зникає. Тільки в ході дослідження зворотного процесу, що відбувається при деформації розтягнення  $\varepsilon_{ii}^e > 0$ , рівняння (2.12) має один розв’язок (див. криву 5). Разом із тим, у матеріалі за механізмом ФП2 реалізується неперервний перехід від монокристала чи КЗПК до СМК або НК структури. Відзначимо, що розгляд процесу розтягнення виходить за межі досліджуваної нами області, оскільки при розтягненні у процес можуть залучитися й інші види дефектів, наприклад, мікротріщини, які можуть призвести до передчасного руйнування матеріалу.

Розглядаючи металевий зразок, що навпаки містить високу концентрацію структурних дефектів до початку ІПД, формування рівноважного стаціонарного стану з більш дрібнозернистою структурою є можливим навіть за невеликих додатних значень  $I_2$  (див. криву 4 на рис. 2.1): реалізується близьке до ненульового екстремуму максимальне значення  $V(h_g)$ . Однак, у разі зменшення додатної величини  $I_2$  чи дії гідростатичного тиску, що супроводжується виникненням від’ємних деформацій зсуву ( $I_2 < 0$ ) [114, 122], спостерігається зменшення густини МЗ за рахунок збільшення розмірів кристалітів (див. криві 1 – 3). Така поведінка дуже часто трапляється на практиці під час оброблення матеріалу методами ІПД [7, 10, 12, 72]. Зазначимо, що знак другого інваріанта  $I_2$  демонструє напрямок виникнення пружних напружень та пов’язаних із ними деформацій у матеріалі. Водночас формування додатних чи від’ємних значень можна пояснити за допомогою аналізу внесків компонентних складових, що входять до визначення другого інваріанта тензора пружних деформацій [122] (див. визначення (А.3) у додатку А). Таким чином, переважання зсувних компонентів тензора деформацій, які, відповідно до теорії пружності [114, 122], сприяють розвитку пластичної деформації, буде призводити до додатного внеску у співвідношенні (А.3). З цієї позиції, переважання нормальних складових дає негативний внесок. У роботі [7] подібний принцип відображається за умови реверсування деформації, що при-

зводить до розрядки дислокаційни скупчень. Водночас процес подрібнення зерен при деформаціях від'ємного знака починається лише після утворення достатньої кількості нових дислокаційних сполук. Таким чином, стверджується, що реверсування призводить до “лофтів” за деформацією, що зменшує її ефективність з точки зору процесу фрагментації. Проте зробити однозначний висновок стосовно внесків нормальних та тангенціальних складових неможливо, оскільки потрібно проводити додаткові дослідження.

Із фізичної точки зору, від'ємні значення  $I_2$  мають природу гідростатичного тиску (протидії), оскільки водночас нормальні деформації перешкоджають формуванню зсувних компонентів тензора. Відповідно до визначення (див. додаток А), другий інваріант у цьому випадку відображає формування від'ємних кутів між осями деформування, що на практиці може призвести до ущільнення та зростання зерен за рахунок реалізації механізму рекристалізації або коалесценції [10, 12, 72]. Зі зменшенням від'ємних значень  $I_2$  (або з підвищенням за абсолютною величиною гідростатичного тиску) процеси, що протікають усередині металевої структури, супроводжуються пониженням внутрішньої енергії. Вважається, що в полі дії стискаючих нормальних та тангенціальних напружень, у разі, коли другий інваріант має від'ємні значення ( $I_2 < 0$ ), атомарні площини стискаються (тобто кристалічна структура металу чи сплаву здійснює перерозподіл), формуючи разом із тим нові високоенергетичні кластерні сполуки. Разом із тим відбувається вагоме зменшення поверхневої енергії МЗ. Також можливі мартенситні перетворення, які супроводжуються зміною типу кристалічної решітки матеріалу [72, 73, 76, 123, 124] (наприклад, перехід з ГЩУ до ГЦК або ОЦК решітки) за рахунок надлишкової внутрішньої енергії, що отримується системою від зовнішнього джерела (установки ІПД). Проте на даному етапі дослідження зробити однозначний висновок стосовно впливу нормальних і тангенціальних складових тензора пружної деформації на структуру матеріалу неможливо, оскільки для цього потрібно проводити додатковий аналіз.

Отже, згідно з рис. 2.1, якщо зразок має високу концентрацією МЗ, то з підвищенням за абсолютною величиною від'ємних значень другого інваріанта,

спостерігається зменшення густини МЗ за рахунок зростання кристалітів (штрихові та суцільні частини кривих 1 – 3). Іншими словами, реалізується зворотний процес – знеміцнення. У випадку збільшення зсувної деформації – дефектність у матеріалі зростає, що навпаки супроводжується зміцненням структури та покращенням фізико-механічних властивостей. Ці закономірності зазвичай зустрічається на практиці, наприклад, при обробці сталі методом усебічного кування <sup>6</sup> [12]. В основі цього методу лежить багаторазове повторення вільного кування поряд зі зміною напрямку прикладення деформації, в результаті чого оброблення супроводжується динамічними процесами рекристалізації. Також у роботі [10], при вивченні процесу консолідації міді в умовах ІПДК, спостерігаються декілька механізмів зростання зерен, які по-різному проявляються залежно від сформованих розмірів кристалітів. Основною причиною зростання зерен, відповідно до експерименту, є процеси рекристалізації у результаті динамічної міграції МЗ та коалесценції сусідніх зерен внаслідок збігу їх розорієнтування під час ІПД. Також у роботі [11], при дослідженні ІПД Al-сплавів, виявлено що процес формування СМК та НК станів залежно від умов оброблення має циклічний характер та відбувається за рахунок подрібнення зернистої структури чи динамічної рекристалізації. Так, за встановленої кількості проходів та швидкості оброблення  $N \leq 2$ ,  $V \leq 300$  м/с формування СМК структури відбувається шляхом фрагментації комірок за рахунок вигину кристалічної решітки і зміни ротаційних мод деформації. У результаті утворена за таким механізмом структура складається з кристалітів, що розділені великокутовими нерівноважними межами та містять накопичення дислокацій. За умови  $V \geq 300$  м/с і  $N \geq 4$  формування СМК структури є результатом протікання зворотніх процесів і неперервної динамічної рекристалізації.

Розглядаючи загальну закономірність процесів ІПД, залежно від характеру прикладених сил, на початковій стадії в матеріалі виникають сильні інерційні сили (опір), оскільки міжатомні зв'язки протидіють прикладеним механічним напруженням. Однак із часом за рахунок роботи зовнішніх сил і супроводжу-

<sup>6</sup>Представлений підхід зазвичай реалізується за температур пластичної деформації (0,3 – 0,6)T<sub>пл</sub>.



ючих релаксаційних процесів хімічні зв'язки слабшають, що супроводжується зменшенням енергетичного “бар'єра” ефективного потенціалу. У результаті подальші навантаження призводять до перевпорядкування атомної структури за рахунок фрагментації зерен (поступово формується СМК або НК структура).

Оскільки різні напруження  $\sigma_{ij}$  та пов'язані з ними пружні деформації  $\varepsilon_{ij}^e$  призводять до формування областей з відповідними густинами МЗ  $h_g$ , виникає питання вивчення закономірностей, які дозволили б однозначно встановити зв'язок між пружними деформаціями та формуванням СМК або НК структур. Проведемо дослідження втрати стійкості стаціонарних станів  $h_g^m$  (розв'язків рівняння (2.12)), що відповідають екстремумам ефективного потенціалу  $V(h_g)$ , та визначимо критичні значення  $I_2$ , що дозволяють здійснити перехід між стаціонарними станами рівняння (2.12). Таким чином, знайдемо області формування різних граничних структур залежно від значень першого та другого інваріантів  $\varepsilon_{ii}^e$ ,  $I_2$ .

Поклавши  $h_g = 0$  у рівнянні (2.12), запишемо умову формування нульового максимуму ефективного потенціалу  $V(h_g)$  (2.11)

$$\varphi_{0g} + \varphi_{gD} \frac{\varphi_{0D}}{\varphi_{1D}} = 0. \quad (2.13)$$

Згідно з останнім, критичне значення для другого інваріанта набуває вигляду

$$I_2^c(\varepsilon_{ii}^e) = - \frac{1}{2(\varphi_{1D}\bar{\mu}_g + \varphi_{gD}\bar{\mu}_D)} \left[ \left( \frac{1}{2}\bar{M}_g\varphi_{1D} + \frac{1}{2}\bar{M}_D\varphi_{gD} \right) (\varepsilon_{ii}^e)^2 + \right. \\ \left. + (g_g\varphi_{1D} + g_D\varphi_{gD})\varepsilon_{ii}^e + (\varphi_{0g}^*\varphi_{1D} + \varphi_{0D}^*\varphi_{gD}) \right]. \quad (2.14)$$

Співвідношення (2.14) в координатах  $\varepsilon_{ii}^e - I_2$  представлено кривою 1' на рис. 2.2. Вона відображає критичний рівень для реалізації першого максимуму ефективного потенціалу  $V(h_g)$  при  $h_{g0} = 0$ . Для значень  $I_2$ , взятих нижче цієї кривої, можуть утворюватися нульові стаціонарні розв'язки  $h_{g0}$ . При перевищенні цього критичного рівня формуються відповідно тільки ненульові стійкі стани системи. Оскільки  $\varepsilon_{ii}^e$  є аргументом виразу (2.14), звідси випливає, що всі криві на рис. 2.1 починають формуватися у різних точках. Очевидно, що деформації, які визначаються співвідношенням (2.14), грають роль межі текучості, оскільки

ки процес фрагментації починає протікати тільки після досягнення пружними зсувними деформаціями представлених значень.

Критичні значення реалізації інших розв'язків стаціонарного рівняння (2.12) знаходимо за допомогою необхідної умови існування екстремумів (похідна за  $h_g$  від (2.12))

$$3\varphi_{3g}h_g^2 - 2\varphi_{2g}h_g + \left( \varphi_{1g} - \frac{\varphi_{gD}^2}{\varphi_{1D}} \right) = 0. \quad (2.15)$$

Очевидно, що розв'язки цього квадратного рівняння (2.15) дозволяють одержати граничні стаціонарні співвідношення для густини МЗ, що розділяють мінімум та ненульові максимуми ефективного потенціалу:

$$h_g^{c1,2} = \frac{2\varphi_{2g} \pm \sqrt{4\varphi_{2g}^2 - 12\varphi_{3g} \left( \varphi_{1g} - \frac{\varphi_{gD}^2}{\varphi_{1D}} \right)}}{6\varphi_{3g}}. \quad (2.16)$$

Для визначення критичних значень другого інваріанта, що відповідають  $h_g^{c1,2}$ , виразимо  $I_2$  з рівняння (2.12)

$$\begin{aligned} I_2(\varepsilon_{ii}^e, h_g^c) = & -\frac{1}{2(\varphi_{1D}\bar{\mu}_g + \varphi_{gD}\bar{\mu}_D)} \left[ \left( \frac{1}{2}\bar{M}_g\varphi_{1D} + \frac{1}{2}\bar{M}_D\varphi_{gD} \right) (\varepsilon_{ii}^e)^2 + \right. \\ & + (g_g\varphi_{1D} + g_D\varphi_{gD}) \varepsilon_{ii}^e + \varphi_{0g}^*\varphi_{1D} + \varphi_{0D}^*\varphi_{gD} - \\ & \left. - (\varphi_{1g}\varphi_{1D} - \varphi_{gD}^2) h_g^c + \varphi_{1D}\varphi_{2g} (h_g^c)^2 - \varphi_{1D}\varphi_{3g} (h_g^c)^3 \right]. \quad (2.17) \end{aligned}$$

Здійснюючи підстановку значень (2.16) до виразу (2.17), отримуємо межі втрати стійкості стаціонарних станів системи (розв'язків рівняння (2.12)) та, відповідно, екстремумів ефективного потенціалу  $V(h_g)$ .

Таким чином, одержані залежності (2.14) та (2.17) при підстановці значень (2.16) визначають ФД режимів фрагментації металу або сплаву (рис. 2.2). Збіжні лінії відповідають граничним значенням пунктирних сегментів на рис. 2.1, що розраховуються для визначеного діапазону  $\varepsilon_{ii}^e$ . Крім того, точка, в якій сходяться ці криві, відображає межу зникнення мінімуму ефективного потенціалу (енергетичного "бар'єра").

Видно, що ФД на рис. 2.2 утворює чотири області фрагментації металевих зразків. Разом із тим поведінку ефективного потенціалу  $V(h_g)$  (2.11) у кожній

області представлено відповідними кривими на рис. 2.3. Отже, формування стаціонарних станів чи максимумів  $V(h_g)$  визначається за допомогою керувальних параметрів теорії – значень  $\varepsilon_{ii}^e$  та  $I_2$ .

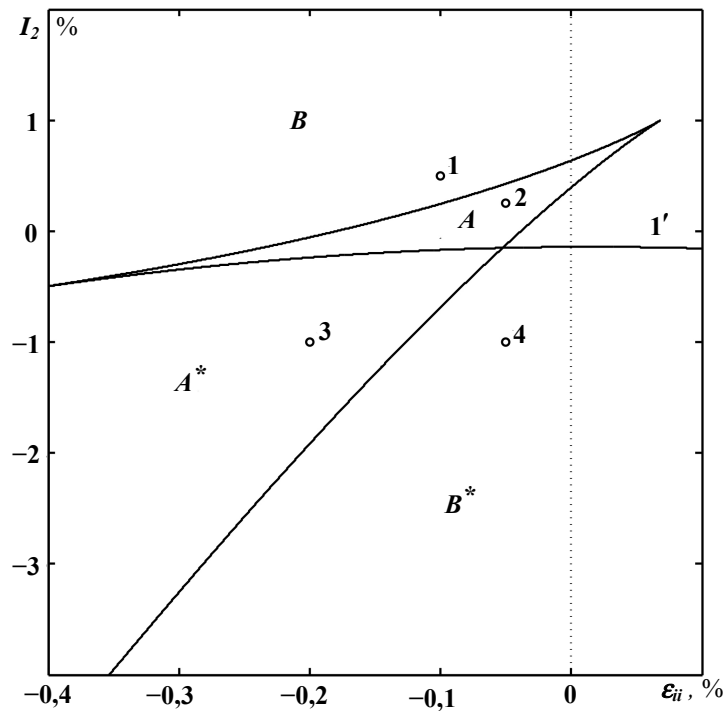


Рис. 2.2. Фазова діаграма режимів фрагментації з областями формування двох ( $A, A^*$ ) та однієї ( $B, B^*$ ) граничних структур

В області  $A$  реалізуються два ненульових максимуми ефективного потенціалу (крива 2 на рис. 2.3). Разом із тим можливе одночасне співіснування двох граничних структур із великими розмірами зерен (перший максимум) і більш дрібною СМК або НК структурою (другий максимум). Область  $A^*$  істотно відрізняється від області  $A$  тим, що перший максимум ефективного потенціалу набуває нульового значення для густини дефектів  $h_{g0} = 0$  (крива 3 на рис. 2.3). У цьому випадку вважається, що канал дисипації енергії, який пов'язаний з утворенням дефектних структур не працює, а зразок є монокристалом або має близьку до нього структуру (КЗПК). Однак, як показано кривою 3, формування першого максимуму  $V(h_g)$  відбувається у від'ємній області ( $h_g < 0$ ), що позбавлено фізичного змісту. Тому вважаємо, що при досягненні нульового значення густина МЗ перестав спадати і розглянута система продовжує функціонувати в режимі  $h_g = 0$ .

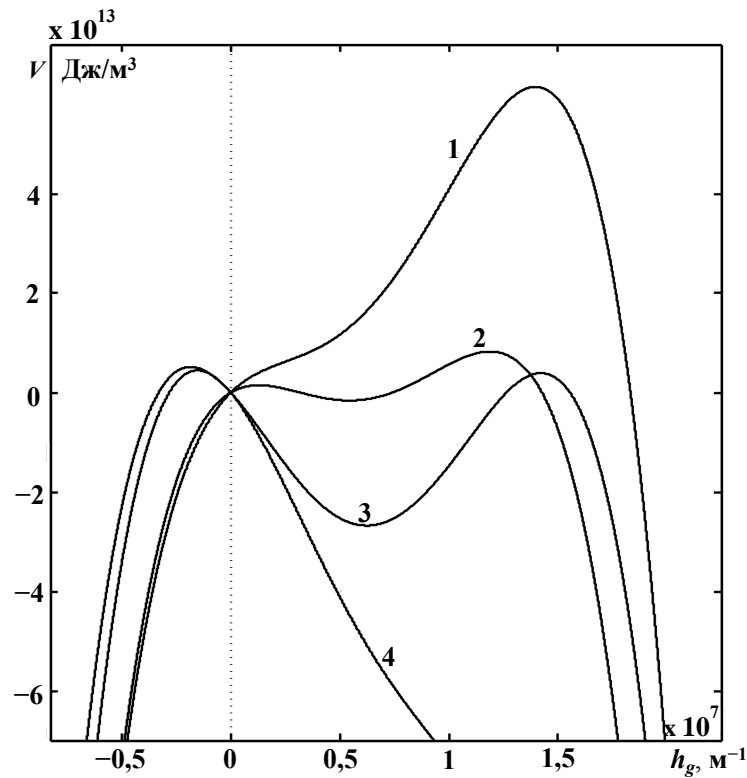


Рис. 2.3. Форма ефективного потенціалу  $V(h_g)$  Дж/м<sup>3</sup> (2.11) в залежності від густини МЗ  $h_g$  м<sup>-1</sup>. Криві 1–4 побудовано для значень інваріантів  $I_2 = (5 \cdot 10^{-4}; 2,5 \cdot 10^{-4}; -10^{-3}; -10^{-3})\%$  та  $\varepsilon_{ii}^e = (-0,1; -0,05; -0,2; -0,05)\%$  (відповідні точки 1–4 на рис. 2.2)

Аналогічно розмірковуючи, єдиний нульовий максимум  $V(h_g)$  (крива 4 на рис. 2.3), що відповідає реалізації монокристала чи КЗПК, формується в області малих деформацій  $B^*$ . Однак видно, що екстремальне значення, аналогічно до кривої 3, формується за від'ємного значення густини МЗ. Виходячи з вищевикладених міркувань, вважаємо, що система з довільного нерівноважного стану буде слідувати та функціонувати виключно у режимі  $h_g = 0$ . За умови великих деформацій з області  $B$ , можливе утворення тільки однієї граничної структури. Водночас підвищення пружних зсувних деформацій  $I_2$  дозволяє отримати граничну структуру з більш дрібними розмірами зерен (СМК або НК), яка на границі  $I_2 \rightarrow \infty$  представлятиме аморфну структуру. Відзначимо, що подібний процес аморфізації кристалічного NdFeB-сплаву під час ІПДК спостерігався у роботі [71].

У той же час, реальній поведінці матеріалів під час ІПД найбільше відповідають криві 1 та 2. У випадку кривої 1, еволюція системи на початковій стадії

протікає повільно, відповідно до нахилу кривої внутрішньої енергії, а потім різко прискорюється на крутій ділянці кривої внутрішньої енергії. Остання стадія відповідає активному режиму фрагментації матеріалу в процесі ІПД.

У цілому одержані залежності ефективного потенціалу  $V(h_g)$  на рис. 2.3, що в рамках густини МЗ відповідають розвиненню внутрішньої енергії  $u$  (2.1), формують множину розв'язків відносно значень пружної деформації  $\varepsilon_{ij}^e$ . Разом із тим, еволюція дводефектної системи до стаціонарних станів внутрішньої енергії, що визначається рівнянням (2.11), за визначених умов (при фіксованих значеннях  $\varepsilon_{ii}^e$  і  $I_2$ ) та встановлених параметрах теорії (наведено у таблиці 2.1) реалізується уздовж однієї кривої з цієї множини. Вважається, що внутрішня енергія системи може характеризуватися такою поведінкою в тому випадку, коли матеріал за допомогою ІПД деформується з рівномірною швидкістю, але водночас не зміцнюється або здійснюється процес зміцнення, але швидкість деформування у процесі оброблення зменшується [32]. У разі, коли матеріал зміцнюється й деформується з постійною швидкістю, еволюція кристалічної структури для певного етапу буде описуватися різними кривими.

Слід зазначити, що перехід між граничними структурами, які характеризуються наявністю кристалітів різних розмірів, може реалізуватися безпосередньо під час ІПД [11, 70–72, 110]. Після зупинки оброблення дефектна структура далі не еволюціонує та залишається в тому стані, в якому вона перебувала на момент припинення процесу, оскільки для подальшої еволюції у будь-якому напрямку необхідне виникнення пластичної течії. Водночас, може відбуватися деяка теплова релаксація, проте вона практично не зачіпає дефектну структуру. У цьому випадку можливі лише незначні перерозподіли компонентного складу, у разі сплавів, або перерозподіли точкових дефектів. Разом із тим, система прийде до теплової рівноваги, проте у ряді випадків імовірна реалізація нестійкого структурного стану. Крім того, умови оброблення: швидкість деформування, температура і прикладений тиск – є важливим фактором для отримання зразка з СМК чи НК структурою. Тому, слід пам'ятати, що отримані розміри кристалітів є граничними лише за певних умов деформування.

Таким чином, одержана ФД на рис. 2.2 дозволяє у загальному вигляді зобразити можливі сценарії та режими поведінки системи еволюційних рівнянь, і може зіграти важливу роль з точки зору технічних застосувань запропонованої моделі.

### 2.3. Кінетика дводефектної підструктури в ході ІПД

Дослідимо еволюцію структурних дефектів під час ІПД. Нагадаємо, що кінетика густин обраних видів дефектів задається нормальною системою ЗДР першого порядку (2.7), (2.8). Оскільки у попередньому підрозділі 2.2 досліджено поведінку системи в рамках адіабатичного наближення  $\tau_{h_g} \gg \tau_{h_D}$ , що дозволило одержати кінетичне рівняння Ландау – Халатнікова для густини МЗ (2.9) та побудувати ФД можливих режимів фрагментації, проведемо числовий розрахунок та вивчимо процес формування стаціонарних станів системи ЗДР (2.7), (2.8) відносно нерівноважних змінних  $h_m$  ( $m = g, D$ ). Отримані результати порівняємо з розв'язком рівняння Ландау – Халатнікова (2.9). Таким чином, встановимо правомірність розгляду адіабатичного наближення для даної моделі.

Поклавши праві частини системи ЗДР (2.7), (2.8) рівними нулю

$$\varphi_{0D} - \varphi_{1D}h_D + \varphi_{gD}h_g = 0, \quad (2.18)$$

$$\varphi_{0g} - \varphi_{1g}h_g + \varphi_{2g}h_g^2 - \varphi_{3g}h_g^3 + \varphi_{gD}h_D = 0, \quad (2.19)$$

проведемо аналіз формування можливих стаціонарних станів (розв'язків). Рівняння (2.18) є лінійним відносно густини дислокацій  $h_D$ , а отже, при  $\varphi_{gD} = 0$  матиме тільки один розв'язок. Рівняння (2.19), відповідно до запропонованої моделі, при  $\varphi_{gD} = 0$  може мати три розв'язки, два з яких визначають формування стійких граничних структур (максимумів ефективного потенціалу  $V(h_g)$ ). Однак, при  $\varphi_{gD} \neq 0$  структурні дефекти інших рівнів впливають на хід еволюції дводефектної підструктури та, відповідно, формування стаціонарних станів. Очевидно, що розв'язки системи (2.18), (2.19) відображають функціонування відповідних густин дефектів у стаціонарних режимах. Таким чином, дводефектна система, що визначає еволюцію кристалічної структури, з довільного нерівно-

важного стану (фази) повинна прямувати під час оброблення ІПД до цих режимів та в певний момент часу досягнути їх.

В адіабатичному наближенні  $\tau_{h_g} \gg \tau_{h_D}$  (поклав  $\tau_{h_D} \approx 0$ ), густини дислокацій набувають стаціонарного значення:

$$h_D = \frac{\varphi_{gD}}{\varphi_{1D}} h_g + \frac{\varphi_{0D}}{\varphi_{1D}}, \quad (2.20)$$

що лінійно залежить від  $h_g$  (тобто  $h_D$  еволюціонує відповідно до принципу підпорядкування). У випадку  $h_g = 0$  густина дислокацій є постійною величиною.

Безумовно, в цілому, режим фрагментації металу чи сплаву під час ІПД повністю визначається вихідним набором параметрів і коефіцієнтів  $\varphi_{0g}, \varphi_{1g}, \varphi_{2g}, \varphi_{3g}, \varphi_{0D}, \varphi_{1D}$ . У зв'язку з цим, дослідження впливу параметрів теорії на еволюцію дефектної підструктури та формування СМК чи НК структури, яка визначає фізичні та механічні властивості металу чи сплаву, набуває вагомого значення. Фундаментальними з цієї точки зору є роботи Л. С. Метлова, зокрема, в роботі [93] прямими розрахунками проведено досить повне дослідження впливу основних коефіцієнтів енергетичного виразу (2.1) на кінетику встановлення рівноважних значень відповідних типів дефектів. Так, різні варіації виділеного набору параметрів ( $g_m, e_m, \bar{\mu}_m, \bar{\lambda}_m, \varphi_{2g}, \varphi_{3g}, \varphi_{gD}$ ) дозволили встановити природу впливу кожного з них. Залежно від характеру прикладених пружних деформацій  $\varepsilon_{ij}^e$  параметри виступають в якості як гідростатичного тиску (протитиску), що уповільнює процес фрагментації, так і негідростатичного впливу, що є основною причиною утворення дефектів.

Перейдемо до задачі Коші: доповнимо систему ЗДР (2.7), (2.8) та рівняння Ландау – Халатнікова (2.9) початковими умовами  $h_m(t_0) = h_{m0}$ , де  $m = g, D$ . Застосовуючи числовий метод Рунге – Кутта 4-го порядку точності, отримуємо частинні розв'язки релаксаційних послідовностей <sup>7</sup>, що представлені на рис. 2.4. Взаємодію структурних дефектів у процесі фрагментації при ІПД наведено на рис. 2.5. Випадки а - г відповідають реалізації граничних структур для всіх можливих режимів фрагментації, які представлено ФД на рис. 2.2, за різних

<sup>7</sup>Як відомо, диференціальне рівняння в загальному випадку має безліч розв'язків (сімейство інтегральних кривих).

початкових умов.

Для числового розрахунку кінетики системи обрано два варіанти початкових умов. У першому випадку густина МЗ набуває значення  $h_{g0} = 100 \text{ м}^{-1}$ , а густина дислокацій –  $h_{D0} = 10^{10} \text{ м}^{-2}$ . У другому випадку  $h_{g0} = 2,5 \cdot 10^7 \text{ м}^{-1}$  та  $h_{D0} = 2,5 \cdot 10^{16} \text{ м}^{-2}$ . Початкові значення для  $h_D$  обираються у відповідності до кривої Одінга-Бочварова (рис. 2.6) [125], яка схематично показує залежність міцності металів чи сплавів від густини дислокацій у них. Згідно з кривою на рис. 2.6, чисті знеміцненні метали в середньому мають густину дислокацій близько  $h_D = 10^{10} - 10^{12} \text{ м}^{-2}$ . Наприклад, у ході вивчення структурної будови та фазового складу алюмінієвих сплавів (Al-Zn, Al-Mg та Al-Mg-Zn) в умовах ІПДК [13] емпірично встановлено, що до початку процесу оброблення у зразках спостерігалася густина дислокацій  $h_D = 10^{10} \text{ м}^{-2}$  та розмір зерен становив  $d = 500 \text{ мкм}$ . Крім того, матеріали, що мають густину дислокацій у межах наведеного діапазону, характеризуються мінімальною міцністю (відпалені метали або сплави), якій відповідає межа текучості  $\sigma_T = 10^{-5} - 10^{-4} \mu \text{ Па}$ , де  $\mu$  – модуль зсуву. На підставі даних, одержаних під час вивчення зміцнених матеріалів, залежно від способу оброблення і хімічного складу досліджуваного зразка, густина дислокацій у середньому може набувати значень в інтервалі  $h_D = 10^{14} - 10^{17} \text{ м}^{-2}$  [10, 13, 25]. У разі густини МЗ  $h_g$ , експериментально виявлено стаціонарні значення становлять  $h_g^{st1} = 10^4 \text{ м}^{-1}$  та  $h_g^{st2} = 10^7 \text{ м}^{-1}$ , яким відповідають середні розміри зерен 100 мкм і 100 нм [3, 10–13, 70, 71, 110]. Таким чином, розглянуті варіанти початкових наближень визначають чисті знеміцненні та високодефектні зміцнені метали чи сплави.

Відповідно до представлених на рис. 2.4 та рис. 2.5 часових залежностей, обрані дефектні структури тісно взаємодіють одне з одною у процесі встановлення стаціонарного стану. Водночас, система, що визначається нерівноважними параметрами, зазнає СФП, оскільки еволюція густини дефектів у процесі фрагментації характеризується різкими переходами від низьких значень до більш високих, або ж навпаки. Найбільш явно така поведінка спостерігається на рис. 2.4а. Видно, що при різних початкових умовах  $h_m(t_0) = h_{m0}$  ( $m = g, D$ ) формується



єдиний стаціонарний стан для густини МЗ (крива 2). Отримана гранична структура реалізується відповідно до області великих деформацій  $B$  на ФД (рис. 2.2) за нормального  $\sigma_{ii}^e \approx -10^{-3}\mu$  Па та зсувного  $\sigma_{ij}^e \approx 2,2 \cdot 10^{-3}\mu$  Па пружних напружень<sup>8</sup> (точка 1 на рис. 2.2).

Таким чином, матеріал, що має знеміцнену структуру (з початковою концентрацією дефектів  $h_{g0} = 100\text{м}^{-1}$  та  $h_{D0} = 10^{10}\text{м}^{-2}$ ), на початковій стадії оброблення демонструє різке збільшення густини дислокацій (крива 1 на рис. 2.4а), яка практично відразу досягає стаціонарного рівня, що описується рівнянням (2.20) (штрихпунктирна крива на рис. 2.4а). У результаті, в матеріалі починаються СФП, що сприяють збільшенню протяжності МЗ (активується режим фрагментації кристалітів). У подальшому під час СФП, коли густина дислокацій практично перестає змінюватися (крива 1 на рис. 2.4а), у певний момент відбувається різке збільшення густини МЗ (крива 2), що у свою чергу сприяє додатковому підвищенню концентрації дислокацій. Водночас, вигляд еволюційної кривої для густини дислокації деякою мірою повторює характер змін  $h_g$ . На цьому етапі мікроструктура досліджуваного зразка досягає стадії “насичення”, що призводить до зміцнення матеріалу. Відзначимо, що така поведінка є типовою на практиці. Так, дослідження процесу консолідації нерозмелених порошків міді при ІПДК [10], які мають малу густину дислокацій та великі розміри зерен, показує, що процес еволюції мікроструктури починає реалізуватися з накопичення, рекомбінації та перерозподілу  $h_D$ , у результаті чого утворюються комірочки та зерна з малокутовою розорієнтацією (див. криві 3, 4 на рис. 2.7), які з подальшим підвищенням ступеня деформації трансформуються у великокутові межі.

У цілому, узгодженість еволюції структурних дефектів у часі, в тому числі за рахунок їхньої взаємодії у процесі ІПД, представлено на рис. 2.5а (штрихова крива 1). Таким чином, у результаті ІПД у матеріалі формується НК структура, де густини дефектів досягають значень  $h_g^{st} \approx 1,4 \cdot 10^7\text{м}^{-1}$  та  $h_D^{st} = 0,9 \cdot 10^{16}\text{м}^{-2}$ , що добре узгоджується з експериментальними роботами [3, 10, 13] та кривою (зміц-

<sup>8</sup>Вважається, що пружні напруження визначаються наближено за допомогою закону Гука. Величина  $\mu$  – модуль зсуву для відповідного матеріалу.

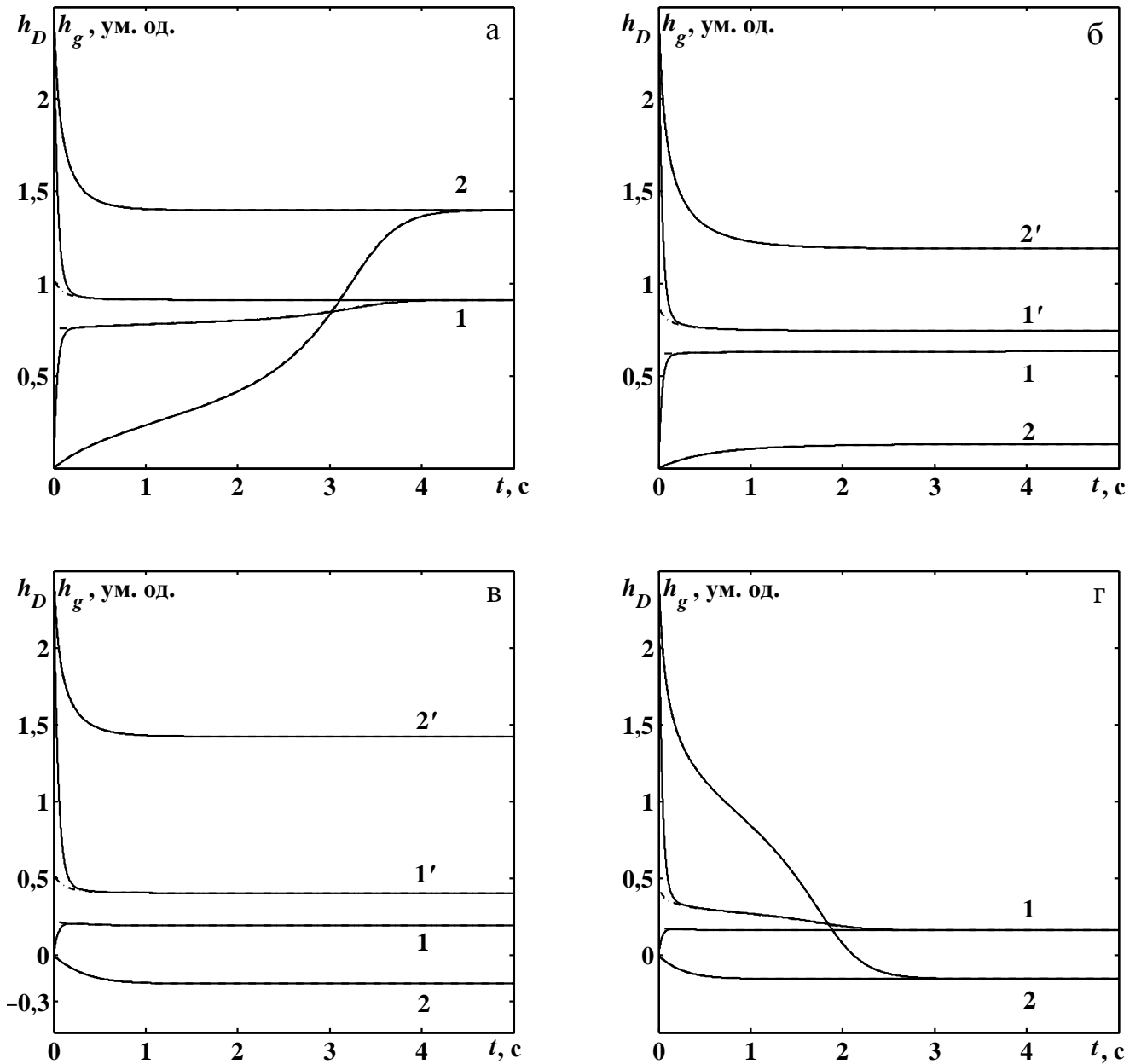


Рис. 2.4. Кінетика фрагментації металів чи сплавів у процесі ПД. Криві 1 та 1' представляють еволюцію густини дислокацій  $h_D(t)$ , а криві 2 та 2' відповідають часовим змінам густини МЗ  $h_g(t)$ , що є розв'язками системи (2.7), (2.8). Штрихові криві відображають еволюцію густини МЗ  $h_g(t)$  у відповідності до розв'язків рівняння (2.9). Штрихпунктирні залежності демонструють стаціонарний розв'язок  $h_D(t)$  згідно з визначенням (2.20). Релаксаційні залежності на рисунках а – г відповідають точкам 1 – 4 на ФД (рис. 2.2). Для розрахунків прийнято наступні значення кінетичних коефіцієнтів  $\gamma_D = 1/\tau_{h_D} = 3 \cdot 10^{25} \text{ Дж}^{-1} \cdot \text{м}^{-1} \cdot \text{с}^{-1}$ ,  $\gamma_g = 1/\tau_{h_g} = 10^6 \text{ Дж}^{-1} \cdot \text{м} \cdot \text{с}^{-1}$  та крок за часом  $dt = 6 \cdot 10^{-7} \text{ с}$ . Час  $t$  вимірюється в с

нення) Одінга-Бочварова [125]. Разом із тим, середній розмір зерен становить близько 70 нм.

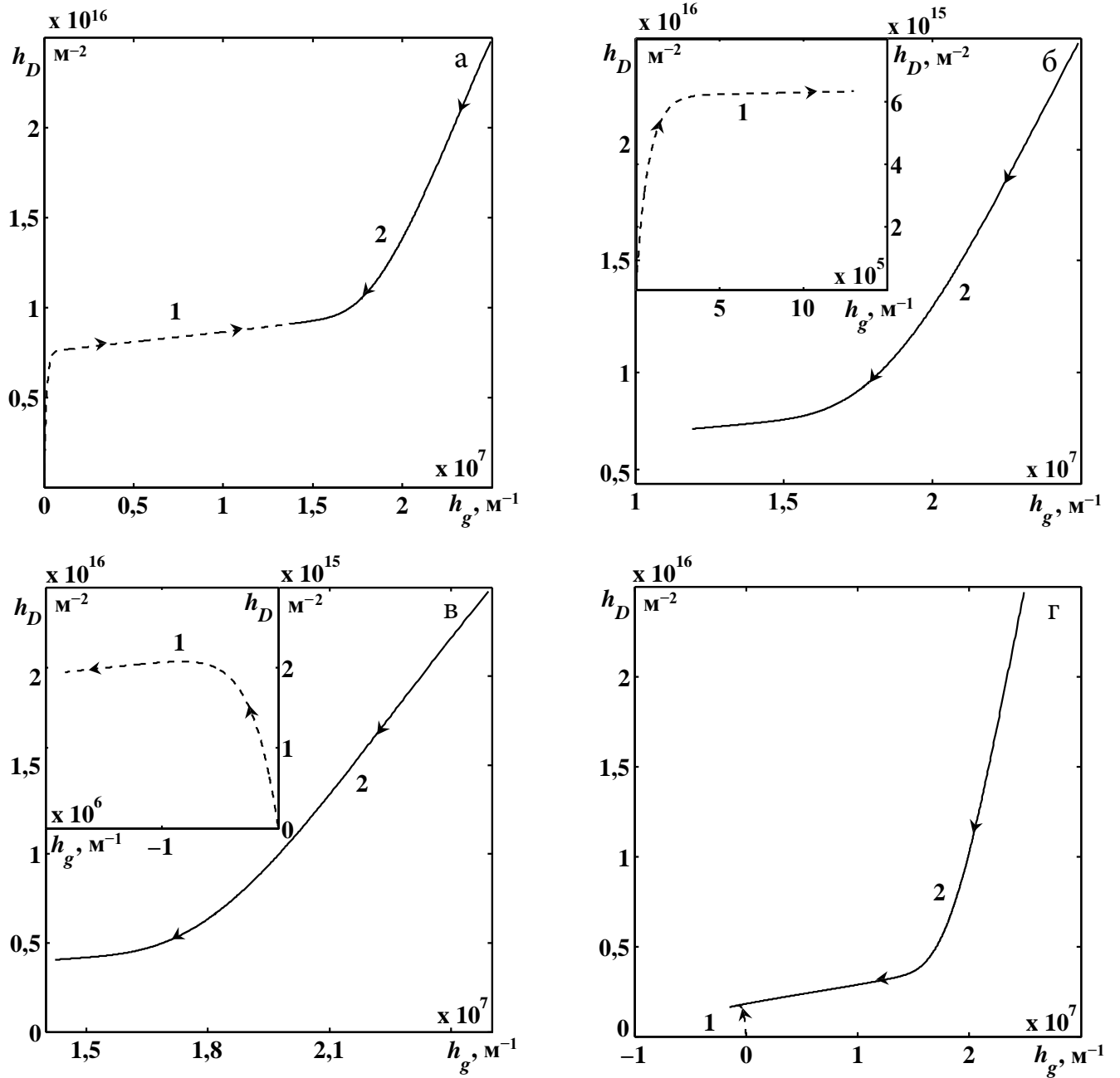


Рис. 2.5. Кореляційна залежність зміни густини МЗ  $h_g$  від значень густини дислокацій  $h_D$  в процесі ПД. Рисунок а – г побудовано на основі тих же параметрів, що і рис. 2.4 для відповідних випадків. Криві 1 та 2 (штрихові і суцільні лінії) відображають узгодженість еволюції дефектів для різних початкових умов ( $h_{g0} = 100 \text{ м}^{-1}$ ,  $h_{D0} = 10^{10} \text{ м}^{-2}$  та  $h_{g0} = 2,5 \cdot 10^7 \text{ м}^{-1}$ ,  $h_{D0} = 2,5 \cdot 10^{16} \text{ м}^{-2}$  відповідно)

Розглядаючи матеріали, що до початку ПД мають високодефектну структуру з густинами  $h_{g0} = 2,5 \cdot 10^7 \text{ м}^{-1}$  та  $h_{D0} = 2,5 \cdot 10^{16} \text{ м}^{-2}$  спостерігаються зворотні процеси зменшення. Вважається, що структура досліджуваного зразка перебуває у фазі “перенасичення”, що активує різного роду релаксаційні про-

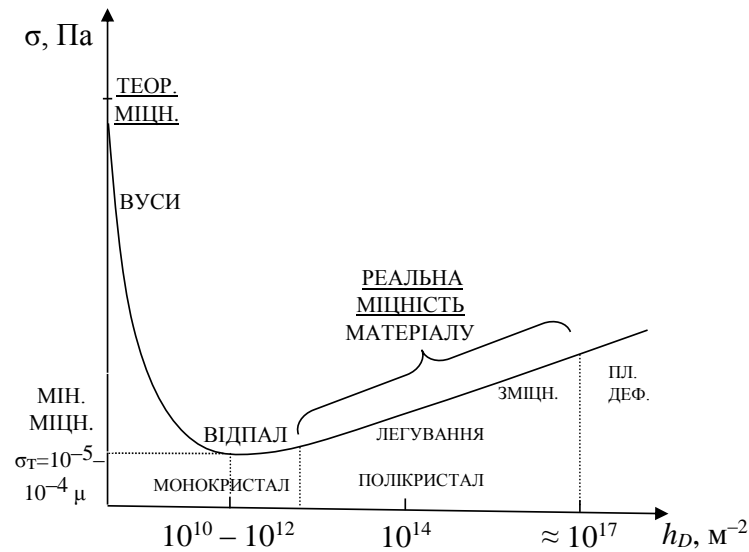


Рис. 2.6. Крива Одінга-Бочварова [125]

цеси. Відтак на початковій стадії оброблення відбувається інтенсивна анігіляція дислокацій, яка супроводжується рекристалізацією зернистої структури шляхом активації процесу взаємного поглинання, що призводить до різкого зменшення поверхневої енергії МЗ. У результаті нерівноважні параметри досліджуваної системи еволюціонують до більш енергетично вигідних станів із оптимальними середніми розмірами зерен.

Про кореляцію дефектних підструктур при ІПД для зазначеного випадку свідчить суцільна крива 2 на рис. 2.5а. З рисунку видно, що взаємообумовлений спад густин дефектів має експоненціальний характер, оскільки залежність до певного моменту має лінійний вид. Крім того, очевидно, що кореляційні криві 1 та 2, які відповідають різним початковим умовам, сходяться (з урахуванням масштабів осей) в одній точці, що підтверджує формування єдиної граничної структури з відповідними розмірами зерен для обох випадків. Варто зазначити, що процес формування граничної структури реалізується за механізмом ФП2, оскільки за визначених умов оброблення, що відповідають області *B* на ФД (точка 1 на рис. 2.2), потенціальний “бар’єр”, що відповідає мінімуму ефективного потенціалу  $V(h_g)$  (крива 1 на рис. 2.3), відсутній, а отже здійснюється безперервний процес фрагментації кристалічної структури.

Розглядаючи внутрішні процеси для знеміцнених матеріалів, слід зазначити, що на початкових етапах фрагментації за рахунок утворення дефектів відбувається енергетичне “накачування” системи, що проявляється у зростанні її внутрішньої енергії. Однак, починаючи з деякого моменту деформування, сумарне зростання енергії МЗ підвищує загальний рівень нерівноважності системи <sup>9</sup>, що активізує протилежно спрямовані процеси анігіляції дефектів за рахунок рекристалізації чи коалесценції зерен. У стаціонарному (рівноважному) стані обидва ці процеси динамічно урівноважують один одного. Слід підкреслити, що дефектна структура у рівноважному стані не перестає змінюватися, але ці зміни в середньому взаємно компенсаторні. Разом із тим, реалізація як прямих процесів, що пов’язана з генерацією дефектів, так і зворотних, що відображають їх анігіляцію, продовжує ефективно дисипувати енергію, перетворюючи роботу зовнішніх сил у теплоту.

Часові послідовності, що описують можливість реалізації двох граничних структур, відповідно до області  $A$  на рис. 2.2, залежно від початкової концентрації дефектів і прикладених пружних деформацій, яким у даному випадку відповідають нормальні  $\sigma_{ii}^e \approx -5 \cdot 10^{-4} \mu \text{Па}$  та зсувні  $\sigma_{ij}^e \approx 1,6 \cdot 10^{-3} \mu \text{Па}$  пружні напруження (точка 2 на ФД), представлено на рис. 2.4б. Очевидно, що система функціонує у двох стаціонарних режимах, які відповідають реалізації ненульових максимумів  $V(h_g)$  (див. криву 2 на рис. 2.3). Відмітимо, що формування стаціонарних значень спостерігається як для густини МЗ (залежно від початкових умов криві 2 та 2’), так і для густини дислокацій (відповідно криві 1 і 1’), що цілком логічно, оскільки еволюційне рівняння (2.7) залежить від параметра  $h_g$ .

Відносно знеміцнених чи відпалених металевих матеріалів, застосування ІПД дозволяє сформувати першу граничну структуру, в якій густини дефектів набувають значень  $h_g^{st1} \approx 1,3 \cdot 10^6 \text{ м}^{-1}$  (крива 2) і  $h_D^{st1} \approx 6,3 \cdot 10^{15} \text{ м}^{-2}$  (крива 1), що демонструє непогане зміцнення фрагментованого зразка (реалізуєть-

<sup>9</sup>Таким чином, сформована конфігурація стає нерівноважною, тому на енергетичному рівні більш вигідні зворотні процеси.

ся СМК структура з середніми розмірами зерен  $d \sim 0,77$  мкм). Очевидно, що взаємодія структурних дефектів різних рівнів має інтенсифікаційний (посилювальний) вплив на процес встановлення стаціонарного режиму та формування граничної структури [126]. Згідно з кривою 1 на рис. 2.4б видно, що густина дислокацій досягає свого стаціонарного значення (штрихпунктирна крива) вже на початковому етапі оброблення. У свою чергу, густина МЗ (крива 2) до цього моменту свого стаціонарного стану ще не досягає та продовжує зростати. Ця поведінка добре простежується у характері кореляційної залежності, що представлена штриховою кривою 1 на рис. 2.5б. У подальшому на ділянці, де густина МЗ зростає найшвидше (майже горизонтальний сегмент), видно, що еволюція густини дислокацій продовжує реагувати на збільшення концентрації МЗ та дещо підвищує рівень формування стаціонарного стану. Таким чином, можна стверджувати, що еволюція дислокацій підготує умови для настання активної стадії фрагментації. У свою чергу еволюція МЗ, після досягнення певного значення, впливає на розмноження дислокацій. Оскільки зростання густини дислокацій призводить до збільшення поля внутрішніх напружень  $\sigma_{ij}$ , тому саме еволюція  $h_D$  сприяє процесу фрагментації зернистої структури. Відзначимо, що описана поведінка структурних дефектів під час ІПД відповідає так званим процесам самоорганізації [119].

Кінетичні криві 1' і 2' на рис. 2.4б відображають формування другої граничної структури з відповідними густинами дефектів  $h_D^{st2} \approx 7,45 \cdot 10^{15} \text{ м}^{-2}$  та  $h_g^{st2} \approx 1,2 \cdot 10^7 \text{ м}^{-1}$ . У процесі еволюції густини дислокацій та МЗ релаксують до більш енергетично вигідної НК структури з оптимальними середніми розмірами зерен ( $d \sim 83$  нм), що супроводжується різким зменшенням  $h_D$  (крива 1') і супутніми процесами зростання кристалітів, за рахунок зниження  $h_g$  (крива 2'). Взаємодію дефектних підструктур під час реалізації зворотного процесу знеміцнювання представлено суцільною кривою 2 на рис. 2.5б.

Розглядаючи пружні деформації з області  $A^*$  на рис. 2.2, яким відповідають зсувні  $\sigma_{ij}^e \approx -3,1 \cdot 10^{-3} \mu\text{Па}$  та нормальні  $\sigma_{ii}^e \approx -2 \cdot 10^{-3} \mu\text{Па}$  пружних напружень (точка 3 на ФД), формально можлива реалізація двох граничних структур, що

тотожно області  $A$ . Проте, за визначених умов перший стаціонарний стан формується у від'ємному діапазоні значень, що не має фізичного сенсу. Тому, слід вважати, що при досягненні нульового значення густина МЗ переходить до режиму  $h_g = 0$ . У результаті, як показано на рис. 2.4в і рис. 2.5в, залежно від початкової концентрації дефектів у досліджуваному зразку, може реалізуватися як монокристал чи КЗПК (формується стаціонарні значення, що представлено кривими 1, 2 на рис. 2.4в та штрихова крива 1 на рис. 2.5в), так і дрібнозерниста гранична структура з густиною дефектів  $h_D^{st2} \approx 4 \cdot 10^{15} \text{ м}^{-2}$  та  $h_g^{st2} \approx 1,4 \cdot 10^7 \text{ м}^{-1}$  та середніми розмірами зерен  $d \sim 70 \text{ нм}$  (відповідно криві 1', 2' на рис. 2.4в і суцільна крива 2 на рис. 2.5в). Питання про те, чи може цей випадок бути реалізований на реальних матеріалах, тобто чи є матеріали з таким набором параметрів, залишається відкритим.

Очевидно, що еволюція густини дефектів для випадків, які представлено на рис. 2.4б, в, здійснюється за сценарієм ФП1, оскільки система може мати два метастабільних стани, перехід між якими можливий за умови прикладення пружних напружень та пов'язаних з ними деформацій, що сприяють подоланню потенціального "бар'єра"  $V(h_g)$  (див. криві 2 і 3 на рис. 2.3).

Області малих деформацій  $B^*$  при визначених значеннях зсувного  $\sigma_{ij}^e \approx -3,1 \cdot 10^{-3} \mu \text{ Па}$  та нормального  $\sigma_{ii}^e \approx -5 \cdot 10^{-4} \mu \text{ Па}$  пружних напружень (точка 4 на рис. 2.2) відповідають представленим на рис. 2.4г та 2.5г кінетичним залежностям за різних початкових умов. Оскільки ефективний потенціал  $V(h_g)$  при заданих умовах має єдиний максимум у від'ємній області  $h_g < 0$  (див. криву 4 на рис. 2.3), часові залежності для  $h_g$  (криві 2 на рис. 2.4г та криві 1, 2 на рис. 2.5г) також прагнуть до цього значення. Однак, як і в попередньому випадку, вважаємо, що система еволюціонує в режимі  $h_g = 0$ , що відповідає формуванню монокристала чи КЗПК структури. Зазначимо, що цей випадок, як і попередній, розглянуто для повноти аналізу системи еволюційних рівнянь і питання про його реалізацію в реальних матеріалах також залишається відкритим.

У цілому, формування тієї чи іншої граничної структури напряму залежить

від початкового стану зразка (хімічного складу, фаз речовини і кількості структурних дефектів  $h_m$ , де  $m = g, D$ ) і може здійснюватися виключно в разі ІПД за визначених умов: кількість проходів, швидкість деформації, температура та прикладений тиск [3, 10, 13, 111, 126–130]. У загальному випадку, перехід між граничними структурами може реалізуватися за допомогою збільшення ступеня деформації. Так, експериментальне дослідження еволюції структури міді при консолідації порошків в умовах ІПДК [10] показало можливість формування граничних структур із середніми розмірами зерен  $d \approx 100$  нм та густиною дислокацій  $h_D \approx 2 \cdot 10^{15} \text{ м}^{-2}$  залежно від початкової фази порошку. Застосування вихідних порошків, що мають малу густину дислокацій та великі розміри зерен, призвело до подрібнення зернистої структури шляхом накопичення  $h_D$  (криві 3, 4 на рис. 2.7). Застосування ІПДК для консолідації криогенно розмелених порошків (криві 1, 2 на рис. 2.7), які навпаки мають високу концентрацією дислокацій та малі розміри кристалітів, також зумовило формування близької стаціонарної структури. Однак, процес встановлення рівноважного стану супроводжувався анігіляцією дислокацій і зростанням зерен. Крім того, у представлений роботі виявлено основні механізми зростання зерен залежно від їхніх розмірів: процес коалесценції – злиття розорієнтації сусідніх НК під час їх розвороту та обертання; процес рекристалізації – міграція МЗ. Згідно з рис. 2.7, еволюція структурних дефектів залежно від кількості проходів має якісну кореляцію з одержаними на рис. 2.4 часовими залежностями.

Моделювання кінетики структурних дефектів показує, що еволюція продукування МЗ, в рамках адіабатичного наближення  $\tau_{h_g} \gg \tau_{h_D}$ , відповідно до рівняння Ландау – Халатнікова (2.9), не призводить до значного відхилення від “точного” розв’язку системи ЗДР (2.7), (2.8), що підтверджує правомірність розгляду даного підходу [46–49, 52, 55]. Згідно з рис. 2.4, адіабатичне наближення (штрихові криві, що накладаються на часові залежності  $h_g$ ) при заданих параметрах теорії (див. таблицю 2.1) виконується добре для всіх розглянутих випадків (а – г). Крім того, видно, що одержані результати практично повністю збігаються з еволюційними залежностями  $h_g$ , які розраховано на основі числового розв’язку



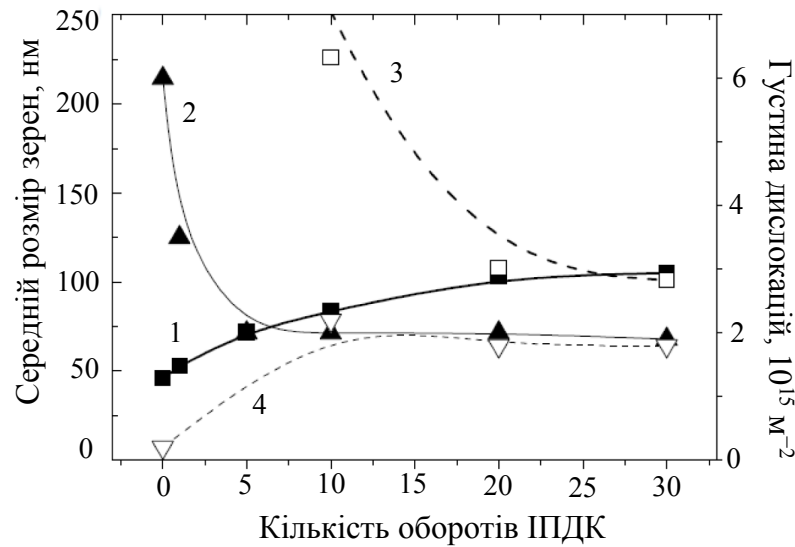


Рис. 2.7. Середній розмір зерен  $d$  (криві 1, 3) та густина дислокацій  $h_D$  (криві 2, 4) як функція від кількості оборотів при консолідації міді в умовах ІПДК для криогенно розмелених (криві 1, 2) та нерозмелених (криві 3, 4) порошоків [10]

системи ЗДР. Тільки у випадку, який представлено на рис. 2.4а, є незначне відхилення під час СФП (крива 1). Однак, таке відхилення в цілому не впливає на кінетику структурних дефектів і формування стаціонарного режиму, тому адіабатичне наближення може бути успішно застосоване для вивчення процесів фрагментації матеріалів чи сплавів у процесі ІПД.

## Висновки до розділу 2

1. В рамках НЕТ досліджено процес фрагментації твердих тіл під впливом ІПД. Моделювання процесів дефектоутворення при ІПД здійснено у наближенні дводефектної моделі. В якості основних структурних дефектів розглянуто МЗ та дислокації. Вибір сталих теорії здійснений феноменологічно, проте значення основних коефіцієнтів отримані експериментально та відображають типову поведінку мідної структури при обробці ІПД. Зовнішній вплив, що реалізується під час оброблення ІПД, представлено пружними напруженнями та пов'язаними з ними деформаціями, що присутні у виді пари інваріантів ( $\varepsilon_{ii}^e$  і  $I_2$ ) тензора пружних деформацій. Показано, що запропонований підхід описує існування стаціонарної (граничної) структури матеріалу, яка досягається виключно у процесі

ІПД.

2. Використовуючи адіабатичне наближення, яке визначає характер еволюції основних нерівноважних змінних моделі, виведено базові співвідношення, побудовано стаціонарні залежності густин МЗ та одержано ФД режимів фрагментації металу чи сплаву при ІПД. Показано, що області на ФД визначають умови формування граничних (стаціонарних) структур різних типів, які відповідають стійким станам системи (максимумам ефективного потенціалу  $V(h_g)$ ). Показано, що в загальному випадку процес подрібнення зернистої структури здійснюється за механізмом фазових переходів 1-го та 2-го родів.

3. Дослідження еволюції густини дефектів у процесі ІПД продемонструвало, що залежно від значень пружної деформації та початкового стану матеріалу формуються різні типи стаціонарних НК структур із густиною дефектів, що відповідають експериментально-спостережуваним закономірностям (лінійним розмірам зерен  $d \approx 100$  нм і густині дислокацій в межах  $h_D \approx 10^{15} - 10^{16} \text{ м}^{-2}$ ). Установлено, що в процесі формування стаціонарних режимів спостерігається тісний зв'язок дефектних підструктур, що відіграє важливу роль під час зміцнення матеріалу. Також виявлено, що нерівноважні змінні моделі зазнають СФП, у результаті яких еволюція густини дефектів супроводжується різкими переходами. Виявлено, що формування стаціонарних (граничних) структур супроводжується процесами накопичення дислокацій і подрібнення кристалітів із одного боку та анігіляцією дислокацій і зростанням зерен із іншого.

4. Проведено порівняння точної еволюції дводефектної структури з еволюцією МЗ в адіабатичному наближенні. Одержані результати демонструють високу збіжність і підтверджують правомірність розгляду даного підходу у ході вивчення процесів фрагментації матеріалів чи сплавів під час ІПД.

Результати, що наведені у даному розділі дисертаційної роботи, опубліковано у статтях [46,47,49], статтях в матеріалах конференцій [48,55,56] і тезах доповідей на конференціях [59–62, 132, 133].

## РОЗДІЛ 3

### ФАЗОВА КІНЕТИКА ПРОЦЕСУ ФРАГМЕНТАЦІЇ МЕТАЛІВ ЧИ СПЛАВІВ ПРИ ІПД

У розділі 2 дисертаційної роботи наведено узагальнену термодинамічну модель, що описує подрібнення зернистої структури полікристалічних тіл під час ІПД, і формування граничної (стаціонарної) структури. У рамках підходу було розглянуто ряд завдань виникнення та кінетики структурних дефектів під час ІПД [32, 33, 41, 92–95], у тому числі проведено дослідження особливостей та умов формування граничних структур різних типів. Крім того, у попередньому розділі вивчено еволюцію основних структурних дефектів та їх взаємодію у процесі реалізації стаціонарного режиму. Водночас, недостатньо досліджено питання стійкості системи вихідних еволюційних рівнянь і впливу кінетичних коефіцієнтів на поведінку нерівноважних змінних під час ІПД. Метою цього розділу є більш ретельне вивчення кінетики дводефектної системи та дослідження стійкості утворюваних стаціонарних станів (граничних структур).

Отже, даний розділ дисертації узагальнює результати, які одержано у розділі 2. Проводиться дослідження фазової кінетики дводефектної системи у процесі формування стаціонарних СМК чи НК структур, зокрема побудовано залежності: швидкість зміни густини МЗ від величини пружних деформацій і фазові портрети кінетики нерівноважних змінних. Проведено дослідження стійкості вихідної системи еволюційних рівнянь із використанням першого методу Ляпунова та отримано загальний вираз для показників Ляпунова, що в цілому характеризують поведінку динамічної системи у фазовому просторі. Побудовано діаграму, що дозволяє класифікувати тип та визначити стійкість стаціонарних станів системи (граничних структур). Окрім того, вивчено вплив обернених кінетичних коефіцієнтів, що мають зміст часів релаксації, на фазову динаміку нерівноважних змінних системи, що дозволяє розглянути різні сценарії формування граничних (стаціонарних) структур. У результаті показано, що з наближенням, як до прямого, так і до оберненого адіабатичного наближення

дводефектна система демонструє універсальну кінетичну поведінку. Виявлено формування особливих ділянок, що мають притягувальний характер і визначаються як “русло великої річки”. Отже, процес фрагментації металу чи сплаву під час ІПД може здійснюватися у два етапи, що представляють швидку релаксацію до особливих ділянок і повільний рух по них.

### 3.1. Особливості встановлення стаціонарних значень густини дефектів

Дослідимо кінетику встановлення стаціонарних значень густини МЗ. Оскільки система ЗДР (2.7), (2.8) у загальному випадку за довільних параметрів може бути розбіжною і не описувати формування стаціонарного стану, розглянемо спрощений випадок еволюції системи в рамках адіабатичного наближення  $\tau_{h_g} \gg \tau_{h_D}$ . Водночас дослідження зводиться до аналізу рівняння Ландау – Халатнікова (2.9), що має явний вигляд:

$$\tau_{h_g} \frac{\partial h_g}{\partial t} = \varphi_{0g} + \varphi_{gD} \frac{\varphi_{0D}}{\varphi_{1D}} - \left( \varphi_{1g} - \frac{\varphi_{gD}^2}{\varphi_{1D}} \right) h_g + \varphi_{2g} h_g^2 - \varphi_{3g} h_g^3, \quad (3.1)$$

де час вимірюється в одиницях  $\tau_{h_g}$ .

Слід зазначити, що складові  $\varphi_{0D}$  і  $\varphi_{0g}$  у початковій еволюційній системі (2.7), (2.8) описують деякі постійні джерела дефектів, які в процесі взаємодії МЗ та дислокацій (інтенсивність взаємодії визначається постійною  $\varphi_{gD}$ ) призводять до зростання відповідних густин  $h_g$  і  $h_D$ . Великі значення цих постійних сприяють формуванню більш високих стаціонарних значень дефектності матеріалу. Основною причиною існування представлених джерел у першу чергу є наявність у матеріалі дефектів більш глибоких структурних рівнів: дислокаційні комірки, атоми домішок, впровадження інших фаз і т.д. [10, 11, 13, 134]. До того ж, у випадку сплавів параметром постійного джерела  $\varphi_{0g}$  є залежність граничного середнього розміру зерен від відсоткового складу матеріалу. Так, у експериментальній роботі І. Г. Бродової [11] під час вивчення формування СМК чи НК структур Al-сплавів на основі застосування різних методик ІПД встановлено, що у випадку бінарних композицій мінімальний розмір кристалітів

становить  $d = 150$  мкм, у потрібному сплаві Al-Cr-Zr –  $d = 70$  мкм, в Al-Mg-Mn сплавах, що леговані Zr, –  $d = 60$  нм, з додаванням Sc –  $d = 35$  нм. У свою чергу, джерелом  $\varphi_{0D}$  може виступати наявність додаткової концентрації дислокацій усередині впроваджених комірок та кристалітах при здійсненні процесу консолідації [10] чи в процесі легування вихідного матеріалу [11–13, 70]. Це підтверджує вказану вище закономірність.

Раніше у ході дослідження втрати стійкості стаціонарних станів системи (див. підрозділ 2.2) одержано ФД (рис. 2.2), що визначає умови формування граничних структур залежно від значень пружної деформації  $\varepsilon_{ij}^e$ : першого та другого інваріантів  $\varepsilon_{ii}^e$ ,  $I_2$ . Установимо вплив пружних деформацій  $\varepsilon_{ij}^e$  на процес формування рівноваги у системі, що визначається за допомогою правої частини функції (3.1), представленої на рис. 3.1, та згідно з наведеними областями на ФД (точки 1 – 4). Як видно, перетини з віссю абсцис (де  $dh_g/dt = 0$ ) відповідають реалізації стаціонарних точок – екстремумів ефективного потенціалу  $V(h_g)$ . Так, в області великих пружних деформацій  $B$  при напруженнях  $\sigma_{ii}^e \approx \varepsilon_{ii}^e \mu \approx -10^{-3} \mu$  Па та  $\sigma_{ij}^e \approx \sqrt{I_2} \mu \approx 2,2 \cdot 10^{-3} \mu$  Па<sup>10</sup> реалізується тільки один стійкий стан з густиною МЗ  $h_g^{st} = 1,4 \cdot 10^7$  м<sup>-1</sup> (крива 1 на рис. 3.1). Крім того, з наближенням до стаціонарного значення швидкість еволюції густини МЗ має експоненціальний характер, оскільки кінетична залежність поблизу точки перетину близька до лінійного виду. Разом із тим, процес фрагментації металевого зразка значно сповільнюється.

В області малих деформацій  $B^*$  за значень  $\sigma_{ij}^e \approx -3,1 \cdot 10^{-3} \mu$  Па та  $\sigma_{ii}^e \approx -5 \cdot 10^{-4} \mu$  Па пружних напружень (точка 4 на рис. 2.2) також існує одна точка перетину з віссю абсцис, проте у від'ємній області:  $h_g < 0$  (крива 4 на рис. 3.1). Це пов'язано з тим, що  $V(h_g)$  має максимум в області значень  $h_g < 0$ , що не має фізичного змісту. Крім того, при  $h_g = 0$  швидкість зміни густини МЗ є від'ємною, що демонструє активацію зворотніх процесів – анігіляції структурних дефектів. Тому вважаємо, що система з досягненням  $h_g = 0$  продовжує функ-

<sup>10</sup>Припускається, що зсувні деформації визначаються значеннями  $I_2$ ;  $\mu$  – це модуль зсуву для відповідного матеріалу.

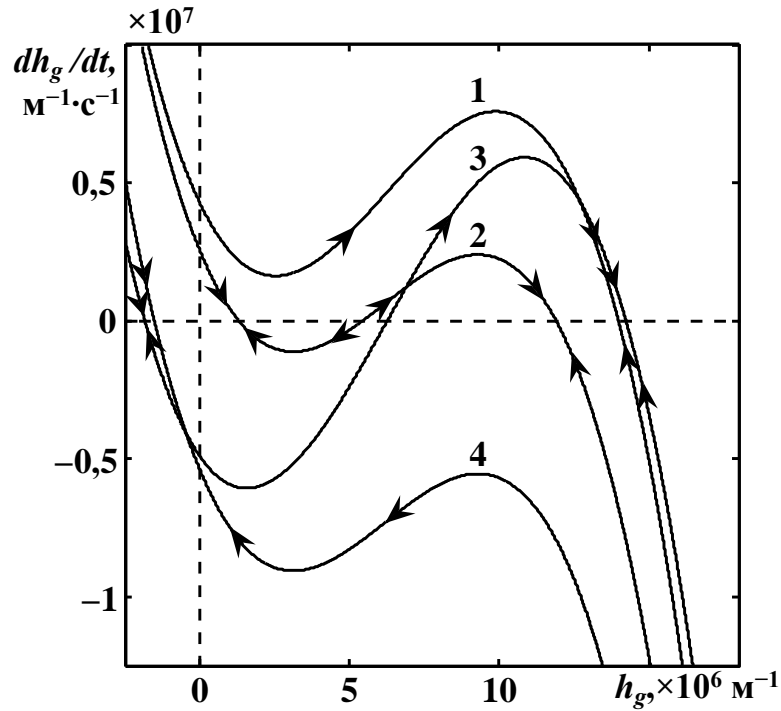


Рис. 3.1. Залежність швидкості зміни густини МЗ  $\dot{h}_g \text{ м}^{-1} \cdot \text{с}^{-1}$  (3.1) від  $h_g \text{ м}^{-1}$ . Криві 1 – 4 відповідають точкам 1 – 4 на рис. 2.2

ціонувати у сформованому стаціонарному режимі, а розглянутий зразок являє собою монокристал чи КЗПК.

За умови пружних напружень  $\sigma_{ii}^e \approx -5 \cdot 10^{-4} \mu \text{ Па}$  та  $\sigma_{ij}^e \approx 1,6 \cdot 10^{-3} \mu \text{ Па}$ , які відповідають області  $A$  (точка 2 на рис. 2.2), наявні три перетини з віссю абсцис (крива 2 на рис. 3.1). Перший і третій перетини відповідають стійким стаціонарним точкам (станам системи), які реалізуються у додатній області і мають густини МЗ:  $h_g^{st1} \approx 1,3 \cdot 10^6 \text{ м}^{-1}$  і  $h_g^{st2} \approx 1,2 \cdot 10^7 \text{ м}^{-1}$ . Таким чином, формуються дві граничні структури: з великими та дрібними розмірами зерен – СМК чи НК структури. Другий перетин кривої з віссю абсцис відповідає мінімуму і, відповідно, утворенню нестійкої конфігурації, оскільки навіть за невеликого відхилення система не зможе повернутися назад. Відзначимо, що кінетика наближень до стійких стаціонарних значень  $h_g$  також близька до лінійного вигляду і визначається швидкими змінами  $dh_g/dt$ .

Зі зменшенням  $I_2$  при пружних напруженнях  $\sigma_{ij}^e \approx -3,1 \cdot 10^{-3} \mu \text{ Па}$  і  $\sigma_{ii}^e \approx -2 \cdot 10^{-3} \mu \text{ Па}$ , які відповідають області  $A^*$  на ФД (точка 3 на рис. 2.2), також

спостерігаються три перетини графіка залежності (3.1) з віссю абсцис (крива 3 на рис. 3.1). Однак, у цьому випадку перший максимум ефективного потенціалу  $V(h_g)$  (див. рис. 2.3) формується у від'ємній області  $h_g$ , що не має фізичного сенсу, тому вважається  $h_g = 0$ . Третій перетин описує стійкий стаціонарний стан з густиною МЗ  $h_g^{st2} \approx 1,4 \cdot 10^7 \text{ м}^{-1}$ , що відповідає реалізації СМК чи НК граничної структури.

Таким чином, видно, що стаціонарні стани (граничні структури) дводефектної системи (2.7), (2.8) формуються в результаті динамічного урівноваження процесів генерації та анігіляції густини структурних дефектів.

Загалом граничні структури формуються у результаті мікроскопічної взаємодії структурних дефектів різних рівнів, що відбувається безпосередньо під час ІПД. Водночас, перехід між стаціонарними конфігураціями може здійснюватися за рахунок підвищення інтенсивності оброблення, що сприяє накопиченню пластичної деформації у вигляді густини дефектів та виникненню СФП. Проте слід зазначити, що під час реального експерименту стаціонарний режим досягнути неможливо у зв'язку з геометричними особливостями самих методів ІПД. Застосування таких класичних методів як РККП [74, 75], ГЕ [5] багатокутова рівноканальна гідроекструзія і т.д., що зберігають переріз зразка до і після оброблення, допускає, що формування стаціонарної структури є неможливим, оскільки для цього немає змоги забезпечити постійне у часі пружне напруження та пов'язані з ними деформації  $\varepsilon_{ij}^e$ . Вважається, що подача і вихід зразка з активної зони експериментальної установки здійснюється з постійною швидкістю. Разом із тим, зсувні напруження  $\sigma_{ij}^e$  ( $i \neq j$ ), що виникають, змінюються від мінімального до деякого максимального значення під час входу в активну зону та від максимального значення до мінімального при виході із неї. Проте в активній зоні структура матеріалу буде еволюціонувати у напрямку стаціонарного значення, але за час перебування у зоні система встигне пройти тільки частину цього шляху. Таким чином, для досягнення стаціонарної граничної структури з постійним середнім розміром зерен широко застосовують багаторазове повторення ІПД матеріалу з використанням однієї установки, чи практикують комбінування процесів оброб-

лення на установках різного типу [5, 128–130]. Також використовують методику інтенсивного однорідного навантаження зразка під час його оброблення. У цьому випадку за напруження  $\varepsilon_{ij}^e = \text{const}$ , стаціонарний режим може бути досягнутий, однак унаслідок зміни перерізу зразка та тільки на обмеженому проміжку часу.

## 3.2. Аналіз стійкості фазової кінетики дводефектної системи

### 3.2.1. Фазові портрети та визначення особливих точок системи

Використовуючи метод фазової площини, побудовано фазові портрети дводефектної системи (рис. 3.2), що дозволяють вивчити поведінку системи у процесі формування стаціонарних СМК чи НК структур. Із рисунків видно, що система характеризується певною кількістю нерухомих точок (стаціонарних структур), до яких прагнуть чи віддаляються фазові траєкторії. Їхня кількість, у першу чергу, обумовлюється характером прикладеного навантаження, що залежить від обрання методу ПД, і, в даному випадку, визначається одержаною у підрозділі 2.2 ФД (рис. 2.2). Так, в областях  $(A, A^*)$  існують три нерухомі точки  $O(h_D^{st}, h_g^{st})$ ,  $S(h_D^{st}, h_g^{st})$  і  $D(h_D^{st}, h_g^{st})$ , а в областях  $(B, B^*)$  – тільки одна  $D(h_D^{st}, h_g^{st})$  (або  $O(h_D^{st}, h_g^{st})$ ).

Визначимо координати  $(h_D^{st}, h_g^{st})$  особливих точок <sup>11</sup> системи ЗДР (2.7), (2.8). Для цього запишемо рівняння ізоклін <sup>12</sup> – поділимо (2.8) на (2.7):

$$\frac{\tau_{h_g} \partial h_g}{\tau_{h_D} \partial h_D} = \text{tg} \alpha = k, \quad (3.2)$$

де  $k$  – тангенс кута нахилу дотичної до фазової траєкторії.

У результаті явний вигляд співвідношення (3.2) визначається виразом

$$\frac{\tau_{h_g} \partial h_g}{\tau_{h_D} \partial h_D} = \frac{\varphi_{0g} - \varphi_{1g} h_g + \varphi_{2g} h_g^2 - \varphi_{3g} h_g^3 + \varphi_{gD} h_D}{\varphi_{0D} - \varphi_{1D} h_D + \varphi_{gD} h_g}. \quad (3.3)$$

Використовуючи рівняння (3.3), знайдемо особливі точки фазової площини. Водночас виконуються умови  $\partial h_g / \partial h_D = 0$  і  $\partial h_g / \partial h_D = \infty$ , що дозволяють

<sup>11</sup> Особлива точка – це така точка, в якій швидкість зміни динамічних змінних дорівнює нулю і напрямки нахилу дотичних до фазових траєкторій не визначаються.

<sup>12</sup> Ізокліни – це лінії, які перетинають інтегральні криві під одним визначеним кутом.



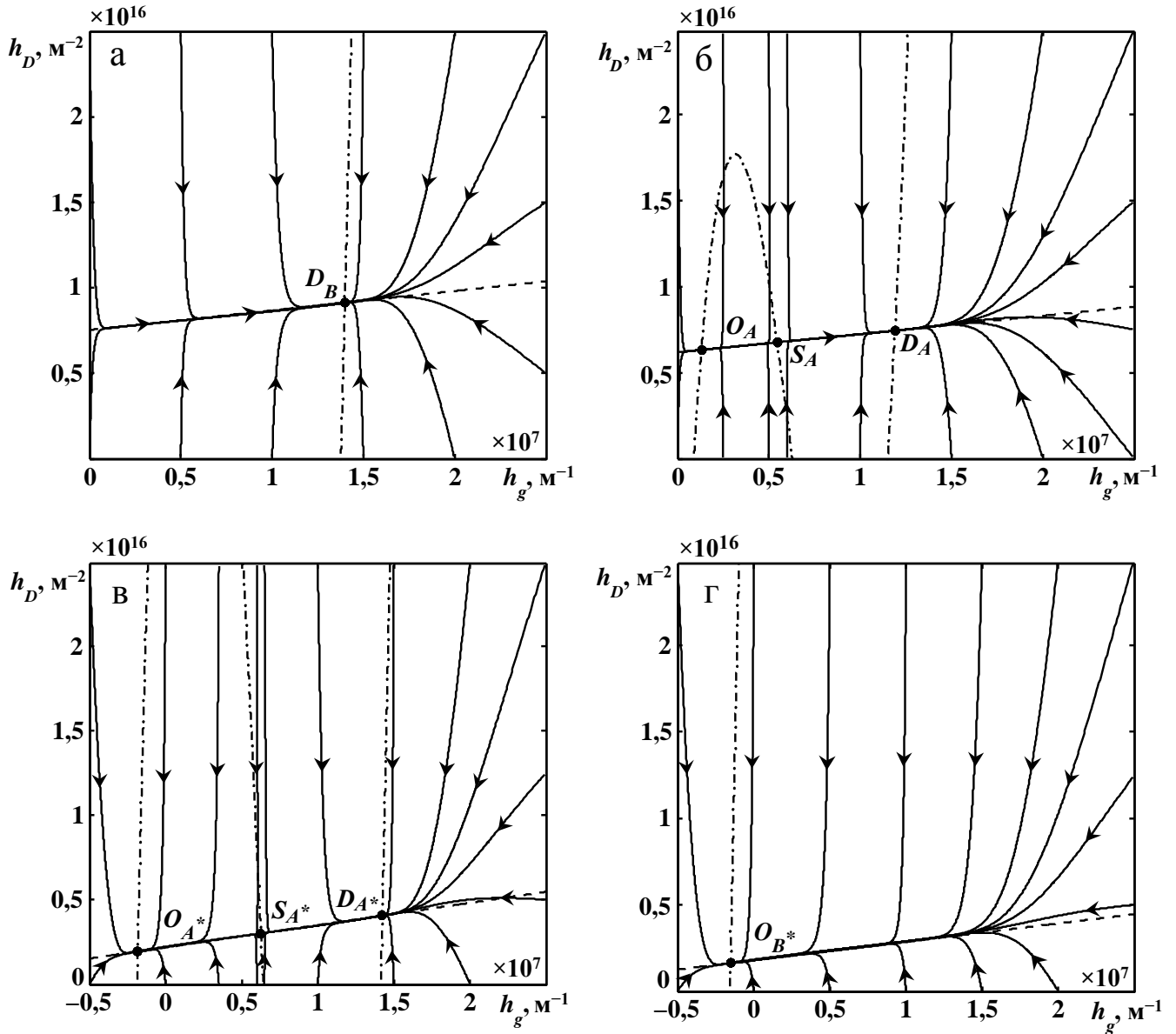


Рис. 3.2. Фазові портрети дводефектної системи (2.7), (2.8), що відображають різні режими фрагментації металів чи сплавів у процесі ПД, та побудовано при значеннях кінетичних коефіцієнтів  $\gamma_D = 1/\tau_{h_D} = 3 \cdot 10^{25} \text{ Дж}^{-1} \cdot \text{м}^{-1} \cdot \text{с}^{-1}$ ,  $\gamma_g = 1/\tau_{h_g} = 10^6 \text{ Дж}^{-1} \cdot \text{м} \cdot \text{с}^{-1}$  та часовому кроці  $dt = 6 \cdot 10^{-7} \text{ с}$ : а - г - залежності обчислено для відповідних точок 1 – 4 на рис. 2.2; штрихпунктирні лінії відображають точки, у яких фазові траєкторії мають вертикальні дотичні, а штрихові – горизонтальні. Час  $t$  вимірюється в с

отримати систему однорідних рівнянь:

$$\varphi_{0D} - \varphi_{1D}h_D + \varphi_{gD}h_g = 0, \quad (3.4)$$

$$\varphi_{0g} - \varphi_{1g}h_g + \varphi_{2g}h_g^2 - \varphi_{3g}h_g^3 + \varphi_{gD}h_D = 0. \quad (3.5)$$

Виразимо з рівняння (3.4) динамічну змінну  $h_D$  та підставимо одержаний

вираз до другого рівняння. Таким чином, провівши перетворення, маємо кубічне рівняння відносно густини МЗ

$$\varphi_{3g}h_g^3 - \varphi_{2g}h_g^2 + \left( \varphi_{1g} - \frac{\varphi_{gD}^2}{\varphi_{1D}} \right) h_g - \varphi_{0g} - \varphi_{gD} \frac{\varphi_{0D}}{\varphi_{1D}} = 0, \quad (3.6)$$

розв'язки якого обчислюються за формулою Кардано (див. додаток Б):

$$h_{g_n}^{st} = y_n - \frac{a}{3}, \quad n = 1, 2, 3, \quad (3.7)$$

де  $a = -\varphi_{2g}/\varphi_{3g}$ ,  $y_n$  – корені неповного кубічного рівняння.

Очевидно, що у загальному випадку система ЗДР (2.7), (2.8) може мати тільки три особливі точки. Однак, два розв'язки за визначених умов (значень прикладеного навантаження, що представляється у виді інваріантів тензора пружних деформацій  $\varepsilon_{ii}^e$ ,  $I_2$ ) та визначених параметрах теорії, можуть бути комплексними (див. додаток Б), що у зв'язку з відсутністю фізичного сенсу не розглядаються. Тому вважається, що у подібному випадку реалізується тільки один нерухомий стан (особлива точка).

Таблиця 3.1

Координати особливих точок при фіксованих значеннях  $\varepsilon_{ii}^e$  та  $I_2$  (точки 1 – 4 на рис. 2.2), що відповідають фазовим портретам на рис. 3.2

№	Область ФД		точка $O$ (1-й максимум $V(h_g)$ )	точка $S$ (мінімум $V(h_g)$ )	точка $D$ (2-й максимум $V(h_g)$ )
1	$B$	$h_D^{st}, \text{ м}^{-2}$	$(7,79 + 0,24i) \times 10^{15}$	$(7,79 - 0,24i) \times 10^{15}$	$9,12 \times 10^{15}$
		$h_g^{st}, \text{ м}^{-1}$	$(0,23 + 0,21i) \times 10^7$	$(0,23 - 0,21i) \times 10^7$	$1,39 \times 10^7$
2	$A$	$h_D^{st}, \text{ м}^{-2}$	$6,32 \times 10^{15}$	$6,76 \times 10^{15}$	$7,45 \times 10^{15}$
		$h_g^{st}, \text{ м}^{-1}$	$0,13 \times 10^7$	$0,54 \times 10^7$	$1,19 \times 10^7$
3	$A^*$	$h_D^{st}, \text{ м}^{-2}$	$1,94 \times 10^{15}$	$3,01 \times 10^{15}$	$4,05 \times 10^{15}$
		$h_g^{st}, \text{ м}^{-1}$	$-0,18 \times 10^7$	$0,62 \times 10^7$	$1,42 \times 10^7$
4	$B^*$	$h_D^{st}, \text{ м}^{-2}$	$1,63 \times 10^{15}$	$(2,87 + 0,43i) \times 10^{15}$	$(2,87 - 0,43i) \times 10^{15}$
		$h_g^{st}, \text{ м}^{-1}$	$-0,15 \times 10^7$	$(1,01 + 0,40i) \times 10^7$	$(1,01 - 0,40i) \times 10^7$

Оскільки загальний аналітичний вираз для координат особливих точок достатньо громіздкий, обмежимося розглядом окремого випадку. Для цього зафіксуємо інваріанти  $\varepsilon_{ii}^e$ ,  $I_2$  відповідно до точок 1 – 4 на рис. 2.2 та обчислимо за формулою Кардано значення координат нерухомих точок (3.7), що зображені на рис. 3.2. Результати обчислень наведено у таблиці 3.1. Отже, спостерігаємо формування визначеної кількості стаціонарних структур для кожної області ФД з лінійними розмірами зерен порядку  $d \sim 100$  нм та густиною дислокацій у межах  $h_D \sim 10^{15} - 10^{16} \text{ м}^{-2}$ . Однак, питання визначення типу особливих точок і їх стійкості залишається відкритим.

### 3.2.2. Визначення показників Ляпунова

Проведемо дослідження стійкості розв'язків системи ЗДР (2.7), (2.8), використовуючи для аналізу перший метод Ляпунова (або стійкість за першою наближенням) [43]. Цей метод зводиться до визначення показників Ляпунова  $\lambda_i$  ( $i = 1, 2$ ), які виступають характеристикою руху динамічної системи у фазовому просторі.

В основі аналізу лежить перехід від вихідної системи ЗДР (2.7), (2.8) до системи “збурень”. Вважається, що стаціонарні стани змінюються на деяку малу величину. Разом із тим нові рівняння визначаються у результаті розвинення збурених змінних у ряд Тейлора в околі нерухомих точок до головних (лінійних) внесків. У такий спосіб, дослідження стійкості рівноважних станів нелінійної системи (2.7), (2.8) зводиться до аналізу коренів характеристичного рівняння (показників Ляпунова  $\lambda_i$  ( $i = 1, 2$ )) лінійної системи збурень.

Із геометричної точки зору, показники Ляпунова  $\lambda_i$  ( $i = 1, \dots, m$ ) характеризують стиснення або розтягнення  $m$ -вимірного фазового простору. Оскільки передбачається, що два розв'язки, початкові значення яких знаходяться в околі радіусу  $\varepsilon$ , по мірі руху розійдуться за час  $T$  в  $m$ -вимірний еліпсоїд за  $m$  головними напрямками, і в момент часу  $t$  радіуси будуть визначатися виразом  $\varepsilon \exp \lambda_i t$  ( $i = 1, \dots, m$ ). Як підсумок, показники Ляпунова відображають стиснення або розтягнення еліпсоїда вздовж  $i$ -ї осі [135]. Іншими словами, відстань між

початково-близькими фазовими траєкторіями з часом збільшується або зменшується за експоненціальним законом. Водночас від'ємні значення показників Ляпунова  $\lambda_i < 0$  відображають швидкість, із якою система відновиться після збурення (тобто система повернеться до рівноважного стану), а  $\lambda_i > 0$  – швидкість розбіжності розв'язків (нестійкість).

Отже, перейдемо до визначення збуреної системи та дослідження стійкості її особливих точок. Оскільки явний аналітичний вираз для координат особливих точок (3.7) вихідної дводефектної системи є досить складним, уведемо загальне позначення –  $(h_{Dn}^{st}, h_{gn}^{st})$ , де  $n = 1, 2, 3$ . Відповідно до теорії стійкості Ляпунова, придамо координатами особливих точок деяке збурення

$$H_{Dn} = h_{Dn}^{st} + \xi \exp(\lambda t), \quad (3.8)$$

$$H_{gn} = h_{gn}^{st} + \eta \exp(\lambda t), \quad (3.9)$$

де нові складові – деякі малі добавки  $\xi \exp(\lambda t) \ll h_{Dn}^{st}$  і  $\eta \exp(\lambda t) \ll h_{gn}^{st}$ . Підставимо одержані вирази (3.8), (3.9) до системи (2.7), (2.8):

$$\begin{aligned} \tau_{h_D} \frac{\partial(h_{Dn}^{st} + \xi \exp(\lambda t))}{\partial t} &= \varphi_{0D} - \varphi_{1D} (h_{Dn}^{st} + \xi \exp(\lambda t)) + \varphi_{gD} (h_{gn}^{st} + \eta \exp(\lambda t)), \\ \tau_{h_g} \frac{\partial(h_{gn}^{st} + \eta \exp(\lambda t))}{\partial t} &= \varphi_{0g} - \varphi_{1g} (h_{gn}^{st} + \eta \exp(\lambda t)) + \varphi_{2g} (h_{gn}^{st} + \eta \exp(\lambda t))^2 - \\ &\quad - \varphi_{3g} (h_{gn}^{st} + \eta \exp(\lambda t))^3 + \varphi_{gD} (h_{Dn}^{st} + \xi \exp(\lambda t)). \end{aligned}$$

Розкривши дужки та здійснюючи перетворення, проведемо лінеаризацію отриманої системи за малими зміщеннями, залишаючи тільки лінійні складові, степені яких не вище 1 (тобто нехтуємо доданками  $\eta^2$ ,  $\exp(2\lambda t)$  і т. д.)

$$\begin{aligned} \tau_{h_D} \xi \lambda \exp(\lambda t) &= \varphi_{0D} - \varphi_{1D} (h_{Dn}^{st} + \xi \exp(\lambda t)) + \varphi_{gD} (h_{gn}^{st} + \eta \exp(\lambda t)), \\ \tau_{h_g} \eta \lambda \exp(\lambda t) &= \varphi_{0g} - \varphi_{1g} (h_{gn}^{st} + \eta \exp(\lambda t)) + \varphi_{2g} \left( (h_{gn}^{st})^2 + 2h_{gn}^{st} \eta \exp(\lambda t) \right) - \\ &\quad - \varphi_{3g} \left( (h_{gn}^{st})^3 + 3 (h_{gn}^{st})^2 \eta \exp(\lambda t) \right) + \varphi_{gD} (h_{Dn}^{st} + \xi \exp(\lambda t)). \end{aligned}$$

Відзначимо, що в одержаній системі також відкидаються складові, які не мають множника  $\exp(\lambda t)$ , оскільки при підстановці координат особливих точок  $(h_{Dn}^{st}, h_{gn}^{st})$ ,  $n = 1, 2, 3$  до рівнянь (2.7), (2.8) вони обертаються в нуль.

Поділимо отримані вирази на  $\exp(\lambda t)$  та перенесемо всі складові до лівої частини

$$\tau_{h_D}\xi\lambda + \varphi_{1D}\xi - \varphi_{gD}\eta = 0,$$

$$\tau_{h_g}\eta\lambda + \varphi_{1g}\eta - 2\varphi_{2g}h_{gn}^{st}\eta + 3\varphi_{3g}(h_{gn}^{st})^2\eta - \varphi_{gD}\xi = 0.$$

У результаті, згрупувавши змінні, одержуємо лінійну однорідну систему алгебраїчних рівнянь відносно малих збурень  $\eta$  і  $\xi$

$$(\tau_{h_D}\lambda + \varphi_{1D})\xi - \varphi_{gD}\eta = 0, \quad (3.10)$$

$$-\varphi_{gD}\xi + \left(\tau_{h_g}\lambda + \varphi_{1g} - 2\varphi_{2g}h_{gn}^{st} + 3\varphi_{3g}(h_{gn}^{st})^2\right)\eta = 0, \quad (3.11)$$

розв'язки якої визначають координати особливих точок для збуреної системи.

Як відомо, система (3.10), (3.11) має нетривіальний розв'язок (при  $\eta \neq 0$ ,  $\xi \neq 0$ ) тоді, коли  $\det = 0$ . Запишемо визначник системи для змінних  $\eta$  і  $\xi$

$$\det ||| = \begin{vmatrix} \tau_{h_D}\lambda + \varphi_{1D} & -\varphi_{gD} \\ -\varphi_{gD} & \tau_{h_g}\lambda + \varphi_{1g} - 2\varphi_{2g}h_{gn}^{st} + 3\varphi_{3g}(h_{gn}^{st})^2 \end{vmatrix},$$

та обчислимо його значення:

$$(\tau_{h_D}\lambda + \varphi_{1D})\left(\tau_{h_g}\lambda + \varphi_{1g} - 2\varphi_{2g}h_{gn}^{st} + 3\varphi_{3g}(h_{gn}^{st})^2\right) - \varphi_{gD}^2 = 0.$$

Одержуємо квадратичне рівняння відносно змінної  $\lambda$ , що є характеристичним рівнянням першого наближення збуреної системи:

$$\lambda^2 + B_\lambda\lambda + C_\lambda = 0.$$

Корені цього рівняння дозволяють визначити характер поведінки вихідної (незбуреної) системи (2.7), (2.8) у фазовій площині. Їх значення обчислюються наступним чином:

$$\lambda_{1,2} = \frac{1}{2}(-B_\lambda \pm \sqrt{D_\lambda}) \equiv \frac{1}{2}\left(-B_\lambda \pm \sqrt{B_\lambda^2 - 4C_\lambda}\right), \quad (3.12)$$

де

$$B_\lambda = \frac{\varphi_{1D}}{\tau_{h_D}} + \frac{\varphi_{1g}}{\tau_{h_g}} - 2\frac{\varphi_{2g}}{\tau_{h_g}}h_{gn}^{st} + 3\frac{\varphi_{3g}}{\tau_{h_g}}(h_{gn}^{st})^2, \quad (3.13)$$

$$C_\lambda = \frac{1}{\tau_{h_D}\tau_{h_g}}\left(-\varphi_{gD}^2 + \varphi_{1D}\varphi_{1g} - 2\varphi_{1D}\varphi_{2g}h_{gn}^{st} + 3\varphi_{1D}\varphi_{3g}(h_{gn}^{st})^2\right). \quad (3.14)$$

Разом із тим, детермінант характеристичного рівняння визначається як

$$D_\lambda = 4 \frac{\varphi_{gD}^2}{\tau_{hD} \tau_{hg}} + \left[ -\frac{\varphi_{1D}}{\tau_{hD}} + \frac{\varphi_{1g}}{\tau_{hg}} - 2 \frac{\varphi_{2g}}{\tau_{hg}} h_{gn}^{st} + 3 \frac{\varphi_{3g}}{\tau_{hg}} (h_{gn}^{st})^2 \right]^2. \quad (3.15)$$

Отже, отримано загальний вираз для показників Ляпунова (3.12), що справедливий для всіх можливих особливих точок системи (2.7), (2.8).

### 3.2.3. Діаграма стійкості стаціонарних структур

Проведемо аналіз показників Ляпунова (3.12), що дозволить класифікувати тип та визначити характер стійкості нерухомих точок  $O(h_{D1}^{st}, h_{g1}^{st})$ ,  $S(h_{D2}^{st}, h_{g2}^{st})$  і  $D(h_{D3}^{st}, h_{g3}^{st})$  (стаціонарних станів) системи (2.7), (2.8). Для цього визначимо критичні умови для керувальних параметрів  $\varepsilon_{ii}^e$  і  $I_2$ , при яких вирази (3.12) змінюють свої значення.

Як відомо, існує наступна класифікація особливих точок залежно від значень коренів характеристичного рівняння (3.12) (показників Ляпунова) [43]:

- 1) якщо дійсні  $\lambda_{1,2} > 0$  – нестійкий “вузол”;
- 2) якщо дійсні  $\lambda_{1,2} < 0$  – стійкий “вузол”;
- 3) якщо дійсні  $\lambda_1 > 0$ ,  $\lambda_2 < 0$  (або  $\lambda_1 < 0$ ,  $\lambda_2 > 0$ ) – реалізується “сідло”;
- 4) якщо комплексні  $\lambda_{1,2} = \alpha \pm i\beta$  (при  $\alpha > 0$ ) – нестійкий “фокус”;
- 5) якщо комплексні  $\lambda_{1,2} = \alpha \pm i\beta$  (при  $\alpha < 0$ ) – стійкий “фокус”;
- 6) якщо чисто уявні  $\lambda_{1,2} = \pm i\beta$  при ( $\alpha = 0$ ) – реалізується “центр”.

Отже, відповідно до вигляду підкореневого виразу в (3.12) (або співвідношення (3.15)) очевидно, що показники Ляпунова набувають тільки дійсних значень, оскільки при будь-якій інтенсивності пружних деформацій  $\varepsilon_{ij}^e$  співвідношення  $D_\lambda \equiv (B_\lambda^2 - 4C_\lambda) \geq 0$ . Тому всі особливі точки  $O(h_{D1}^{st}, h_{g1}^{st})$ ,  $S(h_{D2}^{st}, h_{g2}^{st})$  і  $D(h_{D3}^{st}, h_{g3}^{st})$  дводефектної системи (2.7), (2.8) можуть бути тільки двох типів: “вузол” чи “сідло”. Визначимо умови, які однозначно встановлюють цей тип.

Запишемо вираз для показників Ляпунова (3.12) у виді:

$$\frac{1}{2} \left( -B_\lambda \pm \sqrt{B_\lambda^2 - 4C_\lambda} \right) \equiv \frac{B_\lambda}{2} \left( -1 \pm \sqrt{1 - \frac{4C_\lambda}{B_\lambda^2}} \right),$$

та проведемо аналіз кожного доданку, які відповідно до визначень (3.13) та (3.14), з урахуванням коефіцієнтів (2.4), залежать тільки від параметрів теорії і значень першого інваріанта  $\varepsilon_{ii}^e$  тензора пружних деформацій.

У загальному випадку, якщо вираз (3.14) набуває від'ємних значень  $C_\lambda < 0$ , то результат обчислення  $\sqrt{B_\lambda^2 - 4C_\lambda}$  у співвідношенні (3.12) має більший внесок порівняно з першим доданком  $B_\lambda$  (або  $\sqrt{1 - 4C_\lambda/B_\lambda^2} > 1$ ). Таким чином, незалежно від знака постійної  $B_\lambda$ , при додаванні чи відніманні кореня, показники Ляпунова мають різні знаки. Отже, особлива точка при  $C_\lambda < 0$  є "сідлом". У випадку, коли  $C_\lambda > 0$ , корінь у співвідношенні (3.12) набуває менші значення за  $B_\lambda$  (або  $\sqrt{1 - 4C_\lambda/B_\lambda^2} < 1$ ), тому показники Ляпунова мають один знак, відповідно у фазовому просторі реалізується особлива точка типу "вузол". Проте варто зазначити, що стійкість особливої точки залежить від знака, який набуває вираз  $B_\lambda$  (3.13).

Таким чином, спочатку встановимо межі знаковизначеності виразу  $C_\lambda$  (3.14). Використовуючи умову  $C_\lambda = 0$ , одержуємо квадратичне рівняння відносно керувального параметра  $\varepsilon_{ii}^e$  (пружних нормальних деформацій):

$$(\varepsilon_{ii}^e)^2 + \varepsilon_{ii}^e \left( \frac{\varphi_{1D}^*}{2e_D} + \frac{\varphi_{1g}^*}{2e_g} + \frac{g}{2e_g} \right) + \frac{1}{4e_D e_g} (\varphi_{1D}^* \varphi_{1g}^* + \varphi_{1D}^* g - \varphi_{gD}^2) = 0. \quad (3.16)$$

Розв'язок якого має вид:

$$(\varepsilon_{ii}^e)_{C_{\lambda 1,2}}^c = - \left( \frac{\varphi_{1D}^*}{4e_D} + \frac{\varphi_{1g}^*}{4e_g} + \frac{g}{4e_g} \right) \pm \frac{1}{2} \sqrt{\left[ \frac{\varphi_{1g}^*}{2e_g} - \frac{\varphi_{1D}^*}{2e_D} + \frac{g}{2e_g} \right]^2 + \frac{\varphi_{gD}^2}{e_D e_g}}, \quad (3.17)$$

$$g = -2\varphi_{2g} h_{gn}^{st} + 3\varphi_{3g} (h_{gn}^{st})^2.$$

Вирази (3.17) є критичними значеннями для першого інваріанта  $\varepsilon_{ii}^e$  та характеризують пружні об'ємні деформації, при переході через які відбувається зміна типу особливих точок (співвідношення  $C_\lambda$  (3.14) змінює свій знак). Так, при пружних нормальних деформаціях  $(\varepsilon_{ii}^e)_{C_{\lambda 2}}^c > \varepsilon_{ii}^e > (\varepsilon_{ii}^e)_{C_{\lambda 1}}^c$ , які належать ін-

тервалу фізичних значень  $[-0,01; (\varepsilon_{ii}^e)_{C_{\lambda 2}}^c] \cup [(\varepsilon_{ii}^e)_{C_{\lambda 1}}^c; 0,01]$ <sup>13</sup> стаціонарні точки системи рівнянь (2.7), (2.8) представляють стійкий або нестійкий “вузол” (водночас  $C_\lambda > 0$ ). У середині цього інтервалу, при  $\varepsilon_{ii}^e \in [(\varepsilon_{ii}^e)_{C_{\lambda 2}}^c; (\varepsilon_{ii}^e)_{C_{\lambda 1}}^c]$ , показники Ляпунова набувають різних за знаком значень, оскільки  $C_\lambda < 0$ , і реалізуються особливі точки типу “сідло”.

Перейдемо до визначення знака  $B_\lambda$  (3.13), оскільки у випадку реалізації нерухомих точок типу “вузол” він безпосередньо характеризує стійкість системи: показує напрямок руху (збіжність чи розбіжність) фазових траєкторій. Для цього виразимо зі співвідношення (3.13) критичне значення для  $\varepsilon_{ii}^e$  за умови  $B_\lambda = 0$ :

$$(\varepsilon_{ii}^e)_{B_\lambda}^c = \frac{2\varphi_{2g}\tau_D h_{gn}^{st} - 3\varphi_{3g}\tau_D (h_{gn}^{st})^2 - \varphi_{1g}^*\tau_D - \varphi_{1D}^*\tau_g}{2(e_g\tau_D + e_D\tau_g)}. \quad (3.18)$$

Отже, при значеннях першого інваріанта тензора пружних деформацій, що задовільняють нерівності  $\varepsilon_{ii}^e > (\varepsilon_{ii}^e)_{B_\lambda}^c$ , коефіцієнт  $B_\lambda > 0$  і показники (3.12) свідчать про формування стійкого стану (розв’язку), тобто в фазовій площині реалізується стійкий “вузол”. Із переходом до закритичної області  $\varepsilon_{ii}^e < (\varepsilon_{ii}^e)_{B_\lambda}^c$  фазові траєкторії розходяться, здійснюючи поступове віддалення від нерухомої точки. У цьому випадку особлива точка є нестійким “вузлом”.

Оцінимо наближений порядок виразу (3.18). Для цього зафіксуємо значення координат особливих точок у відповідності до експериментально спостережуваних закономірностей. Нагадаємо, що у разі густини МЗ, рівноважний стан в середньому формується при  $h_g^{st} = 10^4 \text{ м}^{-1}$  і  $h_g^{st} = 10^7 \text{ м}^{-1}$ , водночас розміри зерен складають приблизно 100 мкм та 100 нм. Проте для повноти аналізу, розглянемо інші випадки, коли зразок є монокристалом чи реалізується близька до аморфної структура.

Відповідно до даних, що наведені у таблиці 3.2, видно, що порядок критичного значення  $\sup(\varepsilon_{ii}^e)_{B_\lambda}^c \approx -0,7\%$  (3.18) лежить за межами розглянутих нами деформацій (див. рис. 2.2). Отже, вираз (3.13) завжди набуває значень  $B_\lambda > 0$ . Тому, при  $\varepsilon_{ii}^e \in [-0,01; (\varepsilon_{ii}^e)_{C_{\lambda 2}}^c] \cup [(\varepsilon_{ii}^e)_{C_{\lambda 1}}^c; 0,01]$ , обидва показники Ляпунова

<sup>13</sup>Пружні складові повної деформації (див. додаток А) вище 1% (чи значення  $\pm 0,01$ ) дають менший (несуттєвий) внесок порівняно з пластичними компонентами [136].



набувають від’ємні значення  $\lambda_{1,2} < 0$ . У результаті у фазовому просторі формується стійкий “вузол”, а в зразку реалізується рівноважна гранична структура.

Таблиця 3.2

Критичні значення втрати стійкості нерухомих станів

$h_g^{st}, \text{ м}^{-1}$	0	$10^4$	$10^6$	$10^7$	$5 \cdot 10^7$	$10^8$
$(\varepsilon_{ii}^e)_{B\lambda}^c, \%$	-0,76	-0,76	-0,74	-0,71	-4,67	-19,00

На рисунку 3.3 в координатах  $h_g^{st} - \varepsilon_{ii}^e$  представлено діаграму, що наочно демонструє одержані критичні вирази (3.17) і (3.18) для широкого діапазону можливих граничних структур. Як видно, утворюються три області, разом із тим дві області  $N^{st}$  та  $N$  демонструють умови формування стійких і нестійких особливих точок (стаціонарних структур) типу “вузол”, а область  $S$  – відповідає реалізації “сідла”. Суцільні криві на рис. 3.3 побудовано відповідно до визначення (3.17) і відображають межі формування стаціонарних структур, а штрихова лінія, відповідно до співвідношення (3.18), демонструє межі стійкості цих рівноважних конфігурацій. У випадку формування “вузла” значення пружної об’ємної деформації, що розташовані нижче штрихової кривої, призводять до формування нестійких граничних структур. Однак, такі стаціонарні структури можливі лише при великих пружних нормальних деформаціях, які на практиці при ПД металевих зразків не реалізуються.

Відомо, що значення пружних деформацій, згідно з визначенням повної деформації (див. додаток А), можуть досягати набагато менших значень (0,2 – 0,8%) порівняно з пластичними (20 – 40%) [99, 136]. Проте з появою пластичних складових, пружні – не зникають. Внесок пружних деформацій вважається не суттєвим у випадку, коли  $\varepsilon_{ij}^p \gg \varepsilon_{ij}^e$ , що зазвичай реалізується при  $\varepsilon_{ij} > 1\%$ . Така поведінка спостерігається при пластичній деформації в технологічних процесах і т.д. [136]. Крім того, вважається, що у разі виникнення пружних нормальних деформацій  $\varepsilon_{ii}^e$  понад 1%, внески пластичних деформацій мають в 10-ки разів більші значення. Водночас міра обтискання досягає  $\varepsilon_{ij} > 100\%$ , що може при-

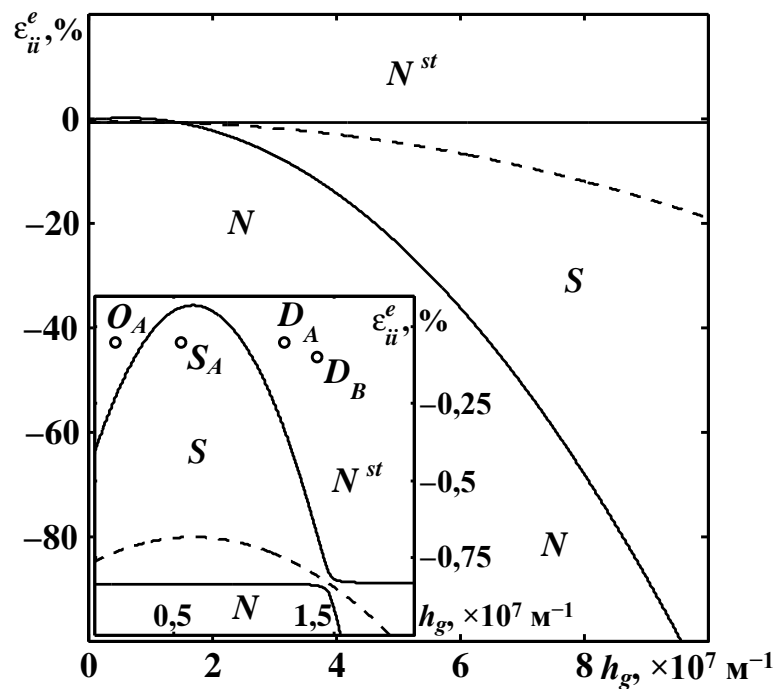


Рис. 3.3. Діаграма областей формування особливих точок (стаціонарних структур) різних типів

звести до руйнування мікроструктури зразка.

Із підвищенням пружної деформації до значень  $\varepsilon_{ii}^e = -0,01$  збільшується можливість формування нестійкої стаціонарної структури (див. вставку на рис. 3.3). Варто відзначити, що подібні структури досить часто зустрічаються на практиці. Наприклад, більшість отриманих при ІПД об'ємних НК матеріалів є термодинамічно нестійкими, оскільки навіть незначне термічне оброблення призводить до зміни фізичних властивостей [21, 22]. Можливо, у деяких випадках однією з причин формування нестабільної мікроструктури під час зміни температурно-силових умов є застосування занадто великих (вище 1 %) пружних нормальних деформацій, що визначаються в області  $N$ . У роботі [21] показано, що ІПД зразка із чистої міді  $\text{Cu}$ , застосовуючи міру обтискання в 99,89 % (істинні (логарифмічні) накопичені деформації  $e = 6,77$ ), дозволила отримати СМК структуру з середнім розміром зерен  $d \approx 200 - 300$  нм. Однак, модуль Юнга  $E$  продемонстрував аномальну чутливість до температурних змін під час відпалу, що, звичайно ж, відображається на фізичних властивостях матеріалу.

Також дослідження структурних змін дроту зі сталі Св - 08Г2С при волочінні зі зсувом показало, що при великій мірі обтискання відбувається зниження межі міцності досліджуваного матеріалу [18, 19]. Отже, одержані зразки також є схильними до виникнення нестабільної структури.

Варто зазначити, що результати, представлені на рис. 3.3, дозволяють підібрати оптимальні значення пружних нормальних деформацій  $\varepsilon_{ii}^e$ , які сприяють формуванню стійких СМК чи НК структур з високими концентраціями дефектів та стабільними фізико-механічними властивостями. Крім того, залежно від сформованих стаціонарних значень густини МЗ  $h_g^{st}$ , при фіксованій величині пружних нормальних деформацій  $\varepsilon_{ii}^e = \text{const}$ , за допомогою діаграми можна легко визначити тип та стійкість отриманої граничної структури, а також забезпечити формування стійких стаціонарних конфігурацій з необхідною густиною дефектів за допомогою варіації  $\varepsilon_{ii}^e$ .

Згідно з рис. 3.3 видно, що в області  $N^{st}$ , при стискальній гідростатичній деформації  $\varepsilon_{ii}^e < 0$ , можуть формуватися дві граничні структури, які розділяються нестійкими станами з області  $S$ . Однак можливість формування одночасно двох чи однієї стійкої конфігурації з високодисперсним розподілом структурних дефектів визначається іншими умовами – у першу чергу за допомогою значень зсувних деформацій. Тому, не зважаючи на те, що показники Ляпунова (3.12) не залежать від другого інваріанта  $I_2$ , формування самих особливих точок та їх кількість, як зазначалося раніше, визначається парою значень  $\varepsilon_{ii}^e$  і  $I_2$ . Виходячи з цього, у підрозділі 2.2 знайдено критичні співвідношення для  $I_2$  (вирази (2.14) та (2.17)), що визначають ФД різних режимів фрагментації металів чи сплавів, а також, у випадку співвідношення (2.17), відіграють роль біфуркаційного виразу [43], оскільки при переході через одержані значення здійснюються якісні зміни у фазовому просторі. Відбувається розгалуження або злиття положень рівноваги у систем (2.7), (2.8): змінюється кількість граничних структур. Водночас ФД, у цілому, демонструє області допустимих значень керувальних параметрів  $\varepsilon_{ii}^e$  і  $I_2$ , при яких здійснюються подібні перетворення.

Головна відмінність діаграми на рис. 3.3 від ФД на рис. 2.2 полягає у тому, що

ФД, у відповідності до встановлених областей, визначає тільки кількість сформованих граничних структур (стаціонарних станів), а діаграма на рис. 3.3 – їх стійкість. Очевидно, що в рамках представленої дводефектної системи (2.7), (2.8) реалізація стійких стаціонарних станів повністю визначається встановленим діапазоном пружних нормальних деформацій  $\varepsilon_{ii}^e$ , які, згідно з рис. 3.3 та даними в таблиці 3.2, лежать у межах областей  $N^{st}$  і  $S$ . Відповідні значення пружних зсувних деформацій  $I_2$ , відповідно до рис. 2.2, визначають вже кількість стійких станів і дозволяють впливати на формування більш дрібної СМК або НК структури.

Встановимо відповідність між координатами особливих точок  $O(h_{D1}^{st}, h_{g1}^{st})$ ,  $S(h_{D2}^{st}, h_{g2}^{st})$  і  $D(h_{D3}^{st}, h_{g3}^{st})$  та їх показниками Ляпунова (3.12), які в цілому характеризують кінетику системи. Оскільки вираз (3.12) має загальний вид, а співвідношення для координат (3.7) не представлено явно, розглянемо окремий випадок. Проведемо дослідження нерухомих станів, які реалізуються у фазовій площині на рис. 3.2 і задаються координатами: значення яких обчислені раніше за формулою Кардано та записані у таблиці 3.1. Таким чином, у таблиці 3.3 наведено розрахункові значення для показників Ляпунова, що характеризують фазову кінетику на рис. 3.2. Оскільки одержані фазові портрети однозначно відображають поведінку системи (2.7), (2.8) у всіх реалізованих на ФД областях (див. рис. 2.2), можна вважати, що встановлена класифікація особливих точок буде справедливою в рамках досліджуваної дводефектної моделі.

Проведене дослідження та характер поведінки фазових траєкторій на рис. 3.2, демонструють, що система у загальному випадку може функціонувати в трьох стаціонарних режимах  $O(h_{D1}^{st}, h_{g1}^{st})$ ,  $S(h_{D2}^{st}, h_{g2}^{st})$  і  $D(h_{D3}^{st}, h_{g3}^{st})$ , два з яких  $O(h_{D1}^{st}, h_{g1}^{st})$  і  $D(h_{D3}^{st}, h_{g3}^{st})$  відповідають формуванню стійких конфігурацій, а  $S(h_{D2}^{st}, h_{g2}^{st})$  – нестійкого стану. Разом із тим, аналіз відповідних показників Ляпунова показує, що точки  $O(h_{D1}^{st}, h_{g1}^{st})$  та  $D(h_{D3}^{st}, h_{g3}^{st})$  на фазовій площині представляють стійкий “вузол”, а  $S(h_{D2}^{st}, h_{g2}^{st})$  – “сідло”. У цілому, одержані діаграми дозволяють встановити оптимальні значення для першого та другого інваріантів  $\varepsilon_{ii}^e$  і  $I_2$ , на основі яких можна сформулювати рівноважну СМК чи НК структуру з

високими концентраціями дефектів та стабільними фізико-механічними властивостями.

Таблиця 3.3

Результати числового обчислення показників Ляпунова (3.12) для нерухомих точок, що представлені на рис. 3.2

Точка	Область ФД		Показники Ляпунова		
			точка $O$	точка $S$	точка $D$
1	$B$	$\lambda_1$	–	–	$-4,2 < 0$
		$\lambda_2$	–	–	$-26,41 < 0$
2	$A$	$\lambda_1$	$-1,32 < 0$	$0,80 > 0$	$-2,04 < 0$
		$\lambda_2$	$-28,21 < 0$	$-28,21 < 0$	$-28,21 < 0$
3	$A'$	$\lambda_1$	$-3,90 < 0$	$1,93 > 0$	$-3,84 < 0$
		$\lambda_2$	$-22,81 < 0$	$-22,81 < 0$	$-22,81 < 0$
4	$B'$	$\lambda_1$	$-4,53 < 0$	–	–
		$\lambda_2$	$-28,21 < 0$	–	–

### 3.3. Вплив часу релаксації на кінетику дводефектної системи

Дослідимо вплив часів релаксації основних нерівноважних змінних на кінетику дводефектної системи [137]. Зауважимо, що параметри  $\tau_{h_m}$  ( $m = g, D$ ) визначаються як обернено пропорційні величини до кінетичних коефіцієнтів та мають лише зміст часів релаксації, оскільки не відповідають фізичному визначенню зазначеного процесу. Згідно з проведеним дослідженням стійкості стаціонарних станів у попередньому підрозділі, очевидно, що в цілому різні співвідношення часів релаксації не призведуть до якісних (біфуркаційних) змін у фазовій кінетиці, а лише сприяють прояву універсальної кінетичної поведінки [51, 63].

На рис. 3.4 і рис. 3.5 представлено фазові портрети системи, які цілісно описують поведінку структурних дефектів під час ІПД при різних значеннях часів релаксації. Розглянуті випадки, згідно з ФД на рис. 2.2, відповідають двом режимам фрагментації. Отже, рис. 3.4 побудовано для великих деформацій з області  $B$  при нормальному  $\sigma_{ii}^e \approx -10^{-3} \mu$  Па і зсувному  $\sigma_{ij}^e \approx 2,2 \cdot 10^{-3} \mu$  Па пружних напруженнях (точка 1 на рис. 2.2), а рис. 3.5 відображає реакцію системи на

пружні напруження  $\sigma_{ii}^e \approx -5 \cdot 10^{-4} \mu \text{ Па}$  і  $\sigma_{ij}^e \approx 1,6 \cdot 10^{-3} \mu \text{ Па}$  з області  $A$  (точка 2 на рис. 2.2). Штрихові та штрихпунктирні лінії на рис. 3.4 і рис. 3.5 визначають точки ізоклін, фазові траєкторії, в яких мають горизонтальні і, відповідно, вертикальні дотичні. Ізокліни отримано шляхом обернення похідних у рівняннях (2.7) і (2.8) до нуля. Так, штрихпунктирні криві відповідають параметрам теорії, за яких густина МЗ  $h_g$  не змінюється, а штрихові лінії відповідають перманентному стану густини дислокацій  $h_D$ . Разом із тим, у точках перетину цих ліній формуються стаціонарні стани системи, кількість та стійкість яких, як зазначалося раніше, визначається характером механічного оброблення матеріалу, і встановлюється відповідно до представлених на рис. 2.2 і 3.3 діаграм. Так, на рис. 3.4 формується тільки одна стаціонарна точка  $D_B$  (існує одна гранична структура), яка у фазовому просторі визначається як стійкий “вузол”. У свою чергу, на рис. 3.5 реалізуються три нерухомі точки, дві з яких  $O_A$  і  $D_A$  відповідають стійким “вузлам” (формуються дві граничні структури), а третя  $S_A$  є “сідлом”. Із рисунків видно, що фазові траєкторії системи, залежно від початкових умов, збігаються з часом до цих стійких стаціонарних станів.

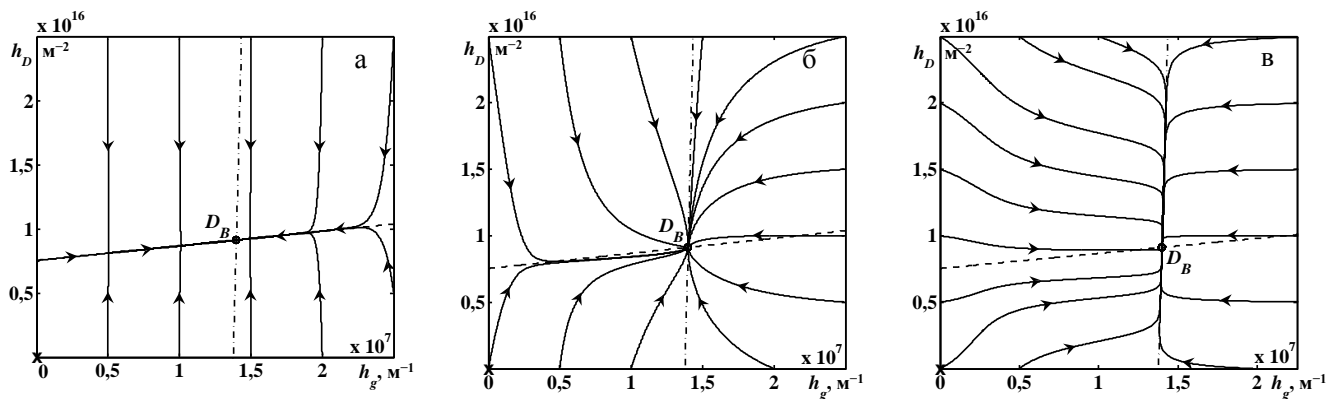


Рис. 3.4. Фазові портрети дводефектної системи (2.7), (2.8) при пружних деформаціях  $\varepsilon_{ii}^e = -0,1\%$ ,  $I_2 = 5 \cdot 10^{-4}\%$  (точка 1 на рис. 2.2) та значеннях часів релаксації: а –  $\tau_{h_g} > 10^{-1}\tau_{h_D}$ ; б –  $10^{-1}\tau_{h_g} > \tau_{h_D}$ ; в –  $10^{-2}\tau_{h_g} > \tau_{h_D}$

Інерційні властивості дводефектної системи вивчаються в рамках наступних випадків: відповідні часи релаксації набувають значень  $10^{-1}\tau_{h_D}$ ,  $10^{-1}\tau_{h_g}$  і  $10^{-2}\tau_{h_g}$ . У першому випадку розглядається фазова динаміка системи при прискоренні еволюції густини дислокацій  $h_D$ , в двох наступних – при прискоренні процесу

фрагментації МЗ  $h_g$ . Відзначимо, що всі одержані раніше залежності (рис. 3.2) реалізуються при значеннях  $\tau_{h_D} = 1/\gamma_D = 3^{-1} \cdot 10^{-25}$  Дж · м · с,  $\tau_{h_g} = 1/\gamma_g = 10^{-6}$  Дж · м<sup>-1</sup> · с, які, згідно з експериментальними даними, відображають природний хід еволюції структури матеріалу [17, 32, 33, 92, 93, 111, 128, 138]. На початкових стадіях оброблення, зазвичай, відбувається швидке накопичення густини дислокацій, які в подальшому рекомбінують і перерозподіляються по атомарним площинам. У результаті утворюються комірчасті структури, що з часом призводить до подрібнення кристалітів за рахунок реалізації пластичної течії. Проте не можна виключати інші сценарії еволюції структурних дефектів, тому дослідимо поведінку системи (2.7), (2.8) при відхиленні від цих величин.

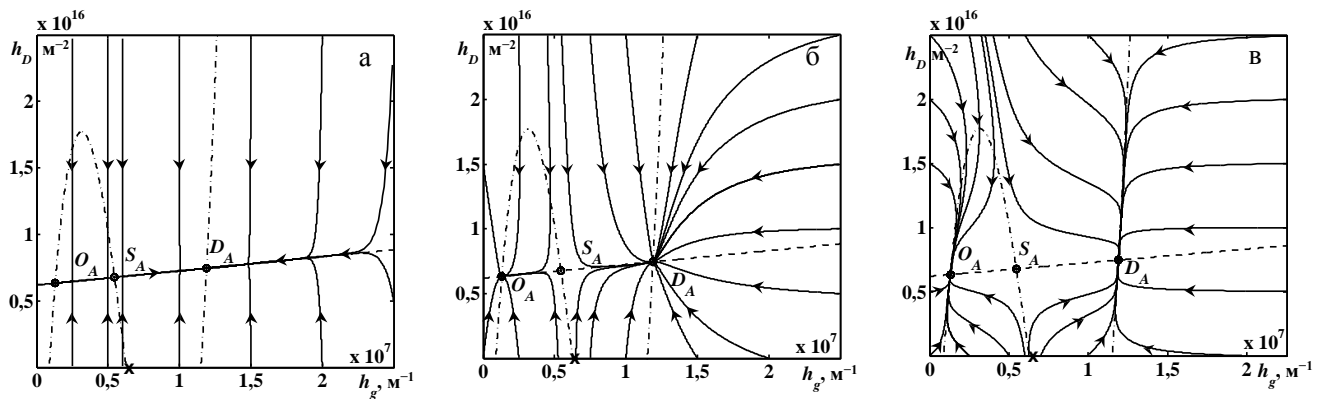


Рис. 3.5. Фазові портрети дводефектної системи (2.7), (2.8) при пружних деформаціях  $\varepsilon_{ii}^e = -0,05\%$ ,  $I_2 = 2,5 \cdot 10^{-4}\%$  (точка 2 на рис. 2.2) та значеннях часів релаксації: а –  $\tau_{h_g} > 10^{-1}\tau_{h_D}$ ; б –  $10^{-1}\tau_{h_g} > \tau_{h_D}$ ; в –  $10^{-2}\tau_{h_g} > \tau_{h_D}$

У цілому, можна виділити два етапи в динаміці нерівноважних змінних: на першому відбувається миттєва релаксація системи до однієї з ліній ізоклін, що визначається залежно від значень кінетичних коефіцієнтів  $\gamma_m$  ( $m = g, D$ ), а на другому – повільний рух уздовж цих кривих. Оскільки, на другій стадії рух здійснюється повільно, то можна вважати, що у будь-який момент часу виконується умова стаціонарності. У цьому випадку кристалічна структура матеріалу повільно доупорядковується, що супроводжується динамічним урівноваженням всіх внутрішньопротікаючих процесів, що пов'язані як із генерацією, так і анігіляцією структурних дефектів.

Отже, фазовий портрет, який представлено на рис. 3.4а, відповідає випадку

$\tau_{h_g} > 10^{-1}\tau_{h_D}$ , що демонструє прискорення процесу утворення дислокацій і, відповідно, характеризується більш швидкою їх релаксацією до стаціонарного стану. Як видно, всі фазові траєкторії з часом еволюціонують до лінійної ділянки. Водночас на першому етапі густина МЗ  $h_g$  практично не змінюється, а густина дислокацій  $h_D$ , навпаки, швидко зменшується вище лінійного відрізка, або збільшується, розглядаючи початкові наближення нижче від особливої лінії [139–142]. На другому етапі система перебуває тривалий час, оскільки особлива ділянка розташована дуже близько до лінії ізоклін (штрихова крива). Водночас нерівноважні змінні в ході процесу фрагментації металу при ІПД зазнають СПФ, оскільки відбуваються різкі переходи від малих значень до великих. Згідно з рисунком, лінійна ділянка практично повністю збігається з штриховою кривою, що відповідає стаціонарності  $h_D$ . Очевидно, що з подальшим зменшенням параметра  $\tau_{h_D}$  особлива область буде подовжуватися уздовж цієї лінії, що на границі можна розглядати як адіабатичне наближення  $\tau_{h_g} \gg \tau_{h_D}$ . Разом із тим час релаксації системи до стійкого стану (в особливій точці  $D_B$ ) повністю визначається еволюцією густини МЗ  $h_g$ .

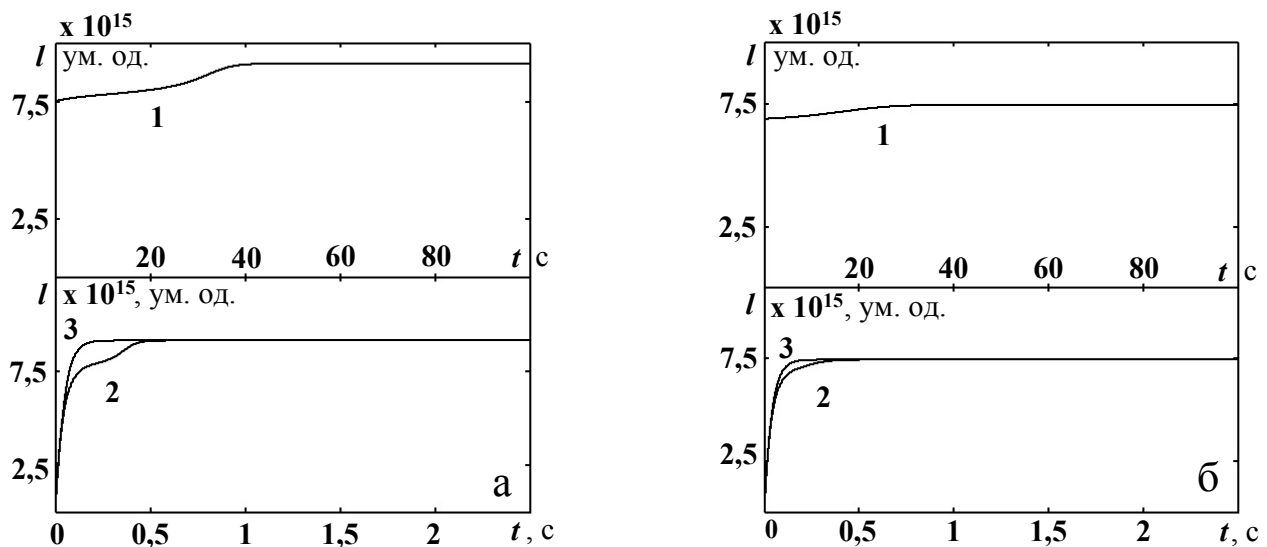


Рис. 3.6. Часова залежність пройденого конфігуративною точкою шляху  $l$  по фазовій траєкторії: а – крива 1 відповідають фазовому портрету на рис. 3.4а, крива 2 – рис. 3.4б і крива 3 – рис. 3.4в; б – крива 1 відповідає випадку, який представлено на рис. 3.5а, крива 2 – рис. 3.5б і крива 3 – рис. 3.5в. Початок шляху  $l$  позначено хрестиком на відповідних рисунках

Відповідно до часової залежності, яку представлено кривою 1 на рис. 3.6а,



видно, що конфігуративна точка здійснює швидкий рух по траєкторії, що розташована за межами лінійної ділянки. Із потраплянням до особливої області, рух структурних дефектів істотно сповільнюється. Разом із тим, як зазначалося раніше, ефект уповільнення проявляється тим сильніше, чим більше зменшувати  $\tau_{h_D}$ . У той же час, порівнюючи часову залежність пройденого шляху з кінетикою густини структурних дефектів (криві 1 і 2 на рис. 3.7), видно, що процес встановлення стаціонарного режиму при  $10^{-1}\tau_{h_D}$  сповільнюється приблизно в 10 разів. Таким чином, можна стверджувати, що процес прискорення однієї нерівноважної змінної призведе до відповідної обернено-пропорційної зміни часу релаксації для другої, що пояснюється взаємодією структурних дефектів різних типів на мезоскопічному рівні. У даному випадку, застосовуючи умову  $10\tau_{h_g} > \tau_{h_D}$ , отримано повністю ідентичний результат. Однак, важливо зазначити, що процес встановлення динамічної рівноваги у системі в будь-якому випадку, доки виконується нерівність  $\tau_{h_g} > \tau_{h_D}$ , визначається виключно густиною МЗ  $h_g$ . Така поведінка безумовно відповідає спостережуваним закономірностям під час ПД, оскільки процес самоорганізації комірчастих структур, у результаті якого відбувається утворення нових МЗ, займає більшу кількість часу порівняно з формуванням елементарних дислокацій [3, 17, 113, 143, 144].

Рисунок 3.4б побудовано для випадку, коли часи релаксації густини дефектів задаються виразом  $10^{-1}\tau_{h_g} > \tau_{h_D}$ , що порівняно з попереднім випадком являє уповільнення кінетики нерівноважного параметра  $h_D$  ( $\tau_{h_g} > 10\tau_{h_D}$ ) або прискорення  $h_g$ , що рівнозначно. Як видно у даному випадку особливі ділянки практично не формуються. Процес фрагментації протікає інтенсивно, і система швидко еволюціонує до стійких стаціонарних станів. Можна стверджувати, що структурні дефекти мають взаємно-інтенсифікаційну (підсилювальну) дію один на одного у процесі ПД, що також може проявлятися під впливом і інших, неврахованих, типів дефектів під час фрагментації металу чи сплаву і сприяти поясненню багатьох спостережуваних на практиці явищ [126].

Розглядаючи рух конфігуративної точки, шлях якої представлено кривою 2 на рис. 3.6а, очевидно, що на початковому етапі оброблення система здійснює

більш швидкий рух по фазовій траєкторії. У результаті такого руху кристалічна структура зразка швидко досягає стадії насичення, оскільки відбувається інтенсивне енергетичне “накачування” системи за рахунок зростання внутрішньої енергії (дефектності матеріалу). Після досягнення деякого значення дефектності, процес істотно сповільнюється, і в кристалічній структурі матеріалу здійснюється відносно повільне впорядкування. Однак разом із тим, для встановлення стаціонарного режиму буде потрібно в декілька разів менше часу порівняно з кривими 1 і 2 на рис. 3.7.

Фазовий портрет на рис. 3.4в відповідає випадку  $10^{-2}\tau_{h_g} > \tau_{h_D}$ . Тут, аналогічно до рис. 3.4а, можна виділити два етапи: відносно швидка релаксація до майже вертикальної лінійної ділянки, яка є близькою до штрихпунктирної лінії ізоклін, і подальший повільний рух уздовж нього, що також спостерігається в динаміці кривої 3 на рис. 3.6а. Проте у даному випадку особлива ділянка досягається вже в результаті відносно малих змін  $h_D$  і швидкої релаксації  $h_g$ , якщо початкові наближення розташовані правіше від штрихпунктирної кривої, або за рахунок інтенсивного зростання густини МЗ при розташуванні  $h_{g0}(t=0)$  зліва. Разом із тим час, витрачений на формування стаціонарного стану, виявляється меншим порівняно з процесом, що протікає згідно з кривою 2 на рис. 3.6а і еволюцією системи при  $\tau_{h_g} > \tau_{h_D}$  (криві 1 і 2 на рис. 3.7). Очевидно, що зменшення параметра  $\tau_{h_g} \rightarrow 0$  призведе до перманентності  $h_D$  на первинній стадії процесу фрагментації і, згодом, до більш вираженої майже вертикальної лінійної ділянки. На границі ця ділянка повністю збігається з лінією ізоклін, що можна розглядати як обернене адіабатичне наближення  $\tau_{h_D} \gg \tau_{h_g}$ .

Отже, універсальність кінетичної поведінки дводефектної системи проявляється як при наближенні до прямої  $\tau_{h_g} \gg \tau_{h_D}$ , так і до оберненої  $\tau_{h_D} \gg \tau_{h_g}$  адіабатики. У першому випадку, вихід на лінійну, майже горизонтальну, ділянку відбувається у результаті швидкої еволюції густини дислокацій  $h_D$  при практично перманентному стані іншого нерівноважного параметра  $h_g$  (рис. 3.4а), а у другому спостерігається зворотна картина – значення густини МЗ  $h_g$  змінюються дуже швидко, а густина дислокацій незначно (рис. 3.4в). У проміжній області

(рис. 3.4б), універсальність практично не проявляється. Загалом, особливим ділянками, що спостерігаються, можна надати значення притягувальної множини, що відзначено у роботі [139] як “русло великої річки” та характерно для різних фізичних систем [140–142]. Водночас універсальність кінетичної картини фазового переходу полягає у тому, що незалежно від початкових умов з наближенням до адіабатичної межі  $\tau_{h_D} \rightarrow 0$  (рис. 3.4а) або  $\tau_{h_g} \rightarrow 0$  (рис. 3.4в) система швидко еволюціонує до відповідної особливої ділянки, положення якої залежить тільки від способу механічного оброблення і власне значень  $\varepsilon_{ii}^e$ ,  $I_2$ , та в подальшому повільно розвивається вздовж цих траєкторій.

На рис. 3.5 зображено фазові портрети для таких же співвідношень часів релаксації, що і рис. 3.4, однак при пружній деформації, що визначає можливість одночасного існування двох граничних структур. Тут, як говорилося раніше, реалізуються дві стійкі стаціонарні структури (точки  $O_A$  і  $D_A$ ), що відповідають впорядкованим фазам або максимумам ефективного потенціалу  $V(h_g)$ , і один нестійкий стан в особливій точці  $S_A$ , що відповідає формуванню неупорядкованої фази або мінімуму  $V(h_g)$ . Зауважимо, що у даному випадку, фазові портрети на рис. 3.5 відображають зміни, що характерні для фазових переходів першого роду [121, 140]. Відтак, залежно від варіювання величини  $\tau_{h_m}$  ( $m = g, D$ ), формуються одночасно дві лінійні ділянки (визначені як “русло великої річки”), до яких згодом прагнуть всі фазові траєкторії. Одночасне існування цих ділянок пояснюється природою штрихпунктирної кривої і характерними умовами для пружної деформації (значеннями  $\varepsilon_{ii}^e$  і  $I_2$ ), при яких стаціонарне кубічне рівняння має три розв’язки. У такий спосіб, очевидно, що на фазових портретах з’являється додаткова “репелерна” ділянка, яка проходить через сідлову точку  $S_A$  (див. штрихпунктирну криву) і відображає енергетичний “бар’єр” системи (див. вигляд ефективного потенціалу  $V(h_g)$  на рис. 2.3 у підрозділі 2.2), що розділяє лінійні області. Водночас фазові траєкторії за певних умов огинають цю ділянку, віддаляючись з часом від лінії її розташування.

Застосовуючи необхідну умову існування екстремів до рівняння ізоклін, фазові траєкторії в яких матимуть вертикальні дотичні (тобто до штрихпунк-

тирної кривої на рис. 3.4 та рис. 3.5, що визначається з рівняння (2.8) при  $\tau_{h_g} \partial h_g / \partial t = 0$ ), одержимо вираз для точок перегину

$$h_g^{c1,2} = \frac{2\varphi_{2g} \pm \sqrt{4\varphi_{2g}^2 - 12\varphi_{3g}\varphi_{1g}}}{6\varphi_{3g}}, \quad (3.19)$$

що розділяють максимуми з мінімумом на стаціонарній кривій  $h_g$ , або точки, що позначають межі “репелерної” ділянки. Очевидно, що положення цієї ділянки, як і всієї штрихпунктирної кривої, визначається зовнішніми умовами: величиною  $\varepsilon_{ii}^e$  і  $I_2$ .

При  $\tau_{h_g} > 10^{-1}\tau_{h_D}$  спостерігається поведінка системи, що представлена на рис. 3.5а. Тут, як і на рис. 3.4а, фазові траєкторії швидко еволюціонують до лінійних ділянок, що близькі до штрихової лінії ізоклін при збереженні значень змінної  $h_g$ . Розглядаючи початкові наближення зліва від особливої точки  $S_A$  (оскільки ділянка “репелера” при даному співвідношенні часів релаксації практично не проявляється), формується перша лінійна ділянка, уздовж якої система повільно релаксує до стаціонарного стану  $O_A$ . Друга ділянка, що демонструє протяжну еволюцію системи до впорядкованої фази у точці  $D_A$ , реалізується при початкових умовах, що розташовані праворуч від  $S_A$ . Проте залежно від розташування початкових умов відносно особливих ділянок, процес їх досягнення на першому етапі оброблення матеріалу може супроводжуватися як миттєвою генерацією, так і анігіляцією густини дислокацій  $h_D$ . Із наближенням до адіабатичної межі  $\tau_{h_D} \rightarrow 0$ , спостерігається, подібно до випадку на рис. 3.4а, уповільнення в реалізації стаціонарних режимів. Ця поведінка також виявляється при вивченні часової залежності пройденого шляху по фазовій траєкторії (крива 1 на рис. 3.6б).

Досліджуючи наближення до оберненої адіабатики  $\tau_{h_D} \gg \tau_{h_g}$ , якій відповідають випадки на рис. 3.5б, в, видно, що зі зменшенням параметра  $\tau_{h_g}$  в універсальній поведінці системи спостерігається плавний перехід від майже горизонтальних лінійних ділянок до більш вертикальних. Разом із тим загальний час еволюції до стійких стаціонарних станів, на відміну від попереднього випадку на рис. 3.5а, зменшується з наближенням до межі  $\tau_{h_g} \rightarrow 0$ , що також проявляється у харак-

тері еволюції кривих 2, 3 на рис. 3.6б. Вивчаючи особливості фазової динаміки нерівноважних змінних на рис. 3.5в, чітко спостерігається формування трьох особливих ділянок, дві з яких мають притягувальний характер і визначаються як “русло великої річки”, а третя, яка розділяє квазівертикальні ділянки, має протилежну природу, більш відому як “репелер”. Як видно, фазові траєкторії системи прагнуть уникнути перетинання з областю “репелера”. Очевидно, що з подальшим зменшенням часу релаксації густини МЗ  $\tau_{h_g}$ , майже вертикальні ділянки будуть подовжуватися уздовж штрихпунктирної залежності, а на границі повністю збігатимуться зі стаціонарною кривою.

Отже, універсальність фазової кінетики дводефектної системи спостерігається як при наближенні до прямої  $\tau_{h_g} \gg \tau_{h_D}$ , так і зворотної  $\tau_{h_D} \gg \tau_{h_g}$  адіабатики для будь-якого режиму фрагментації. Розглянемо на додаток поведінку системи (2.7), (2.8) в рамках представлених адіабатичних наближень. Оскільки основні залежності у попередньому розділі 2 одержано відповідно до прямого наближення  $\tau_{h_g} \gg \tau_{h_D}$ , при якому еволюція густини дислокацій зазнає миттєвого “насичення” і відразу виходить на стаціонарний режим, а процес фрагментації металевої структури визначається еволюцією густини МЗ  $h_g$ , дослідимо дводефектну систему (2.7), (2.8) відносно оберненого адіабатичного наближення  $\tau_{h_D} \gg \tau_{h_g}$ .

Використовуючи умову  $\tau_{h_D} \gg \tau_{h_g}$  та поклав у рівнянні (2.8)  $\tau_{h_g} \partial h_g / \partial t = 0$ , отримуємо

$$\varphi_{0g} - \varphi_{1g}h_g + \varphi_{2g}h_g^2 - \varphi_{3g}h_g^3 + \varphi_{gD}h_D = 0. \quad (3.20)$$

Оскільки одержаний вираз (3.20) залежить від динамічної нерівноважної змінної  $h_D$ , очевидно, що стаціонарні значення для густини МЗ  $h_g$ , що реалізуються під час ІПД, визначаються характером еволюції густини дислокацій. Розрахунок кінетичної залежності (2.7) відбувається в два етапи: знаходяться стаціонарні розв’язки кубічного рівняння (3.20); підставляючи отримані значення до диференціального рівняння (2.7), проводиться числове інтегрування методом Рунге – Кутта 4-го порядку точності. Разом із тим одержана залежність

представляє не що інше, як еволюцію, яка описується рівнянням типу Ландау – Халатнікова:

$$\tau_{h_D} \frac{\partial h_D}{\partial t} = \frac{\partial V}{\partial h_D}. \quad (3.21)$$

Ефективний потенціал у даному випадку визначається відповідно до виразу

$$V(h_D) = \int_0^{h_D} F(h'_D) dh'_D, \quad (3.22)$$

де функція  $F(h'_D)$  задає ефективну термодинамічну силу  $\partial V / \partial h_D \equiv F(h_D)$ . Її вплив спрямовує нерівноважну змінну  $h_D$  до притягувального атрактора (стаціонарної структури) [46–48]. Залежно від кількості розв'язків (3.20), що реалізуються відносно параметру  $h_g$ , формуються одна або дві стаціонарних структури за  $h_D$ .

Застосовуючи необхідну умову існування екстремумів  $\partial V / \partial h_D = 0$  ефективного потенціалу (3.22), приходимо до системи однорідних рівнянь

$$\varphi_{0D} - \varphi_{1D}h_D + \varphi_{gD}h_g = 0, \quad (3.23)$$

$$\varphi_{0g} - \varphi_{1g}h_g + \varphi_{2g}h_g^2 - \varphi_{3g}h_g^3 + \varphi_{gD}h_D = 0. \quad (3.24)$$

Очевидно, що одержані вирази для основних закономірностей будуть повністю ідентичні випадку  $\tau_{h_g} \gg \tau_{h_D}$ .

Часові залежності на рис. 3.7 демонструють, що система, незалежно від адіабатичного наближення (криві 1' та 2'), еволюціонує до єдиного з реальними часовими залежностями (криві 1 та 2) стаціонарного стану, що, на відміну від спостережуваних на рис. 3.6 закономірностей, формується в однаковому часовому інтервалі. Проте поведінка нерівноважних змінних під час досягнення цих значень визначається більш різкими переходами. Таким чином, крива 1' відображає еволюцію системи в рамках оберненого адіабатичного наближення  $\tau_{h_D} \gg \tau_{h_g}$ . Згідно з вигляду кривої, очевидно, що густина дислокацій практично миттєво виходить на стаціонарний режим, що на початковому етапі супроводжується відхиленням від реальної кінетики системи (2.7), (2.8) (крива 1). Однак з часом це відхилення зменшується і система поступово еволюціонує до стаціонарного стану. Розглядаючи поведінку системи для прямої адіабатики  $\tau_{h_g} \gg \tau_{h_D}$ , видно, що

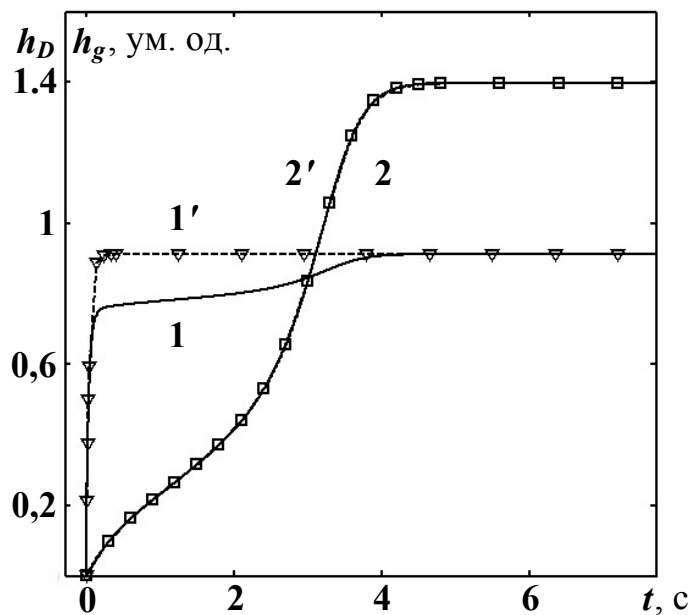


Рис. 3.7. Кінетика фрагментації металів під час ПД при значеннях інваріантів  $\varepsilon_{ii}^e = -0,1\%$ ,  $I_2 = 5 \cdot 10^{-4}\%$ . Крива 1 демонструє еволюцію густини дислокацій  $h_D(t)$  відповідно до рівняння (2.7), а крива 2 – зміни  $h_g(t)$  для рівняння (2.8) при  $\tau_{h_D} = 1/\gamma_D = 3^{-1} \cdot 10^{-25}$  Дж·м·с,  $\tau_{h_g} = 1/\gamma_g = 10^{-6}$  Дж·м<sup>-1</sup>·с. Криві 1' і 2' відображають часові залежності в рамках адиабатичних наближень  $\tau_{h_D} \gg \tau_{h_g}$  та, відповідно,  $\tau_{h_g} \gg \tau_{h_D}$

еволюція густини МЗ  $h_g(t)$  (крива 2') повністю збігається з реальною часовою залежністю (крива 2), що цілком логічно, і пояснюється прийнятими на початку значеннями часів релаксації  $\tau_{h_m}$  ( $m = g, D$ ).

Безумовно, з точки зору описання процесів, що спостерігаються, і природи фрагментації металів чи сплавів під час ПД більш інформативно досліджувати точну кінетику дводефектної системи (2.7), (2.8). Проте вивчення граничних адиабатичних випадків грає не менш важливу роль, оскільки дозволяє отримати додаткові залежності, що визначають умови існування декількох граничних структур і дозволяють підібрати оптимальні значення для пружних деформацій, які сприяють найбільш ефективному формуванню впорядкованої СМК чи НК структури з високими концентраціями дефектів та стабільними фізико-механічними властивостями. Тому важливо розуміти поведінку кристалічної структури матеріалу в граничних адиабатичних випадках. У такий спосіб, підтверджено адекватність одержаних раніше результатів.

### Висновки до розділу 3

1. На основі дводефектної моделі, що отримана в рамках нерівноважної еволюційної термодинаміки, досліджено фазову динаміку процесу фрагментації металів чи сплавів при ІПД.

2. Одержано залежність швидкості змін густини МЗ під час ІПД, що дозволило однозначно встановити вплив пружних деформацій на процес виникнення та характер наближення до рівноважного (стаціонарного) стану системи. Показано, що стаціонарний стан формується у результаті динамічного урівноваження процесів генерації і анігіляції структурних дефектів.

3. Побудовано фазові портрети дводефектної системи, що дозволяють вивчити поведінку системи у процесі формування стаціонарних СМК чи НК структур відповідно до областей на ФД. Дослідження стійкості фазової кінетики нерівноважних змінних у процесі формування стаціонарних СМК чи НК структур дозволило отримати загальний вираз для показників Ляпунова, що характеризують у цілому поведінку динамічної системи у фазовому просторі. Показано, що система у загальному випадку характеризується наявністю трьох особливих точок (стаціонарних станів), реалізація яких залежить від характеру прикладеного навантаження під час ІПД, і які можуть визначатися тільки двома типами: «вузол» або «сідло».

4. Побудовано діаграму, яка наочно демонструє області формування стійких і нестійких особливих точок. Виявлено, що стійкість розв'язків розглянутої дводефектної системи може порушуватися лише при застосуванні великих пружних нормальних деформацій. Встановлено 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.

5. Вивчено вплив часів релаксації на фазову динаміку нерівноважних змінних системи. Показано, що з наближенням як до прямої  $\tau_{h_g} \gg \tau_{h_D}$ , так і до оберненої адіабатики  $\tau_{h_D} \gg \tau_{h_g}$  система демонструє універсальну кінетичну поведінку. На



фазових портретах проявляється формування особливих ділянок, більш відомих як “русло великої річки”, до яких, незалежно від початкових умов, швидко еволюціонують всі фазові траєкторії. Виявлено, що процес фрагментації металу чи сплаву під час ШД здійснюється в два етапи: на першому відбувається швидка еволюція густини структурних дефектів до певної притягувальної ділянки та подальший повільний розвиток уздовж неї.

6. Досліджуючи дводефектну систему в рамках прямого та оберненого адіабатичних наближень, показано, що система у будь-якому випадку еволюціонує до єдиних стаціонарних станів, що формуються за однакою за порядком інтервали часу.

Результати, що наведені у даному розділі дисертаційної роботи, опубліковано в статтях [50, 51] та тезах доповідей на конференціях [63–66].

## РОЗДІЛ 4

### ВПЛИВ АДТИВНОГО ГАУСІВСЬКОГО ШУМУ НА ПРОЦЕС ФРАГМЕНТАЦІЇ МЕТАЛІВ ЧИ СПЛАВІВ ПРИ ІПД

Фізичні процеси, що протікають у металах при ІПД, із одного боку, досить складні, а з іншого – універсальні [3, 5, 145]. З метою опису процесу фрагментації металевої структури у розділах 2 та 3 дисертаційної роботи розвивається узагальнена термодинамічна модель, що базується на поєднанні принципів класичної нерівноважної термодинаміки та еволюційних рівнянь Ландау (див. підрозділ 1,3). У рамках підходу вдалося правильно відтворити еволюцію дефектної підсистеми (дислокацій та МЗ), а також дослідити умови формування та стійкість утворених граничних (стаціонарних) СМК чи НК структур. У той же час запропонована теорія не враховує вплив флуктуацій основних параметрів (шуму), що в деяких випадках може істотно змінити характер еволюції системи та навіть призвести до виникнення нових станів [137, 146, 147].

Даний розділ дисертаційної роботи присвячений дослідженню процесу еволюції структурних дефектів у ході ІПД із урахуванням впливу адитивних флуктуацій основних параметрів, що дозволить більш якісно представити можливі режими фрагментації та описати супроводжувальні самоорганізовані процеси, які неможливо відобразити, застосовуючи детерміністичне наближення [32, 33, 41, 46–50, 53–56, 95, 137, 147–149].

У такий спосіб, модифікація степеневого розвинення для густини внутрішньої енергії та введення адитивних шумів основних параметрів дозволили більш точно описати самоузгоджену поведінку структурних дефектів у процесі утворення граничних СМК чи НК структур. Дослідження умов формування стаціонарних станів системи дозволило визначити можливі сценарії та режими процесу фрагментації полікристалічної структури. 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

із різними розмірами зерен. Побудовано розподіли реалізацій густин МЗ, які дозволяють кількісно оцінити склад зернистої структури в об'ємі металевого зразка. Аналіз часових залежностей густин МЗ за допомогою швидкого перетворення Фур'є, виявив наявність у системі корельованих флуктуацій. Водночас встановлено, що поведінка спектральної залежності пов'язана з перебігом передісторії нерівноважного процесу. Дослідження АКФ випадкових переходів дозволило визначити вигляд кореляційної функції та виявити частотні характеристики процесу фрагментації. Досліджено самоподібний режим, що показує можливість підбору параметрів, при яких утворюються безліч граничних структур із різними розмірами зерен. Визначено параметри, при яких розподіл імовірності реалізації значень густини МЗ має степеневий вид.

#### 4.1. Ефективний потенціал

Представимо базовий енергетичний потенціал для густини внутрішньої енергії у наступному виді:

$$u(h_g, h_D) = u_0 + \sum_{m=g,D} (\varphi_{0m} h_m - \frac{1}{2} \varphi_{1m} h_m^2 + \frac{1}{3} \varphi_{2m} h_m^3 - \frac{1}{4} \varphi_{3m} h_m^4) + \varphi_{gD} h_g h_D - \psi_{gD} h_g^2 h_D - \phi_{gD} h_g h_D^2, \quad (4.1)$$

де  $u_0$ ,  $\varphi_{km}$ ,  $\varphi_{gD}$ ,  $\psi_{gD}$ ,  $\phi_{gD}$  – сталі коефіцієнти, які відображають рівень відліку внутрішньої енергії та енергію взаємодії дефектів один із одним і, відповідно, із дефектами інших структурних рівнів, тобто характеризують загалом їх нерівноважність. Зокрема, коефіцієнти  $u_0$  та  $\varphi_{km}$  ( $k = 0, 1$ ) залежать від керувального параметра  $\varepsilon_{ij}^e$  (пружної деформації) та визначаються відповідно до визначень (2.2)- (2.4) у розділі 2.

Необхідно зазначити, що вираз для густини внутрішньої енергії (4.1), на відміну від відповідного базового співвідношення (2.1) у розділі 2, враховує самоузгоджену поведінку густини 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 відповідно до закономірностей розвинення, тобто впливає із необхідності формування

стаціонарних станів (максимумів ефективного термодинамічного чи синергетичного потенціалу) за рахунок знаочергованості змінних, що з фізичної точки зору відображає принцип Ле-Шательє, згідно з яким термодинамічний процес більш високого рівня спрямований на компенсацію ефектів від термодинамічних процесів нижчого рівня [53, 54]. Окрім цього, введені доданки в подальшому сприяють виникненню мультиплікативного результуючого шуму (залежного від параметра порядку), що виступає причиною виникнення додаткових стаціонарних станів, забезпечує перехід між граничними структурами та активує фазові переходи у системі (наприклад, у випадку сплавів – виділення та розчин фаз, мартенситні перетворення, аморфізація).

У представленому дослідженні обмежимося розглядом спрощеного випадку: степеневе розвинення (4.1) у випадку дислокацій будемо враховувати тільки до другої степені за густиною дислокацій (разом із тим  $\varphi_{2D} = 0$  Дж · м<sup>3</sup>,  $\varphi_{3D} = 0$  Дж · м<sup>5</sup>) [32], та у випадку реалізації взаємодії  $h_D$  з іншими структурними дефектами (з МЗ) – до першої (відповідно  $\phi_{gD} = 0$  Дж · м<sup>2</sup>). Такий вибір дозволяє досягти кращої відповідності з поведінкою реальних систем при великих пластичних деформаціях.

З метою проведення числового аналізу, визначено набір коефіцієнтів.

Таблиця 4.1

Параметри дводефектної моделі з урахуванням шуму

$\varphi_{0g}^*$	$g_g$	$\bar{M}_g$	$\bar{\mu}_g$	$\varphi_{1g}^*$	$e_g$	$\varphi_{2g}$	$\varphi_{3g}$
0,4 Дж · м <sup>-2</sup>	12 Дж · м <sup>-2</sup>	$2,5 \cdot 10^5$ Дж · м <sup>-2</sup>	$3 \cdot 10^5$ Дж · м <sup>-2</sup>	$3 \cdot 10^{-6}$ Дж · м <sup>-1</sup>	$3,6 \cdot 10^{-4}$ Дж · м <sup>-1</sup>	$5,6 \cdot 10^{-13}$ Дж	$3 \cdot 10^{-20}$ Дж · м
$\varphi_{0D}^*$	$g_D$	$\bar{M}_D$	$\bar{\mu}_D$	$\varphi_{1D}^*$	$e_D$	$\varphi_{gD}$	$\psi_{gD}$
$5 \cdot 10^{-9}$ Дж · м <sup>-1</sup>	$2 \cdot 10^{-8}$ Дж · м <sup>-1</sup>	0 Дж · м <sup>-1</sup>	$1,65 \cdot 10^{-4}$ Дж · м <sup>-1</sup>	$10^{-24}$ Дж · м	$6 \cdot 10^{-23}$ Дж · м	$10^{-16}$ Дж	$10^{-23}$ Дж · м

Як зазначалося раніше, вибір сталей здійснюється феноменологічно, тобто значення обираються відповідно до спостережуваних під час оброблення методами ІПД закономірностей [3, 10, 12, 13, 110], у результаті яких у матеріалі форму-

ються стаціонарні СМК чи НК структури. Техніка вибору деяких значень представлено у роботах [32, 33, 92, 93] та частково описана у підрозділі 2.1, Відмітимо, що значення основних коефіцієнтів отримано експериментально при дослідженні мідної структури, проте варто зазначити, що запропонована модель (4.1) має широкий спектр застосувань та, за необхідності, при відповідних параметрах буде відображати справедливі результати для будь-якого металу.

## 4.2. Вплив адитивного шуму

Дослідимо вплив адитивного гаусієвського шуму на процес формування граничних СМК чи НК структур. Система еволюційних рівнянь для параметрів стану визначається наступним чином [46–50, 52–56]:

$$\tau_{h_D} \frac{\partial h_D}{\partial t} = \varphi_{0D} - \varphi_{1D} h_D + \varphi_{gD} h_g - \psi_{gD} h_g^2 + \sqrt{N_D} \xi_D(t), \quad (4.2)$$

$$\tau_{h_g} \frac{\partial h_g}{\partial t} = \varphi_{0g} - \varphi_{1g} h_g + \varphi_{2g} h_g^2 - \varphi_{3g} h_g^3 + \varphi_{gD} h_D - 2\psi_{gD} h_g h_D + \sqrt{N_g} \xi_g(t), \quad (4.3)$$

де  $\tau_{h_m}$  – обернено пропорційні величини кінетичних коефіцієнтів, що мають зміст часу релаксації параметрів порядку, які відображають інерційні властивості системи. У правих частинах рівнянь присутні стохастичні доданки, що моделюють вплив шумів основних параметрів (внутрішній шум) із інтенсивностями  $N_{D,g}$  [150, 151], 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 МЗ двох типів: висококутових або геометрично необхідних меж, які виникають у результаті різноманітної активності системи ковзання довкола МЗ; меж комірок або субмеж, які часто називають випадковими дислокаційними межами, оскільки такі межі виникають при взаємній реалізації статично-випадкового перетину дислокацій у середині зерен [113, 144]. У ході деформації, за рахунок накопичення дислокацій, комірки поступово перетворюються у субзерна, що обмежені малокутовими межами, та в подальшому стають висококутовими нанозернами. Отже, взаємодія МЗ із дислокаціями, іншими межами та структурними неоднорідностями призводить

до прояву внутрішніх флуктуацій та зміни розорієнтування зернистої структури металевго зразка. Розглядаючи найпростіший вид взаємодій між дефектами одного рівня, виникнення флуктуацій внутрішніх змінних відбувається за рахунок дії самоорганізованих процесів. Із точки зору параметра  $h_g$  це означає, що у початковий момент часу у матеріалі одночасно присутні як крупні розорієнтовані зерна, так і дрібні (що представляють статичний шум або хаос), взаємодія яких у процесі оброблення визначає конкурентну боротьбу та переходи між різними структурними станами чи фазами речовини. У випадку  $h_D$  інтенсивність флуктуацій  $N_D$  враховує стохастичну взаємодію ансамблю дислокацій між собою, що супроводжується зміною коливальних спектрів та проявом різного роду колективних ефектів (наприклад, формується комірчаста структура [3, 113, 143, 144]). Функції  $\xi_i(t)$  ( $i = D, g$ ) відображають випадкові гаусівські величини (білий шум), що мають АКФ<sup>14</sup>, яка математичною описується за допомогою  $\delta$ -функції Дірака, та задовільняють наступним моментам [152]:

$$\langle \xi_i(t) \rangle = 0, \quad \langle \xi_i(t) \xi_j(t') \rangle = 2\delta_{ij} \delta(t - t'). \quad (4.4)$$

Множник перед символом Кронекера  $\delta_{ij}$  дозволяє однозначно визначити вигляд рівняння Фоккера – Планка та придати виразу  $N(h_g)$  сенс коефіцієнта дифузії<sup>15</sup>. Зокрема, константа, яка визначає інтенсивність шуму (міру інтенсивності флуктуацій випадкової величини) також врахована у наведеній функції  $N(h_g)$ .

Використовуючи адіабатичне наближення  $\tau_{h_g} \gg \tau_{h_D}$ , покладемо в (4.2)  $\tau_{h_D} \partial h_D / \partial t = 0$ , та провівши перетворення одержуємо:

$$h_D = \frac{\varphi_{0D}}{\varphi_{1D}} + \frac{\varphi_{gD}}{\varphi_{1D}} h_g - \frac{\psi_{gD}}{\varphi_{1D}} h_g^2 + \frac{\sqrt{N_D}}{\varphi_{1D}} \xi_D(t). \quad (4.5)$$

Підставляючи отриманий вираз (4.5) до рівняння (4.3), визначаємо нелінійне рівняння типу Ланжевена<sup>16</sup> для однієї випадкової змінної  $h_g$ :

$$\tau_{h_g} \dot{h}_g = F(h_g) + \sqrt{N(h_g)} \xi(t), \quad (4.6)$$

<sup>14</sup> АКФ відображає залежність взаємозв'язку між функцією (шумовим сигналом) та її зсунутою копією від величини часового зсуву  $t - t'$ .

<sup>15</sup> У даному сенсі коефіцієнт відображає процес взаємного проникнення структурних дефектів різних рівнів між собою, що викликає самоорганізоване вирівнювання концентрацій дефектів у всьому об'ємі.

<sup>16</sup> Стохастичне диференціальне рівняння, що описує броунівський рух.

де  $\xi(t)$  – результуюча сила Ланжевена (гаусів білий шум)<sup>17</sup>. Узагальнена сила  $F(h_g)$ , що визначає детерміновану кінетику системи, та ефективна інтенсивність флуктуацій випадкової величини  $\sqrt{N(h_g)}$  (квадрат якої визначає коефіцієнт дифузії  $N(h_g)$ ) задаються співвідношеннями:

$$F(h_g) \equiv \varphi_{0g} + \frac{\varphi_{0D}\varphi_{gD}}{\varphi_{1D}} + \left( \frac{\varphi_{gD}^2}{\varphi_{1D}} - 2\frac{\psi_{gD}\varphi_{0D}}{\varphi_{1D}} - \varphi_{1g} \right) h_g + \\ + \left( \varphi_{2g} - 3\frac{\psi_{gD}\varphi_{gD}}{\varphi_{1D}} \right) h_g^2 + \left( 2\frac{\psi_{gD}^2}{\varphi_{1D}} - \varphi_{3g} \right) h_g^3, \quad (4.7)$$

$$N(h_g) \equiv \frac{(\varphi_{gD} - 2\psi_{gD}h_g)^2}{\varphi_{1D}^2} N_D + N_g. \quad (4.8)$$

Останнє визначається відповідно до властивостей дисперсії гаусівських випадкових величин [152]. Очевидно, що  $N(h_g)$  залежить від параметра порядку  $h_g$ , тому шум у рівнянні (4.6) має мультиплікативний характер, а отже може призвести до нерівноважних фазових чи структурних переходів та формування нових станів системи (максимумів синергетичного потенціалу), що неможливо в рамках вивченого раніше детерміністичного підходу [46–51, 55, 56].

Оскільки розв’язок стохастичного диференціального рівняння з силою Ланжевена (4.6), яка має нормальний розподіл та  $\delta$ -корельовану АКФ, з математичної точки зору неможливо отримати<sup>18</sup> [152], зазвичай розглядаються тільки статистичні характеристики його розв’язків. Відомо, що рівнянню Ланжевена (4.6) ставиться у відповідність безліч форм рівнянь Фоккера – Планка, яке описує еволюцію функції густини розподілу  $p(h_g, t)$  стохастичних флуктуюючих змінних (у даному випадку параметра  $h_g$ ). Найчастіше для обчислення розв’язку використовують такі підходи: числення в інтерпретації Іто ( $I$ -форма), числення Стратоновича ( $S$ -форма) та кінетична форма ( $K$ -форма) числення [151–154]. У випадку Іто стохастичні процеси  $h_g(t)$  та  $dW(t)$ <sup>19</sup> задовільняють визначенню марковості<sup>20</sup>

<sup>17</sup>Вважається, що кожній реалізації  $\xi(t)$  випадкового процесу відповідає формування  $h_g(t)$  нового випадкового процесу (тобто густина МЗ набуває випадкове значення у будь-який момент часу  $t$ ).

<sup>18</sup>Так як для одержання точного розв’язку макроскопічної системи, що характеризує броунівський рух, необхідно розв’язати всі мікроскопічні рівняння для кожної окремої частинки, що вочевидь неможливо.

<sup>19</sup>Представлення вінерівського процесу для стохастичного диференціального рівняння (4.20) [151, 152], що є математичною моделлю броунівського руху для випадкового коливання з неперервним часом.

<sup>20</sup>Процеси називаються марківськими, якщо перехід до стану в момент часу  $t_n$  зі стану в момент  $t_{n-1}$  не

та представляються статистично незалежними [151, 153], оскільки визначення інтеграла Іто відображає відсутність кореляцій між випадковим процесом  $h_g(t)$  та випадковою силою  $W(t)$  в момент часу  $t$ . У загальному випадку форма Іто використовується для розв'язання систем з дискретним часом, що зустрічається переважно у біологічних системах (наприклад, для моделі народження-смертності живих організмів) [150, 151]. Інтегрування рівняння (4.6), використовуючи форму Стратановича, дозволяє автоматично врахувати кореляції між випадковим процесом  $h_g(t)$  і випадковою величиною  $W(t)$  на малих інтервалах часу за рахунок обчислення проміжних, центральних точок на сітці інтегрування

$$\sqrt{N \left( h_g \left( \frac{t_i + t_{i-1}}{2} \right) \right)} dW(t_i), \quad (4.9)$$

що відповідає поведінці фізичних систем із неперервним часом та визначає більш реальну інтерпретацію стохастичного процесу  $h_g(t)$  (реалізується стохастичний процес із пам'яттю, що часто зустрічається у поведінці реальних систем [3, 10, 155–157]).

Так, у представленому дослідженні з метою опису процесу фрагментації полікристалічної структури металу під дією ІПД використовується підхід Стратановича, оскільки розглядається фізичний процес з неперервним часом та присутня кореляція основного параметра системи із випадковими процесами (діє мультиплікативний шум). Проте відмітимо, що числовий розв'язок у рамках числення Іто не продемонстрував якісних та кількісних змін у поведінці системи.

Відповідне рівняння Фоккера – Планка визначається співвідношенням:

$$\frac{\partial}{\partial t} p(h_g, t) = -\frac{\partial}{\partial h_g} D^{(1)}(h_g) p(h_g, t) + \frac{\partial^2}{\partial h_g^2} D^{(2)}(h_g) p(h_g, t), \quad (4.10)$$

де функції (або коефіцієнти Крамерса-Мойала) [152]

$$D^{(1)}(h_g) = \frac{F(h_g)}{\tau_{h_g}} + \sqrt{\frac{N(h_g)}{\tau_{h_g}^2}} \frac{d\sqrt{N(h_g)/\tau_{h_g}^2}}{dh_g}, \quad (4.11)$$

---

залежить від передісторії. Тобто майбутнє процесу не залежить від минулого при відомому теперішньому. Еволюція немарківських процесів після будь-якого заданого моменту часу залежить від попередньої цьому моменту часу еволюції (реалізується випадковий процес з пам'яттю).



$$D^{(2)}(h_g) = \frac{N(h_g)}{\tau_{h_g}^2}, \quad (4.12)$$

відіграють в інтерпретації Стратоновича роль коефіцієнтів дрейфу та дифузії. Рівняння (4.10), як було згадано раніше, дозволяє знайти густину ймовірності  $p(h_g(t))$  розподілу випадкових значень  $h_g$  у будь-який момент часу  $t$ . Із математичної точки зору воно представляє лінійне диференціальне рівняння у частинних похідних параболічного типу. Зокрема, у випадку розгляду детерміністичного підходу нехтують флуктуаціями макроскопічних ( $N_g$ ) та мезоскопічних ( $N_D$ ) змінних<sup>21</sup>, тобто в рівнянні (4.10) та визначеннях (4.11), (4.12) нівелюють дифузійним членом  $N(h_g)$  [152]. Відповідно рівняння Фоккера – Планка (4.10) втрачає сенс.

Оскільки густина розподілу розв'язків рівняння (4.6) із часом набуває стаціонарного значення, то її явний вигляд може бути знайдено із рівняння (4.10) при виконанні умови  $\partial p(h_g, t)/\partial t = 0$ :

$$-\frac{\partial}{\partial h_g} D^{(1)}(h_g)p(h_g, t) + \frac{\partial^2}{\partial h_g^2} D^{(2)}(h_g)p(h_g, t) = 0,$$

Провівши ряд математичних перетворень, отримуємо відповідне визначення стаціонарної густини розподілу ймовірності реалізації станів  $h_g$ :

$$p(h_g) = Z^{-1} \exp(U_{ef}(h_g)), \quad (4.13)$$

що визначається за допомогою нормуючої константи<sup>22</sup>

$$Z = \int_0^{+\infty} \exp(U_{ef}(\hat{h}_g)) d\hat{h}_g \quad (4.14)$$

та ефективного синергетичного потенціалу

$$U_{ef}(h_g) = -\frac{1}{2} \ln(N(h_g)) + \tau_{h_g} \int_0^{h_g} \frac{F(\hat{h}_g)}{N(\hat{h}_g)} d\hat{h}_g, \quad (4.15)$$

який відображає ефективну енергію системи та не має фізичного змісту внутрішньої енергії.

<sup>21</sup>Макрорівень – категорія, яка вживається у фізиці для опису систем, які складаються з великого числа частинок і мають розміри, що набагато перевищують розміри атомів. Мезорівень – проміжний рівень. Це звичайно розміри порядку кількох нанометрів і системи з тисячами атомів. Мікрорівень описує процеси на рівні молекул і атомів.

<sup>22</sup>Межі інтегрування обмежуються фізичною інтерпретацією параметра  $h_g$ .

Вочевидь, що закон розподілу (або інтегральний закон розподілу) неперервної випадкової величини  $h_g$ , тобто функція розподілу ймовірності  $F_p(h_g)$ , визначається відповідно до визначення:

$$F_p(h_g) = \int_{-\infty}^{h_g} p(h_g) dh_g. \quad (4.16)$$

Разом із тим густина розподілу (4.13) задовільняє властивостям:

- 1)  $p(h_g) = F'_p(h_g)$ ;
- 2)  $p(h_g) \geq 0$ ;
- 3)  $\int_{-\infty}^{+\infty} p(h_g) dh_g = 1$  (умова нормування);
- 4)  $P(a \leq h_g \leq b) = \int_a^b p(h_g) dh_g = F_p(b) - F_p(a)$ .

Знайдемо стаціонарні значення для густини МЗ  $h_g$ , що визначаються за допомогою необхідної умови існування екстремумів ( $dp(h_g)/dh_g = 0$ ) густини розподілу (4.13) (чи ефективного потенціалу (4.15), що рівноцінно). Водночас максимуми ефективного синергетичного потенціалу відповідають максимумам густини розподілу, що визначають формування стійких станів (граничних структур), а відповідно мінімуми – нестійких реалізацій. Отже, умова стаціонарності призводить до виразу:

$$dU_{ef}(h_g)/dh_g \equiv F(h_g) - \frac{1}{2\tau_{h_g}} \frac{dN(h_g)}{dh_g} = 0,$$

перетворення та спрощення якого дозволяє одержати рівняння, що визначає положення стаціонарних станів (екстремумів функції  $p(h_g)$  (4.13))

$$\begin{aligned} & \left( 2 \frac{\psi_{gD}^2}{\varphi_{1D}} - \varphi_{3g} \right) h_g^3 + \left( \varphi_{2g} - 3 \frac{\psi_{gD} \varphi_{gD}}{\varphi_{1D}} \right) h_g^2 + \left( \frac{\varphi_{gD}^2}{\varphi_{1D}} - 2 \frac{\psi_{gD} \varphi_{0D}}{\varphi_{1D}} - \right. \\ & \left. - 4 \frac{\psi_{gD}^2}{\tau_{h_g} \varphi_{1D}^2} N_D - \varphi_{1g} \right) h_g + \varphi_{0g} + \frac{\varphi_{0D} \varphi_{gD}}{\varphi_{1D}} + 2 \frac{\psi_{gD} \varphi_{gD}}{\tau_{h_g} \varphi_{1D}^2} N_D = 0, \end{aligned} \quad (4.17)$$

Очевидно, що положення екстремумів ефективного синергетичного потенціалу (4.15) (чи густини розподілу  $p(h_g)$  (4.13)), які власне визначають режими фрагментації металу при ІПД, не залежать від інтенсивності шуму  $N_g$ . Також

відмітимо, що вираз (4.17), одержаний за допомогою підходу Стратоновича, де що відрізняється від аналогічного в рамках числення Іто. Доданки в останньому, які враховують взаємодію з флуктуаціями  $N_D$  (див. у дужках для лінійного внеску за  $h_g$  та останній вільний член), додатково множаться на 2, на відміну від представленого випадку у (4.17). Так, збільшення інтенсивності флуктуацій густини дислокацій в два рази  $2N_D$  дозволяє отримати в рамках інтерпретації Стратоновича еквівалентні результати відносно підходу Іто<sup>23</sup>. Проте варто відмітити, що синергетичний потенціал (4.15) (відповідно і густина розподілу  $p(h_g)$  (4.13)) набуває іншого вигляду за рахунок перенормування ефективної інтенсивності шуму  $N(h_g)$ , оскільки він відрізняється від підходу Іто лише у першому члені (наявність константи  $1/2$ ). Константа призводить до перерозподілу густини розподілу ймовірності  $p(h_g(t))$  стохастичної змінної  $h_g$ , що очевидно сприяє видозміні характеру поведінки часових залежностей густини МЗ (тобто змінюється інтенсивність флуктуацій параметра  $h_g$  довкола стаціонарних станів системи), проте сформована стаціонарна морфологія матеріалу (гранична структура зі сталим значенням  $h_g$ ) залишається незмінною, незалежно від вибору форми числення. Оскільки метою даної роботи є вивчення не тільки формування стаціонарних СМК чи НК структур, а й дослідження особливостей еволюції  $h_g$  під час ПД, тому використовується підхід Стратоновича.

На рис. 4.1 представлено розв'язок рівняння (4.17) у залежності від значень зсувної деформації  $I_2$  (другого інваріанта тензора пружних деформацій) та при визначеній інтенсивності шуму  $N_D$ . Варто зазначити, що у представленому дослідженні розглядається процес стиснення зразка, оскільки перший інваріант тензора пружних деформацій набуває від'ємних відносних значень  $\varepsilon_{ii}^e < 0$  (всі розрахунки проведені для значення  $\varepsilon_{ii}^e = -0,1\%$ ). Згідно з рисунком, при невеликих інтенсивностях флуктуацій шуму  $N_D$  існує три стаціонарні стани системи, два з яких відповідають формуванню максимумів ефективного синергетичного потенціалу (4.15) (штрихові та суцільні сегменти кривих 1 – 3) і відповідно стій-

<sup>23</sup>Вивчалися стаціонарні розв'язки ефективного синергетичного потенціалу (4.15) та формування фазових діаграм залежно від вибору форми числення.

ких 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, залежно від величин другого інваріанта  $I_2$ , може мати як нульові так і ненульові значення густини МЗ  $h_g$ , що відповідає формуванню монокристала чи КЗПК. Крім того, як відмічалося у роботах [46–50, 52–54], ненульові значення для густини МЗ починають формуватися тільки при досягненні пружними напруженнями границі текучості (плинності)  $\sigma_T$ , що обумовлює виникнення пластичної (залишкової) деформації та активізує процес фрагментації кристалітів у структурі металу чи сплаву. Другий максимум  $U_{ef}(h_g)$  (суцільні частини кривих 1 – 3) завжди має ненульові значення  $h_g$ , разом із тим розмір зерен у отриманих структурах має субмікро- чи нанорозміри, а на границі зразок розглядається як аморфна структура. Видно, що нестійкі стаціонарні конфігурації сформовані при значеннях густини МЗ  $h_g$ , що відповідають мінімумам ефективного синергетичного потенціалу (4.15), розділяють вище зазначені стійкі структури (пунктирні сегменти кривих 1 – 3).

У випадку оброблення монокристала чи КЗПК на початковому етапі буде реалізуватися нульовий максимум ефективного 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. У такий спосіб, спочатку система накопичує пружну внутрішню енергію, і тільки з досягненням стадії насичення почнуть діяти потужні канали дисипації, пов'язані з перерозподілом морфології зразка та емісією нових структурних дефектів [95]. Якщо зразок до ІПД вже має дрібнозернисту структуру, то, відповідно до поведінки кривих на рис. 4.1, навіть незначне підвищення зсувних деформацій  $I_2^{24}$  призводить до формування рівноважного стаціонарного стану з більш фрагментованою полікристалічною

<sup>24</sup>Знак  $I_2$  демонструє напрямок виникнення напружень у матеріалі. Вважається, що від'ємні значення  $I_2 < 0$  мають гідростатичну природу, що пов'язано з перевагою впливу нормальних деформацій у визначені компонентного складу другого інваріанта тензора пружних деформацій [122] (див. додаток А).

структурою (тобто реалізується близьке до ненульового екстремуму  $U_{ef}(h_g)$  стаціонарне значення густини МЗ  $h_g$ ). Варто відмітити, що зі зменшенням зсувної деформації, яка також охоплює і від'ємні значення  $I_2 < 0$  (результат дії гідростатичного тиску (протидії)), спостерігається анігіляція МЗ (зменшення густини дефекту), що на практиці призводить до зворотніх процесів – знезміцнення, за рахунок збільшення розмірів кристалітів [10, 12, 41, 72, 95].

Зі збільшенням рівня деформації  $I_2$  до значень, коли співіснують нульовий і ненульовий максимуми ефективного 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). У подальшому нульовий максимум набуває ненульових значень (штрихова частина кривої) і відбувається неперервний процес фрагментації до тих пір, доки не будуть досягнуті умови формування нестійкої конфігурації, 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 із більш фрагментованою структурою. Як відмічалось раніше, тільки при збільшенні зсувних деформацій  $I_2$  у деякий момент часу відбувається злиття першого максимуму з мінімумом внутрішньої енергії, що призводить до втрати стійкості і система швидко переходить у стійкий стан із високою густиною дефектів. Тобто система, згідно з принципом ФП1<sup>25</sup>, здійснює різкий перехід до другого максимуму ефективного синергетичного потенціалу  $U_{ef}(h_g)$  (суцільна частина кривої 1). Водночас відбувається різка фрагментація зерен до СМК чи НК розмірів.

Варто зазначити, що при збільшенні інтенсивності внутрішнього шуму  $N_D$  реалізація ефективного синергетичного потенціалу з одночасним співіснуванням нульових і ненульових максимумів стає неможливою (криві 2, 3). Розглядаючи процес фрагментації в цілому очевидно, що криві 1 – 3 характеризуються схо-

<sup>25</sup>Разом із тим параметр порядку  $h_g$  визначає стан системи на макроскопічному рівні, а другий залежний параметр  $h_D$  в рамках адіабатичного наближення відображає мезорівень (див. рівняння (4.6)).

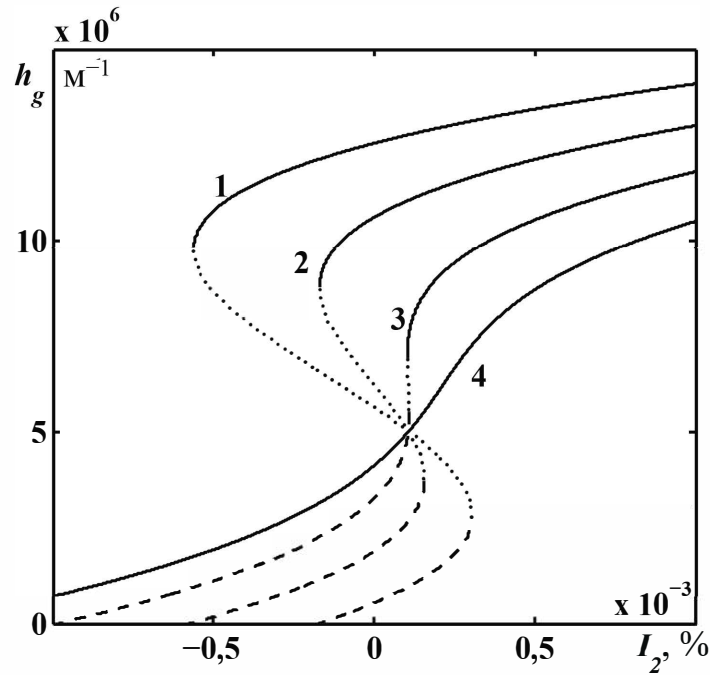


Рис. 4.1. Залежність стаціонарних розв'язків  $h_g$  рівняння екстремумів (4.17) від значень зсувної деформації  $I_2$  %. Криві 1 – 4 побудовано при відповідних інтенсивностях флуктуацій  $N_D = (0; 10^{-15}; 2 \cdot 10^{-15}; 3 \cdot 10^{-15}) \text{ Дж}^2 \cdot \text{с} \cdot \text{м}^{-2}$

жою поведінкою. Однак, у випадку, представленою кривими 2 та 3, перехід між стійкими станами системи (штриховими та суцільними сегментами кривих) можливий навіть за наявності енергетичного “бар'єра” та при відносно невеликому значенні  $I_2$  за умови, що впливу флуктуацій густини дислокацій  $N_D$  буде достатньо для здійснення даного переходу. Разом із тим система зазнає ФПІ та відбувається стрибкоподібний процес фрагментації, що супроводжується різким збільшенням густини дефектів та покращенням фізико-механічних властивостей металу [3]. Як зазначалося раніше, при ФПІ система може функціонувати у двох метастабільних станах (фазах) [11, 47–50, 53, 54, 70, 71, 110, 121], що у даному випадку означає співіснування двох граничних структур з різними розмірами зерен (реалізація 2-х максимумів  $U_{ef}(h_g)$ ).

Разом із 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. 4.1), що призводить до реалізації неперервного переходу від КЗПК до СМК чи НК структури. Цей

перехід відповідає ФП2 та демонструє можливість формування тільки однієї граничної структури.

Визначимо умови формування СМК чи НК структур залежно від зміни пружних деформацій та інтенсивності флуктуацій шуму. Дослідимо втрату стійкості стаціонарних станів системи (тобто розв'язків рівняння (4.17)), які відповідають максимальним значенням ефективного синергетичного потенціалу  $U_{ef}(h_g)$  (4.15) (чи густини розподілу  $p(h_g)$  (4.13)), та визначимо біфуркаційне (критичне) співвідношення для  $I_2$ <sup>26</sup>:

$$I_2(\varepsilon_{ii}^e, h_g^c, N_D) = -\frac{1}{\left(2\bar{\mu}_D\left(\frac{\varphi_{gD}}{\varphi_{1D}} - 2\frac{\psi_{gD}}{\varphi_{1D}}h_g^c\right) + 2\bar{\mu}_g\right)} \left[ \left(2\frac{\psi_{gD}^2}{\varphi_{1D}} - \varphi_{3g}\right)h_g^{c3} + \left(\varphi_{2g} - 3\frac{\psi_{gD}\varphi_{gD}}{\varphi_{1D}}\right)h_g^{c2} + \right. \\ \left. + \left(\frac{\varphi_{gD}^2}{\varphi_{1D}} - \varphi_{1g} - 2\frac{\psi_{gD}}{\varphi_{1D}}\left(\varphi_{0D}^* + g_D\varepsilon_{ii}^e + \frac{1}{2}\bar{M}_D(\varepsilon_{ii}^e)^2\right) - 4\frac{\psi_{gD}^2}{\tau_{hg}\varphi_{1D}^2}N_D\right)h_g^c + \right. \\ \left. + 2\frac{\psi_{gD}\varphi_{gD}}{\tau_{hg}\varphi_{1D}^2}N_D + \varphi_{0g}^* + g_g\varepsilon_{ii}^e + \frac{1}{2}\bar{M}_g(\varepsilon_{ii}^e)^2 + \frac{\varphi_{gD}}{\varphi_{1D}}\left(\varphi_{0D}^* + g_D\varepsilon_{ii}^e + \frac{1}{2}\bar{M}_D(\varepsilon_{ii}^e)^2\right) \right]. \quad (4.18)$$

Одержаний вираз демонструє умови розгалуження чи злиття положень рівноваги (розв'язків рівняння (4.17)): визначає умови зміни кількості граничних структур.

Типові ФД режимів фрагментації металів чи сплавів представлено на рис. 4.2. Ці діаграми одержано згідно з аналітично знайдених виразів густини розподілу  $p(h_g(t))$  та ефективного синергетичного потенціалу  $U_{ef}(h_g)$ . Рисунок 4.2а відповідає детерміністичному наближенню за відсутності шумового впливу  $N_D = 0$  та виражає залежність  $I_2(\varepsilon_{ii}^e, h_g^c)$  (4.18) від  $\varepsilon_{ii}^e$ . Випадок, який представлено на рис. 4.2б, побудовано при фіксованому значенні першого інваріанта  $\varepsilon_{ii}^e$ , що відповідає реалізації процесу стиснення ( $\varepsilon_{ii}^e < 0$ ), та демонструє залежність  $I_2(\varepsilon_{ii}^e, h_g^c, N_D)$  (4.18) від флуктуацій інтенсивності шуму  $N_D$ . Збіжні лінії за відповідних умов (при сталому значенні  $N_D = 0$  чи  $\varepsilon_{ii}^e = -0,1\%$ ) визначають межі втрати стійкості системи. Криві одержано з виразу (4.18) при критичних значеннях густини МЗ  $h_g^c$ , що відповідають точкам переходу від мінімуму  $U_{ef}(h_g)$  до максимумів (див. межі пунктирних сегментів кривих 1 – 3 на рис. 4.1). Майже горизонтальна (в координатах  $I_2 - \varepsilon_{ii}^e$  на рис. 4.2а) та похила

<sup>26</sup>В теорії фазових перетворень перехід через точку біфуркації означає якісну зміну динаміки системи у фазовому просторі [158–160].

під кутом  $dI_2/dN_D = -\psi_{gD}\varphi_{gD}/\tau_{h_g}\varphi_{1D}(\bar{\mu}_D\varphi_{gD} + \bar{\mu}_g\varphi_{1D})$  (в координатах  $I_2 - N_D$  на рис. 4.2б) лінії визначаються співвідношенням

$$I_2(\varepsilon_{ii}^e, N_D) = -\frac{1}{2(\bar{\mu}_D\frac{\varphi_{gD}}{\varphi_{1D}} + \bar{\mu}_g)} \left[ (\varepsilon_{ii}^e)^2 \left( \frac{1}{2}\bar{M}_D\frac{\varphi_{gD}}{\varphi_{1D}} + \frac{1}{2}\bar{M}_g \right) + \varepsilon_{ii}^e \left( g_D\frac{\varphi_{gD}}{\varphi_{1D}} + g_g \right) + 2\frac{\psi_{gD}\varphi_{gD}}{\tau_{h_g}\varphi_{1D}^2} N_D + \varphi_{0D}^*\frac{\varphi_{gD}}{\varphi_{1D}} + \varphi_{0g}^* \right], \quad (4.19)$$

що також впливає із рівняння (4.17) і обмежує існування нульового стаціонарного розв'язку. Нижче цієї лінії завжди існує нульовий стаціонарний розв'язок рівняння (4.17), що відповідає реалізації максимуму  $U_{ef}(h_g)$  при значенні  $h_g = 0$ . Відповідно вище критичного рівня формуються тільки ненульові стійкі стани. Отже, очевидно, що значення пружних деформацій, визначених за допомогою виразу (4.19), відіграють роль границі текучості (плинності), оскільки процеси подрібнення полікристалічної структури почнуть реалізуватися тільки при досягненні пружними деформаціями цього значення.

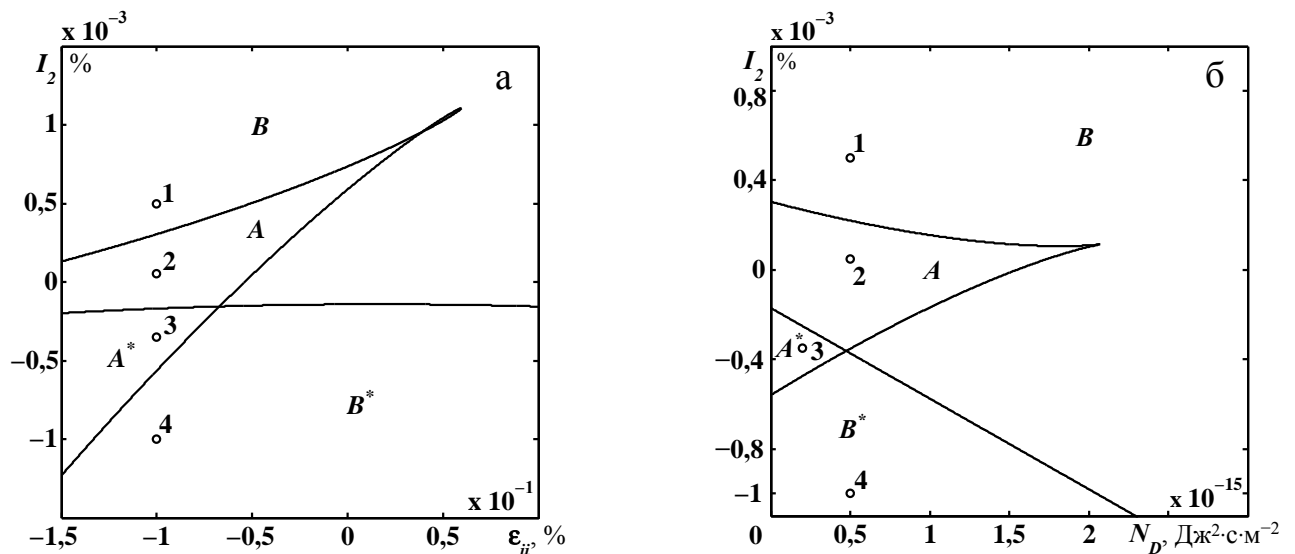


Рис. 4.2. Фазові діаграми режимів фрагментації полікристалічних металів чи сплавів при ІПД: а – реалізація детерміністичного випадку при  $N_D = 0 \text{ Дж}^2 \cdot \text{с} \cdot \text{м}^{-2}$ ; б – стохастична залежність (з урахуванням інтенсивності флуктуацій  $N_D$ ) при сталому значенні  $\varepsilon_{ii}^e = -0,1 \%$ . Області (A, A\*) відображають формування одночасно двох та (B, B\*) – однієї граничних структур

Згідно з рис. 4.2 видно, що ФД мають схожі характеристики: формують чотири області режимів фрагментації металевих зразків. Крім того, точки 1 – 4 на рис. 4.2б визначаються у відповідних областях на рис. 4.2а (див. точки 1 – 4,



що лежать вздовж вертикальної прямої  $\varepsilon_{ii}^e = -0,1 \%$ ). Так, у випадку побудови ефективного потенціалу  $V(h_g)$  для детерміністичного підходу, що можливо у разі нехтування дифузійним членом  $N(h_g) = 0$  у рівнянні (4.6) (див. методику побудови у підрозділі 2.2), очевидно, що система буде обумовлена характерними режимами функціонування (тобто однаково можливе формування двох та однієї граничних структур) [46, 47, 49, 52]. У свою чергу, реалізація індукованих шумом фазових переходів між цими структурами та різного роду самоорганізованих процесів не представляються можливими при розгляді детерміністичного випадку. Представимо узагальнену інтерпретацію одержаних областей.

Отже, в області  $A$  система може одночасно співіснувати у двох ненульових стаціонарних станах чи фазах речовини, тобто одночасно спостерігаються дві граничні конфігурації з великими СМК розмірами зерен та більш дрібною НК структурою. Крім того, при достатній інтенсивності мультиплікативного шуму параметр для густини МЗ може здійснювати стрибкоподібні переходи між значеннями, що відповідають стаціонарним станам системи, навіть за наявності енергетичного “бар’єра” (див. пунктирні сегменти кривих 2, 3 на рис. 4.1). Область  $A^*$  відрізняється від області  $A$  за рахунок того, що перший стаціонарний стан набуває нульового значення густини МЗ, що відповідає монокристалічній чи КЗПК структурі. Разом із тим вважається, що пружна внутрішня енергія системи не досягає стадії насичення, яка відповідає за активацію дисипативних процесів, пов’язану з реалізацією пластичної течії у структурі матеріалу. При великих пружних деформаціях з області  $B$  відбувається інтенсивна дисипація пружної внутрішньої енергії та формується одна гранична структура з НК розмірами зерен. При збільшенні  $I_2$  чи з підвищенням інтенсивності флуктуацій стохастичного джерела  $N_D$  розмір зерен у граничній структурі буде зменшуватися, і на границі  $I_2 \rightarrow \infty$ <sup>27</sup> металевий зразок буде мати аморфну структуру [10, 71]. Відповідно єдиний нульовий стаціонарний стан, який також відповідає реалізації монокристала чи КЗПК, формується в межах прикладення малих деформацій із області  $B^*$ . Окрім того, відмітимо, що реальній поведінці матеріалів під час

<sup>27</sup>Маються на увазі дуже великі, проте фізичні деформації.

ППД відповідають випадки, що реалізуються в областях  $A$  та  $B$ .

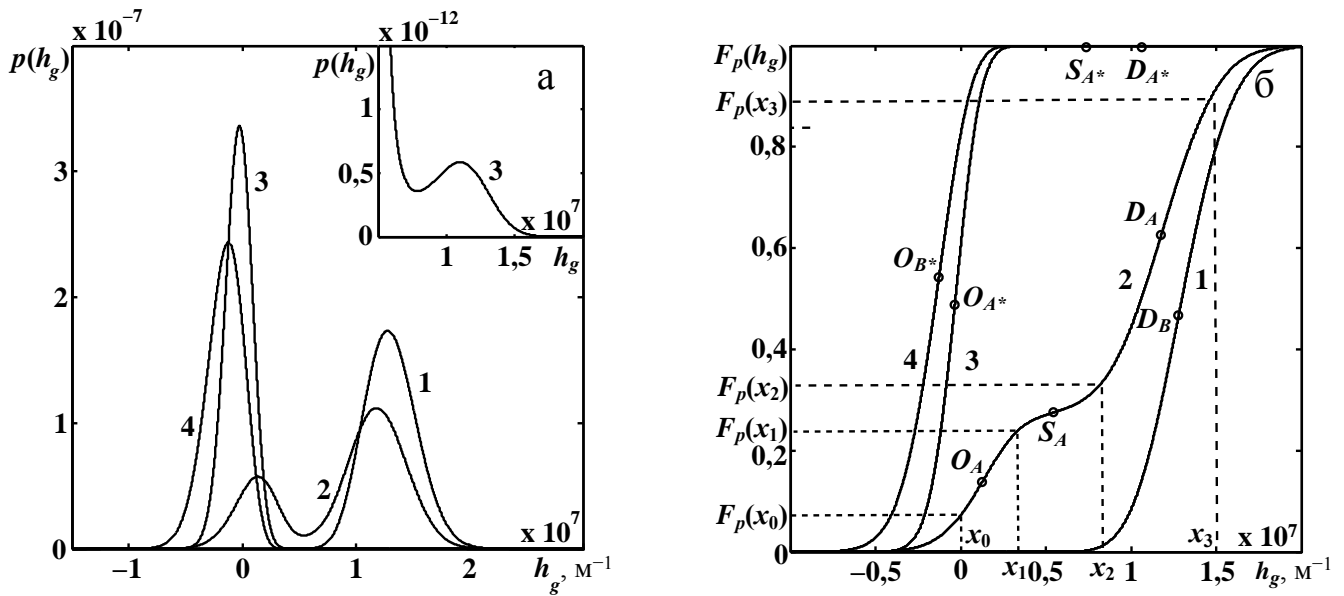


Рис. 4.3. Розподіл густини МЗ у металевій структурі при ППД: а – функція густини розподілу  $p(h_g)$  (4.13); б – інтегральний закон розподілу  $F_p(h_g)$  (4.16). Криві 1 – 4 побудовано для відповідних точок на ФД (рис. 4.2б)

На рисунку 4.3 представлено густини розподілу  $p(h_g)$  (4.13) випадкових реалізацій  $h_g$  у процесі ППД та відповідний закон розподілу  $F_p(h_g)$  (4.16) (інтегральна функція розподілу випадкової змінної  $h_g$ ) при умовах, вказаних точками 1 – 4 на ФД (рис. 4.2б). Очевидно, що густина розподілу  $h_g$  на рис. 4.3а визначається формуванням визначеної кількості мод (максимумів розподілу ймовірностей). Ці максимуми (стійкі стаціонарні стани системи) виникають залежно від характеру прикладеного навантаження під час ППД, що проявляється у компонентному складі тензора пружних деформацій, та визначаються відповідно до областей на ФД. Отже, крива 1 відповідає області великих пружних деформацій  $B$  на ФД (рис. 4.2б), де може реалізуватися тільки один ненульовий максимум  $p(h_g)$  (4.13). У даному випадку, максимум демонструє формування НК стаціонарної структури з густиною МЗ  $h_g \approx 1,3 \cdot 10^7 \text{ м}^{-1}$  при ймовірності  $p(h_g) \approx 1,7 \cdot 10^{-7}$ . Крива 2 характеризує область  $A$  та демонструє можливість утворення двох ненульових мод густини розподілу  $p(h_g)$  (4.13). Разом із тим система, за визначених умов (значень  $I_2$  та  $N_D$ ), може одночасно функціонувати у двох метастабільних фазах з великими СМК (перший максимум при  $p(h_g) \approx 5,7 \cdot 10^{-8}$  та  $h_g \approx 1,4 \cdot 10^6 \text{ м}^{-1}$ )

та більш дрібними НК розмірами зерен (другий максимум при  $p(h_g) \approx 1,1 \cdot 10^{-7}$  та  $h_g \approx 1,2 \cdot 10^7 \text{ м}^{-1}$ ). В області малих деформацій  $B^*$  імовірність формування єдиної стаціонарної структури (крива 4) набуває максимального значення  $p(h_g) \approx 2,4 \cdot 10^{-7}$  при  $h_g = 0 \text{ м}^{-1}$ , що відповідає відсутності пластичної течії у структурі матеріалу при ІПД та, відповідно, реалізації монокристала чи КЗПК. В області  $A^*$ , аналогічно до області  $A$  на рис. 4.2б, густина розподілу формально має дві моди зі значеннями ймовірності  $p(h_g) \approx 3,3 \cdot 10^{-7}$  та  $p(h_g) \approx 5,8 \cdot 10^{-13}$  (крива 3), але перший максимум має нульове значення  $h_g = 0$ , а другий відповідає формуванню НК граничної структури з густиною МЗ  $h_g \approx 1,15 \cdot 10^7 \text{ м}^{-1}$  (див. вставлення). Оскільки криві 3 та 4 демонструють імовірність формування стаціонарної структури у від'ємному діапазоні значень  $h_g$ , який не має фізичного сенсу, вважається, що при досягненні нульового значення густина МЗ в подальшому продовжує функціонувати у режимі  $h_g = 0 \text{ м}^{-1}$ . Очевидно, що у випадку, представленому кривою 3, більшість часу система буде перебувати у режимі першої моди, адже ймовірність її реалізації складає  $p(h_g) \approx 3,3 \cdot 10^{-7}$ , що значно перевищує ймовірність формування другого максимуму. Проте можливість утворення подібної структури на практиці під час процесу ІПД залишається нез'ясованою.

Відповідний закон розподілу  $F_p(h_g)$  (4.16) ймовірностей випадкової величини  $h_g$  представлено на рис. 4.3б. Точки на кривих 1 – 4 відповідають формуванню максимальних ( $O_m$ , де  $m = A, A^*, B^*$ , та  $D_n$ , де  $n = B, A, A^*$ ) та мінімальних ( $S_n$ , де  $n = A, A^*$ ) значень густини розподілу  $p(h_g)$ , представленої кривими 1 – 4 на рис. 4.3а, та відображають стани системи у відповідних областях на ФД. Очевидно, що максимумами досягаються у тих точках, де функція розподілу має найбільшу крутизну (наочно див. межі  $(x_0, x_1)$  та  $(x_2, x_3)$  на кривій 2). Відповідно мінімальні значення  $p(h_g)$  кривих 2, 3 з рис. 4.3а розташовуються в околі центрів пологих ділянок (наочно див. межі  $(x_1, x_2)$  на кривій 2 рис. 4.3б). Формування крутих ділянок на кривих 1 – 4 демонструє активну стадію фрагментації полікристалічної структури металу чи сплаву під час ІПД, де швидкість еволюції густини МЗ набуває найбільших значень. Крім того, залежності  $F_p(h_g)$  дозволя-

ють кількісно визначити склад зернистої структури зразка: оцінити долі густини МЗ та наближені розміри зерен у тому чи іншому проміжку значень  $h_g$ <sup>28</sup>. Так, у випадку, представленою кривою 1, показано, що густина МЗ активно розвивається в інтервалі  $[0, 75 \cdot 10^7; 1, 75 \cdot 10^7]$ , якому відповідають наближені розміри зерен  $d \sim 133 - 57$  нм, водночас імовірність формування граничної структури з густиною МЗ у наведеному діапазоні, згідно з властивостями функції розподілу, складає  $p(0, 75 \cdot 10^7 \leq h_g < 1, 75 \cdot 10^7) = F_p(1, 75 \cdot 10^7) - F_p(0, 75 \cdot 10^7) \approx 0, 95$  (95%). Ймовірності того, що густина МЗ набуває значень в межах інтервалів  $[x_0, x_1]$  та  $[x_2, x_3]$  (див. криву 2) становлять  $p(x_0 \leq h_g < x_1) = F_p(x_1) - F_p(x_0) \approx 0, 22 - 0, 07 = 0, 15$  (15%) та  $p(x_2 \leq h_g < x_3) = F_p(x_3) - F_p(x_2) \approx 0, 9 - 0, 3 = 0, 6$  (60%). Цим інтервалам відповідають наближені розміри зерен: до 285 нм та межі  $d \sim 125 - 66$  нм. Очевидно, що ймовірність формування нестійкої конфігурації на проміжку  $[x_1, x_2]$  складає  $p(x_1 \leq h_g < x_2) = F_p(x_2) - F_p(x_1) \approx 0, 3 - 0, 22 = 0, 08$  (8%). Оскільки система може одночасно функціонувати у двох станах чи фазах, що визначаються крутими ділянками на кривій 2, вважається, що металевий зразок при ПД буде визначатися граничною (стаціонарною) структурою з сумішшю зерен різного розміру. Тобто об'ємна доля СМК зерен (до 285 нм) у структурі матеріалу становить 15%, а нанорозмірних кристалітів (в межах  $d \sim 125 - 66$  нм) – 60%, відповідно. Випадки, представлені кривими 3 та 4 на рис. 4.36, наведено для повноти аналізу, оскільки останні демонструють формування монокристалічної чи КЗПК структури, що зазвичай не реалізуються у реальних металах при ПД.

У зв'язку з тим, що реальний процес фрагментації полікристалічної структури металу чи сплаву при ПД має стохастичний характер, оскільки проходить в сильно нерівноважних умовах та враховує флуктуації параметрів стану системи (дію внутрішнього шуму) за рахунок впливу безлічі чинників, гранична структура може сформуватися при різному співвідношенні об'ємної долі кристалітів. Як результат, у матеріалі проявляються різні механізми пластичної деформації.

<sup>28</sup> Одержані значення демонструють скільки відсотків густини МЗ буде формуватися в тому чи іншому діапазоні. Далі за визначенням  $d \sim 1/h_g$  оцінюються наближені значення розмірів зерен для кожного інтервалу.

У роботі [113], виявлено значну роль спектрального розподілу зерен у ході ІПД ультрадрібнозернистої міді, що дозволило детально визначити внутрішньозеренні (субзеренні) та зерномежові процеси.

Порівнюючи одержані результати на рис. 4.2, очевидно, що представлена на рис. 4.2б ФД відображає реальні умови перебігу процесу фрагментації полікристалічної структури при ІПД, оскільки враховує не тільки вплив зовнішнього поля у виді інваріантів  $\varepsilon_{ii}^e$  та  $I_2$  тензора пружної деформації, а і безпосередньо внутрішні мезоскопічні флуктуації  $N_D$ , які можуть критичним чином вплинути на характер еволюції системи.

Відомо, що підвищення інтенсивності стохастичного джерела призводить до активації індукованих шумом фазових переходів [128, 129, 137, 147, 149, 151]. 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 обтинаючих коливань, спрямованих на подолання перешкод у площині ковзання [143]<sup>29</sup>; дія ультразвуку, який активізує вимушені коливання дислокацій, що сприяють подоланню дислокаційних “бар’єрів” перешкоджаючих їх руху під час пластичної деформації (у матеріалі відбуваються так звані акустичні ефекти<sup>30</sup>) [161]; постійне магнітне поле, що також призводить до прояву магнітопластичного ефекту<sup>31</sup> на рухливість структурних дефектів під час оброблення [162, 163].

У такий спосіб, одержані фазові діаграми дозволяють у загальному виді зобразити можливі сценарії та режими поведінки системи еволюційних рівнянь, що може зіграти важливу роль з точки зору технічних застосувань запропонованої

<sup>29</sup>Процес відбувається без впливу термічних флуктуацій, що є необхідною умовою подолання потенціальних “бар’єрів” при повільній пластичній течії [143].

<sup>30</sup>Відомо, що рух та розмноження дислокацій під дією ультразвукового поля буде значно збільшувати густину дислокацій та концентрацію точкових дефектів, що активно взаємодіють між собою у процесі оброблення [161].

<sup>31</sup>Призводить до перерозподілу напружень у матеріалі, в результаті чого відбувається збільшення інтенсивності руху дислокацій [162, 163].

моделі.

### 4.3. Часові залежності густин МЗ

Дослідимо кінетику густини МЗ  $h_g$  з урахуванням флуктуацій основних параметрів  $N_{D,g}$ . Запишемо рівняння Ланжевена з мультиплікативним шумом у стохастичній диференціальній формі. Для цього помножимо рівняння (4.6) на  $dt$ , у результаті одержимо

$$\tau_{h_g} dh_g = F(h_g)dt + \sqrt{N(h_g)} dW(t), \quad (4.20)$$

де  $dW(t) = W(t+dt) - W(t) \equiv \xi(t)dt$  – вінерівський процес, який має властивості білого шуму [150–152, 164]

$$\langle dW(t) \rangle = 0, \quad \langle (dW(t))^2 \rangle = 2dt. \quad (4.21)$$

Разом із тим, шум визначається як похідна від вінерівського процесу  $\xi(t) = dW(t)/dt$ .

Нагадаємо, що розподіл випадкових блукань  $\xi(t)$  за їх значеннями  $\xi$  є нормальним (гаусівським) розподілом [151, 152]:

$$P(\xi) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp \left\{ -\frac{(\xi - \mu)^2}{2\sigma^2} \right\}, \quad (4.22)$$

де перший та другий моменти стохастичного джерела визначаються

$$\mu \equiv \langle \xi(t) \rangle = 0, \quad \sigma^2 \equiv \langle \xi^2(t) \rangle = 2\delta(0) = 1,$$

Варто нагадати, що в рамках досліджуваного випадку гаусівський білий шум розглядається як границя реального фізичного шуму з кінцевою інтенсивністю джерела.

Перепишемо рівняння (4.20) у більш загальному виді

$$dh_g = D^{(1)}(h_g)dt + \sqrt{D^{(2)}(h_g)} dW(t). \quad (4.23)$$

Так, дифузійний процес визначається коефіцієнтами дрейфу  $D^{(1)}(h_g)$  та дифузії  $D^{(2)}(h_g)$ , що в рамках підходу Іто (I-форма) та Стратоновича (S-форма) задо-

вільняють визначенням [152]

$$(I) : D^{(1)}(h_g) = \frac{F(h_g)}{\tau_{h_g}}, \quad (4.24)$$

$$(S) : D^{(1)}(h_g) = \frac{F(h_g)}{\tau_{h_g}} + \sqrt{\frac{N(h_g)}{\tau_{h_g}^2}} \frac{d\sqrt{N(h_g)/\tau_{h_g}^2}}{dh_g}, \quad (4.25)$$

$$(I, S) : D^{(2)}(h_g) = \frac{N(h_g)}{\tau_{h_g}^2}. \quad (4.26)$$

Відмітимо, що зазначені коефіцієнти передбачають реалізацію єдиної процедури стохастичного інтегрування в рамках числення Іто [150, 152, 165]. Вирази (4.24) та (4.26) відповідають СДР в формі Іто, а визначення (4.25) та (4.26) – еквівалентному початковому СДР у формі Стратоновича. Проте у всіх випадках представлення стохастичних процесів відбувається в рамках інтерпретації Іто, що задовольняє умові марковості (тобто демонструє незалежність прирощувань  $dW(t) = W(t + dt) - W(t)$ ). Разом із тим стохастичний інтеграл визначається відповідно до інтеграла типу Рімана, якому відповідають звичайні правила математичного аналізу [150, 152]. Зазначимо, що представлені форми числення пов'язані між собою та дозволяють здійснити взаємне перетворення [150, 164, 165]. Якщо початкове СДР (4.20) задано в інтерпретації Стратоновича, то, враховуючи властивості (4.21), можна завжди перейти до еквівалентного СДР в рамках інтерпретації Іто<sup>32</sup> за рахунок додавання виразу  $g(h_g)dg(h_g)/dh_g$ , де  $g(h_g) = \sqrt{N(h_g)/\tau_{h_g}^2}$  (див. визначення коефіцієнта дрейфу (4.25)). У свою чергу, зворотній перехід здійснюється за рахунок віднімання  $g(h_g)dg(h_g)/dh_g$ . Отже, початкова та еквівалентна форма СДУ будуть мати єдиний розв'язок.

Залежно від вибору форми інтерпретації дифузійних коефіцієнтів (4.24)-(4.26) СДР Ланжевена (4.23) буде відрізнятись за видом та мати різний фізичний сенс. Очевидно, що СДР у формі Стратоновича визначає дифузійний процес з переносом, оскільки другий доданок у визначенні коефіцієнта дрейфу (4.25)  $g(h_g)dg(h_g)/dh_g$ , де  $g(h_g) = \sqrt{N(h_g)/\tau_{h_g}^2}$ , породжує індукований шу-

<sup>32</sup>В подальшому, для однозначного сприймання, форма числення СДР, що визначається видом коефіцієнтів (4.24)-(4.26), трактується у відповідності до початкової інтерпретації незалежно від представлення стохастичних процесів.

мом перехід. У літературі цей доданок більш відомий за назвою “хибного” переносу, оскільки він не входить до вихідного феноменологічного рівняння (4.6) (чи СДР (4.20)) [150, 152, 165]. Проте відомо, що він призводить лише до фізичних наслідків, оскільки моделює реальні системи з середовищем, що здійснює швидкі флуктуації (тобто враховує кореляцію між випадковим середовищем та системою).

Варто відмітити, що у випадку дії на кінетику систему адитивного шуму, тобто при  $N(h_g) = \text{const}$  у рівнянні (4.20), не існує принципової різниці між системами числення Іто та Стратоновича. Однак, у випадку дії мультиплікативного шуму, тобто при  $N(h_g) \neq \text{const}$ , коли вплив випадкової сили залежить від стану системи, кореляція закладена у інтегралі Стратоновича призводить до систематичного внеску в еволюцію випадкового процесу  $h_g(t)$ . Отже, СДР у формі Стратоновича з урахуванням визначень (4.25) та (4.26) найбільш доцільно використовувати для опису реальної фізичної ситуації, що пов'язана зі швидкою зміною середовища. Проте варто зазначити, що не існує об'єктивних причин, за яких слід давати однозначну перевагу певній інтерпретації СДР, у будь-якому випадку вирішальним критерієм правильності вибору є відповідність аналітично знайдених результатів до експериментальних даних.

Зокрема, підтвердження коректності теоретичного дослідження поведінки основних змінних фізичної системи (у данному випадку  $h_g$ ) зазвичай відбувається шляхом порівняння результатів числового моделювання декількох форм СДР. Незважаючи на широкий спектр існуючих форм числення, найбільш виправдані вважають саме підхід Стратоновича з урахуванням визначення дифузійного процесу за допомогою коефіцієнтів (4.25) та (4.26), та форму Іто, що визначається коефіцієнтами дрейфу (4.24) та дифузії (4.26). Як підсумок, проведемо порівняння кінетики випадкового процесу  $h_g$  з огляду зазначених форм числення. Числовий розв'язок співвідношення (4.23) знаходимо за допомогою методу Ейлера. Застосовуючи дискретне наближення диференціала випадкової величини  $dW(t) = \sqrt{\Delta t}W_i$ , отримуємо звичайну ітераційну процедуру для інтегруван-



ня (розв'язання) рівняння (4.23)

$$h_{g_{i+1}} = h_{g_i} + D^{(1)}(h_{g_i})\Delta t + \sqrt{D^{(2)}(h_{g_i})\Delta t} W_i. \quad (4.27)$$

Використовуючи визначення коефіцієнтів дифузії (4.24)-(4.26) та виразів (4.7), (4.8), обчислимо часову залежність густини МЗ  $h_g$ . Зокрема, у випадку числення Стратоновича ітераційна процедура з урахуванням математичних перетворень має явний вид

$$h_{g_{i+1}} = h_{g_i} + \left[ \frac{F(h_{g_i})}{\tau_{h_g}} + 2 \frac{(2\psi_{gD}^2 h_{g_i} + \varphi_{gD} \psi_{gD}) N_D}{\tau_{h_g}^2 \varphi_{1D}^2} N_D \right] \Delta t + \sqrt{\frac{N(h_{g_i})}{\tau_{h_g}^2} \Delta t} W_i. \quad (4.28)$$

Розв'язок СДР (4.23) знаходимо на часовому проміжку  $t \in [0, T]$  для визначеної кількості ітерацій  $N$  (кількості точок на часовій залежності). Відповідно приріст часу визначається за виразом  $\Delta t = T/N$ . Сила  $W_i$  має наступні характеристики

$$\langle W_i \rangle = 0, \quad \langle W_i W_{i'} \rangle = 0, \quad \langle W_i^2 \rangle = 2, \quad (4.29)$$

що відповідають моментам білого шуму (4.21).

Моделювання випадкової сили, що відповідає властивостям білого шуму, проводиться за допомогою моделі Бокса-Мюллера [166]

$$W_i = \mu \sqrt{-2 \ln r_1} \cos(2\pi r_2), \quad r_n \in (0, 1], \quad (4.30)$$

де, відповідно до другого моменту в (4.29), дисперсія  $\mu = \sqrt{2}$ , а  $W_i$  – абсолютно випадкове число, яке має властивості (4.29) та (4.22). Псевдо-випадкові числа  $r_1$  та  $r_2$  мають рівномірний розподіл та повторюються через певний період.

На рисунку 4.4 представлено часові траєкторії  $h_g(t)$ , які одержано за допомогою числового розв'язання рівняння (4.23) та визначають режими фрагментації металеві структури у процесі ІПД згідно з областями (А, В) на відповідних ФД. Вставки демонструють числовий розподіл імовірності густин МЗ, які знайдено при аналізі одержаних залежностей. Випадки а, в розраховано в рамках числення Стратоновича та відповідають точкам 1, 2 на рис. 4.2б. Залежності на рисунках б, г отримано згідно з ФД, що побудована в інтерпретації Іто. Як відмічалось раніше, основна відмінність при побудові ФД для зазначених форм

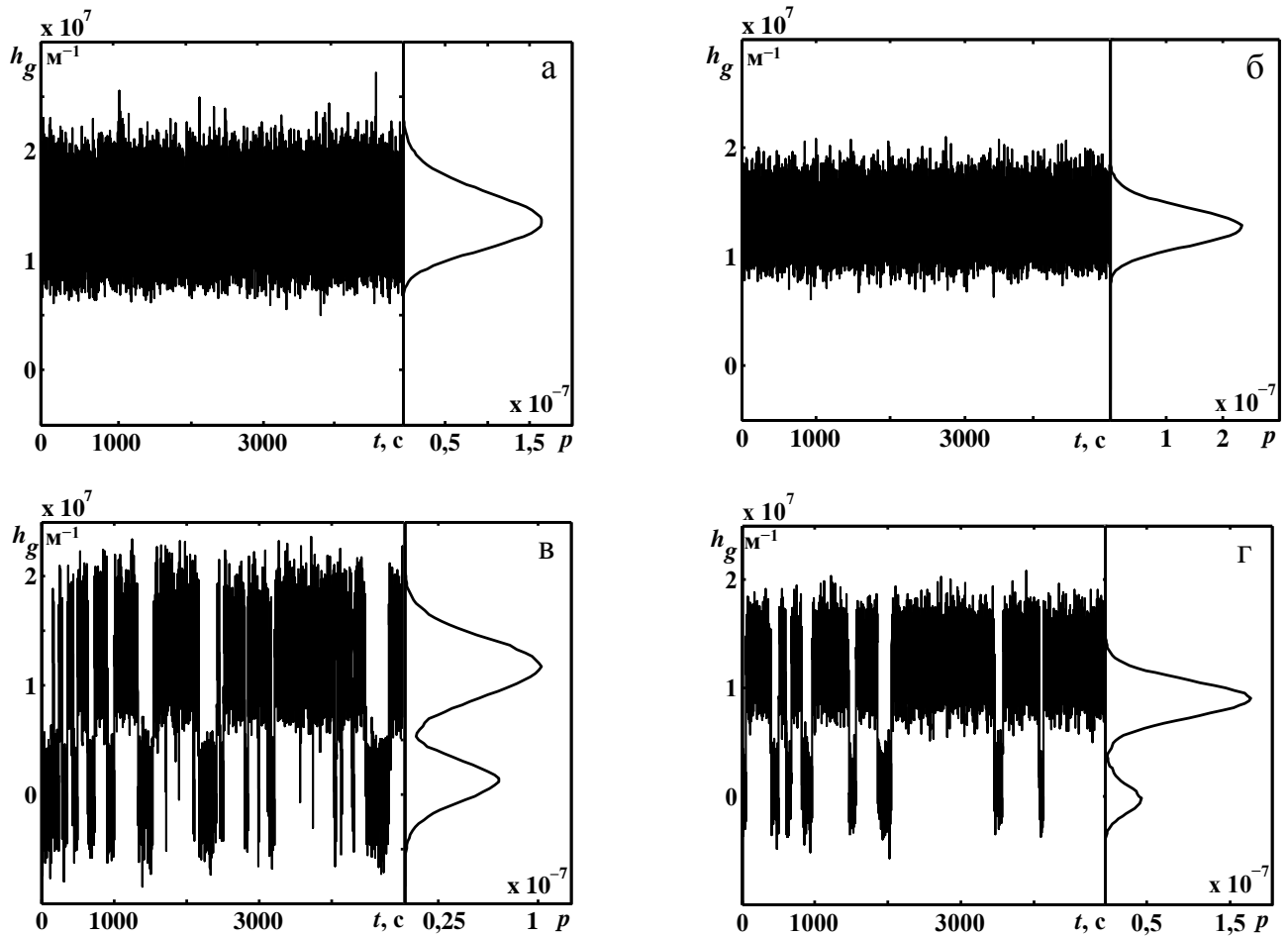


Рис. 4.4. Часові залежності  $h_g(t)$  режимів фрагментації відповідно до областей (A, B) на ФД при параметрах  $N_g = 1 \text{ Дж}^2 \cdot \text{с} \cdot \text{м}^{-4}$ ,  $\varepsilon_{ii} = -0,1 \%$ ,  $N = 10^6$ ,  $T = 5 \cdot 10^3 \text{ с}$ ,  $\Delta t = 0,005 \text{ с}$ : а, в – побудовано в рамках числення Стратоновича та відповідають точкам 1, 2 на рис. 4.2б; б, г – одержано для значень  $N_D = (0,25 \cdot 10^{-15}; 0,25 \cdot 10^{-15}) \text{ Дж}^2 \cdot \text{с} \cdot \text{м}^{-2}$  та  $I_2 = (0,5 \cdot 10^{-3}; 0,05 \cdot 10^{-3}) \%$  в рамках інтерпретації Іто

числення полягає у визначенні рівняння стаціонарних станів (4.17): внески доданків, що враховують взаємодію з флуктуаціями густини дислокацій, різняться в 2 рази. Відповідно ФД в інтерпретації Іто має аналогічний рис. 4.2б вид, проте межі за  $N_D$  набувають в 2 рази менші значення.

За визначенням максимуми густини розподілу  $p(h_g)$  (4.13) відповідають формуванню стійких стаціонарних станів (граничних структур). Отже, під час числового розв'язання рівняння (4.23) за рахунок дії стохастичного джерела система (тобто параметр порядку  $h_g$ ) може здійснювати вимушені відхилення від середніх стаціонарних значень та, при достатній інтенсивності шуму, переходити між цими стійкими станами. У випадку розгляду великих пружних деформацій та

флуктуацій густини дислокацій з інтенсивністю  $N_D$ , які визначаються в області  $B$  (див. рис. 4.2б) видно, що на рис. 4.4а густина МЗ здійснює інтенсивні переходи довкола єдиного стаціонарного стану, що в даному випадку відповідає середньому розміру зерен  $\langle d \rangle \sim 76$  нм. Відповідно у зразку формується НК структура з розмірами зерен у межах встановленого значення. Пружні деформації та інтенсивність  $N_D$  з області  $A$  (див. рис. 4.2б) призводять до реалізації випадкових переходів між двома стаціонарними станами системи, що визначаються середніми розмірами кристалітів:  $\langle d \rangle \sim 714$  нм та  $\langle d \rangle \sim 83$  нм. Оскільки шум має мультиплікативний характер, у матеріалі постійно відбуваються індуковані шумом структурні перетворення (СФП). Відповідно до тенденції еволюційної залежності з часом формується гранична структура, що має одночасно як СМК, так і НК розміри зерен. Аналіз часової залежності (див. вставку) демонструє ймовірність реалізації густини МЗ, що дозволяє оцінити долю зернистої структури при заданих параметрах задачі. Очевидно, що внесок НК зерен у об'ємі металевого зразка майже в 2 рази переважає у порівнянні з об'ємом СМК. Відмітимо, що сформовані у результаті числового аналізу розподіли густин МЗ на рис. 4.4а, в повністю співпадають з одержаними аналітичними залежностями  $p(h_g)$  (4.13) на рис. 4.3а (відповідні криві 1, 2).

У роботі [113] дослідження мікромеханізмів ІПД ультрадрібнозернистої міді встановило, що в процесі деформації відносна зміна долі основних типів зерен (з дислокаційною структурою, зерна без дислокацій та зерна з комірками чи фрагментами) має квазіосцилючий характер. Водночас виявлено, що основний вплив на процес деформації мають крупні зерна. Зокрема, встановлено, що саме внутрішньозеренне ковзання дислокацій, прослизання по МЗ та кореляція цих процесів між собою має основний вплив на зміну морфології досліджуваного зразка. Так, утворення НК стану відбувається за рахунок реалізації дислокаційної системи ковзання у крупних зернах, що забезпечує активацію субструктурних перетворень та формування висококутових МЗ. Доля найдрібніших зерен ( $d < 100$  нм) у структурі міді збільшується майже вдвічі, у той час як внесок більш крупних зерен (з дислокаціями та фрагментами) зменшується, але їх

середній розмір збільшується майже вдвічі. Незмінним залишається тільки середній розмір бездислокаційних зерен, оскільки вплив самоорганізованих систем ковзання у таких конфігураціях відсутній. Наведені у роботі [113] результати демонструють, що спектральний розподіл розмірів зерен у ході оброблення має квазіосцилючий характер, оскільки ІПД при кімнатній температурі протікає в умовах динамічної рекристалізації. Отже, одержані на рис. 4.4 стохастичні залежності еволюції  $h_g$  корелюють із експериментальними даними та дозволяють пояснити тенденцію формування наноструктурного стану на різних стадіях деформування.

Розглядаючи підхід Іто, що визначається СДР (4.23) з коефіцієнтами (4.24) та (4.26), бачимо, що числові залежності на рис. 4.4б, г відрізняються від отриманих результатів в інтерпретації Стратоновича. Очевидно, що переходи параметра порядку між стаціонарними станами (стійкими граничними структурами) відбуваються з меншою дисперсією за густиною МЗ  $h_g$ . Крім того, доля СМК зерен, у випадку одночасного існування двох граничних структур, приймає значно менші значення у морфології зразка. Проте виявлено, що стаціонарні значення та максимуми розподілів  $p(h_g)$  набувають єдині значення незалежно від інтерпретації. Така поведінка пов'язана з тим, що форма числення при визначенні синергетчного потенціалу (4.15) та густини розподілу  $p(h_g)$  (4.13) призводить лише до перенормування ефективної інтенсивності шуму  $N(h_g)$ . У випадку підходу Іто константа  $1/2$  у першому члені (див. вираз (4.15)) змінюється на значення 1. Отже, флуктуацій основних структурних дефектів, які визначаються ефективною інтенсивністю шуму  $N(h_g)$ , неістотно впливають на процес фрагментації металевого зразка, тобто передісторія стохастичного процесу майже не враховується. Як підсумок, оскільки метою даної роботи є дослідження особливостей еволюції  $h_g$  та супроводжуваних процесів формування стаціонарних СМК чи НК структур при обробці ІПД, тому саме підхід Стратоновича дозволяє одержати результати, що відповідають реальному процесу фрагментації.

Крім того, основна перевага визначення СДР (4.23) у формі Стратоновича полягає у тому, що зазначений підхід безпосередньо демонструє характеристики

дифузійного процесу, що дозволяють провести моделювання системи з надзвичайно швидкою зміною флуктуацій параметрів стану та врахувати передісторію розвитку кристалічної структури. Що справедливо, оскільки дрейф системи (див. визначення (4.25)) визначається детерміністичною частиною  $F(h_g)$  (4.7) та індукованим шумом переносом  $g(h_g)dg(h_g)/dh_g$ , де  $g(h_g) = \sqrt{N(h_g)/\tau_{h_g}^2}$ . Останній доданок демонструє, що у флуктуюючому середовищі систематичні зміни відбуваються лише у тому випадку, якщо шум є наближено білим.

Із фізичної точки зору саме флуктуації основних параметрів стану системи зароджують виникнення самоорганізованих процесів, що забезпечують утворення нових індукованих шумом станів (фаз речовини) чи сприяють зміні характеру поведінки системи під час оброблення. Відомо, що структурні перетворення при ІПД характеризуються деякою циклічністю. Зокрема, стрибкоподібні структурні переходи та відповідні зміни властивостей зразка часто спостерігаються на практиці [3, 95]. У роботі [167] виявлено, що в процесі фрагментації металевого зразка після активації динамічної рекристалізації чи аморфізації процес пластичної деформації має рекурсивний характер, тобто у сформованих рекристалізованих зернах чи в межах аморфної фази зароджуються вторинні процеси фрагментації. Отже, під дією виникаючих напружень відбувається накопичення густини дефектів, що в подальшому супроводжується аналогічними перетвореннями у структурі. В цілому важливо пам'ятати, що хід структурних перетворень при ІПД залежить від набору факторів: температури оброблення, інтенсивності та швидкості деформації, концентрації домішок та структурних дефектів різних рівнів, здатності дислокацій до дифузійної перебудови (величина бар'єру Пайерлса), різниці енергій кристалічного та аморфного станів металевого зразка [95, 168].

Проведемо спектральний аналіз часових залежностей густин МЗ  $h_g(t)$ , представлених на рис. 4.4а, в. Зокрема, перевіримо еволюційні залежності на наявність гармонічних складових, які можуть виникати за рахунок впливу стохастичного джерела (дії адитивного некорельованого шуму). Процедура визначення спектру сигналу зводиться до застосування перетворення Фур'є [42, 44, 45],

основна суть якого полягає у наступному. Припустимо, що задано деякий довільний сигнал  $f(t)$ , що має період  $T$ . Необхідно провести дослідження цього сигналу, а саме визначити можливість його представлення у виді накладення великої кількості синусоїд з різними амплітудами, фазами та частотами. Для цього довільну функцію  $f(t)$  розвивають у ряд за синусами і косинусами, які за визначенням об'єднуються у комплексну експоненту (формулу Ейлера). Разом із тим невідомі коефіцієнти розвинення також приводяться до вигляду єдиної комплексної змінної  $S_p$  (спектру сигналу або множини амплітуд), що визначається за формулою

$$S_p = \frac{1}{T} \int_0^T f(t) \exp(-i\omega t) dt, \quad (4.31)$$

де  $T$  – період функції  $f(t)$ ,  $\omega = 2\pi/T$  – основна частота.

Обчислення коефіцієнтів  $S_p$  зазвичай проводять за допомогою методу швидкого перетворення Фур'є, оскільки останній є рекурсивним алгоритмом та дозволяє на кожній ітерації значно заощадити час на розрахунках [42, 45].

Коротко представимо етапи, що лежать в основі реалізації алгоритму швидкого перетворення Фур'є. Спочатку необхідно перевести задачу в дискретну форму. Для цього вводимо до розгляду дискретні моменти часу  $t_n = n \cdot \Delta t$ , де  $\Delta t$  – період дискретизації. Далі обчислюємо чи обираємо дискретні значення функції у ці моменти часу  $x_n = f(n \cdot \Delta t)$ . Разом із тим, повний період функції задається добутком повної кількості точок на період дискретизації  $T = N \cdot \Delta t$ . Відповідно частота дискретизації сигналу набуває значення  $\omega = 2\pi/T = 2\pi/(N \cdot \Delta t)$ . Так, провівши математичні перетворення виразу (4.31), одержимо визначення дискретного перетворення Фур'є для одновимірного масиву  $x_n$  з довжиною  $N$ :

$$S_p = \frac{1}{N} \sum_{n=0}^{N-1} x_n \exp\left(\frac{-2\pi i n k}{N}\right), \quad (4.32)$$

де  $k = 0, \dots, N - 1$  – індекс дискретного перетворення Фур'є в частотній області [42, 44, 45].

Як відомо, комплексна експонента (формула Ейлера) визначає поворотний множник, а отже, для обчислення коефіцієнтів  $S_p$  необхідно розрахувати  $N - 1$  таких значень, які потім складуються за правилом векторів, що, очевидно, буде

займати багато часу. Щоб скоротити розрахунок кількості поворотних множників, розглядаються тільки точки з парними індексами  $2n$  ( $n = 0, \dots, N - 1$ ), для яких у подальшому проводяться відповідні обчислення. У випадку точок із непарними індексами розрахунки не проводяться: використовується векторний добуток поворотних коефіцієнтів, що вже обчислені для парних значень, а отриманий результат домножається на  $-1/N$  обороту. Як підсумок, число розрахунків скорочується майже вдвічі. У подальшому описана процедура продовжується наступним чином: серед точок із парними індексами знову обираються парні та непарні складові та проводяться відповідні математичні операції. Розрахунки тривають до тих пір, доки не запишеться одна точка, для якої ядро перетворення (поворотний множник) обчислювати не потрібно. Очевидно, що вся розрахункова процедура приймає рекурсивну структуру. Описаний алгоритм має визначення швидкого перетворення Фур'є [42, 44, 45].

Перевагою зазначеного методу, як вже відзначалось раніше, є те, що на кожній ітерації заощаджується час на розрахунок поворотних множників. Проте варто зазначити, що метод швидкого перетворення Фур'є має деякі недоліки. Розрахунки спектральної густини вдаються у тому випадку, якщо кількість точок сигналу визначається  $N = 2^m$  (як степінь двійки). Крім того, формально кількість точок  $N$  співпадає з кількістю розрахункових коефіцієнтів  $S_p$ , проте половина із одержаного результату є не що інше, як дзеркальне відображення, що не дає ніякої інформації (тобто половина інформації є втраченою). Власне ця проблема пов'язана з дискретизацією неперервного сигналу. Із цього приводу, існує важлива теорема відліків Найквіста-Шеннона або Котельникова [45], яка стверджує, що періодичний сигнал, який має кінцевий (обмежений по ширині) спектр, може бути однозначно відновлено (інтерпольовано) без спотворень та втрат за його відліком за умови, що частота дискретизації більше або дорівнює подвоєній верхній частоті спектра сигналу.

Отже, проведемо аналіз часових залежностей густин МЗ, представлених на рис. 4.4а, в. Для розрахунку скористаємося функцією `fft()` (Fast Fourier transform) в програмному середовищі MATLAB, яка на основі описаного вище

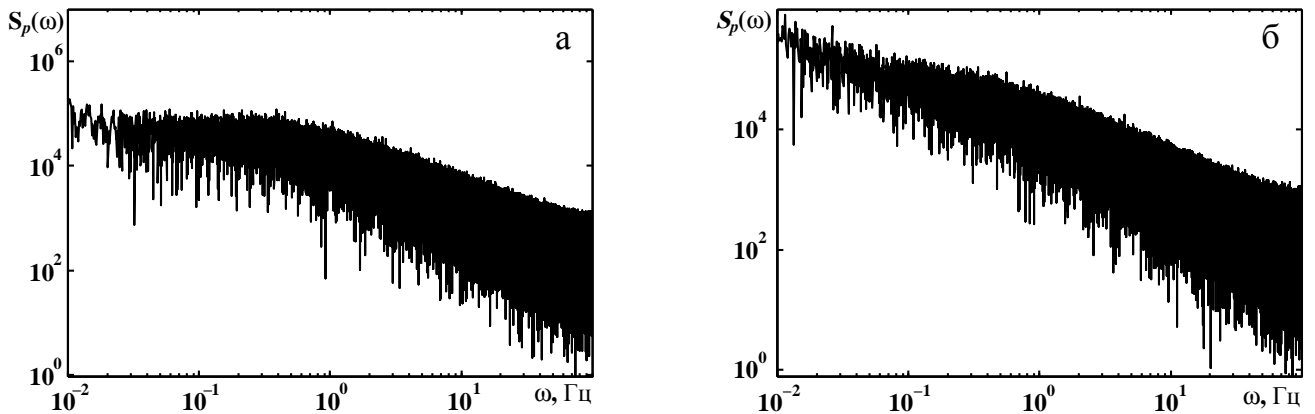


Рис. 4.5. Спектральна густина сигналу  $S_p(\omega)$  для режимів фрагментації  $A$  (рисунок а) та  $B$  (рисунок б), що показано на рис. 4.4а, в при частоті дискретизації  $\omega_n = 1/\Delta t$  Гц та заданій кількості  $2^{20}$  частотних смуг (ліній Фур'є). Амплітуда  $S_p$  вимірюється в умовних одиницях

алгоритму швидкого перетворення Фур'є [42, 45] обчислює за формулою (4.32) спектр еволюції  $h_g(t)$ . Відмітимо, що в якості результату функція (4.32) повертає вектор комплексних чисел. Власне модулі цих значень і представляють амплітуди відповідних частот гармонічних складових сигналу, а аргументи – їх початкові фази. Відкидаючи від'ємні частоти (дзеркальне відображення, що не містить інформації), оскільки весь спектр є еквівалентним додатній частині з подвоєнною амплітудою, та провівши нормалізацію, отримуємо відповідні спектральні залежності потужності сигналу  $S_p(\omega)$  (рис. 4.5) від його частоти  $\omega$ .

Попередній аналіз  $S_p(\omega)$  на рис. 4.5 демонструє, що часові залежності  $h_g(t)$  не мають виражених (значущих) частот їх регулярних (періодичних) складових, адже максимальні амплітуди у спектрі сигналу відсутні. Одержані залежності побудовано при частоті дискретизації  $\omega_n = 1/\Delta t$  Гц та згідно з визначеною кількістю  $2^{20}$  частотних смуг (ліній Фур'є). Нагадаємо, що відповідні часові ряди на рис. 4.4а, в одержано за допомогою ітераційної процедури (4.28) при  $N = 10^6$ ,  $T = 5 \cdot 10^3$  с,  $\Delta t = 0,005$  с та відображають режими фрагментації відповідно до областей ( $A$ ,  $B$ ) на ФД (рис. 4.2б). Зазначимо, що для розрахунку спектральних залежностей на рис. 4.5 використано усереднені за 10-ма реалізаціями дані, тобто за визначених умов отримано 10 часових залежностей, на основі яких знайдено усереднені ряди. Ця процедура є загальноприйнятною та є необхідною умовою



для отримання адекватних результатів.

Із рисунку 4.5 видно, що потужність спектральних сигналів  $S_p(\omega)$  має майже ідентичний характер незалежно від вибору режиму фрагментації при ІПД (значень керуючих параметрів відповідно до рис. 4.2б) та рівномірно зменшується на подвійній логарифмічній шкалі зі збільшенням частоти флуктуацій структурних складових у металевому зразку. Це означає, що на низьких частотах  $\omega$  інтенсивність флуктуацій  $N_D$  має більшу енергію. Тільки у випадку, представленому на рис. 4.5а, видно, що при малих частотах  $S_p(\omega) \approx \text{const}$  (при  $\omega < 0,5$  Гц), проте в подальшому залежність монотонно спадає. У такий спосіб, очевидно, що для всіх режимів фрагментації металевого зразка при ІПД спектр (потужність) флуктуацій еволюційних змінних буде мати єдиний вигляд, що пропорційно зменшується зі збільшенням частоти, а отже, в досліджуваній моделі існують різні часові кореляції. Така поведінка суперечить властивостям білого шуму, адже спектральна густина випадкового сигналу у випадку реалізації білого шуму набуває сталого значення  $S_p(\omega) = \text{const}$ , що відповідає діапазону всіх можливих частот (тобто потужність сигналу на всіх частотах однакова) [151]. Відповідно кореляції у системі відсутні.

Відомо, що у більшості фізичних, біологічних та економічних систем, яким притаманні фазові переходи, зустрічаються стохастичні (флуктуаційні) процеси зі спектральною потужністю, яка пропорційно зменшується зі збільшенням частоти та відповідає реалізації кольорового шуму [164, 169, 170]. Зокрема, аналогічна поведінка зустрічається у багатьох існуючих динамічних системах, що мають джерело “білого” шуму та характеризуються нерівноважними переходами [169, 171–173].

Очевидно, що область зародження та хід реалізації пластичної течії у комірчастій структурі металів є статистично незалежним процесом, тому припускається, що флуктуації у кристалічній структурі повинні відображати “білий” шум. Проте нелінійна взаємодія МЗ з дислокаційними ансамблями та іншими структурними неоднорідностями призводить до більш складного характеру флуктуацій внутрішнього шуму у системі. У результаті у структурі матеріалу акти-

вуються різного роду самоорганізовані процеси, що призводять до формування нових станів чи фаз.

Так, зменшення залежностей  $S_p(\omega)$  пов'язане з тим, що у вихідному рівнянні Ланжевена (4.6) нелінійні внески, які відображають взаємодії нерівноважних параметрів стану (структурних дефектів різних рівнів), перешкоджають реалізації високих частот. У результаті відбувається перехід від білого шуму  $\xi(t)$ , що характеризує більшість фізичних систем, до кольорового з ненульовим часом кореляції.

Проведемо додатковий аналіз випадкових переходів густини МЗ  $h_g$  за допомогою побудови АКФ, що для випадкових процесів визначається за формулою [174]

$$R(\tau) = E \{X(t)X^*(t - \tau)\}, \quad (4.33)$$

де  $X(t)$  – функція (сигнал) випадкового процесу,  $E$  – оператор математичного сподівання, символ зірочка позначає комплексно-спряжену величину. Наведена формула демонструє залежність між двома випадковими процесами, що зміщені один відносно одного на декілька часових відліків  $\tau$  (мається на увазі затримка сигналу).

Відомо, що АКФ використовується для аналізу складних коливань та виступає характеристикою часових залежностей, оскільки дозволяє зробити висновок про наявність періодичних складових в еволюційній залежності та отримати їх частотні характеристики. Дослідження екстремальних значень одержаних корелограм дозволяє визначити відповідні часи кореляції у динамічній системі. Вважається, що автокореляційна залежність буде мати періодичний характер, якщо початкова функція є періодичною.

За визначенням АКФ завжди визначається в межах від  $-1$  до  $1$  та з підвищенням  $\tau$  (лагу або часу затримки) буде загасати. Разом із тим, якщо значення АКФ близькі до нуля, вважається що енергія випадкового сигналу (еволюція густини МЗ), яка у даному випадку залежить від інтенсивності флуктуацій  $N_D$ , формується випадковим чином та періодичність у залежності не проявляється. У свою чергу, періодичні часові залежності визначаються АКФ, що набувають

максимальних значень близьких до 1. Крім того, вигляд корелограми дозволяє зробити висновок про стаціонарність часового ряду, властивості якого залишаються сталими незалежно від зміни початку відліку часу [174].

Для дискретного часового ряду з відомим математичним сподіванням  $\mu$  та дисперсією  $\sigma$  АКФ обчислюється наступним чином [174]

$$A_{cf}(\tau) = \frac{1}{N\sigma^2} \sum_{t=1}^{N-\tau} (x_t - \mu)(x_{t-\tau} - \mu), \quad (4.34)$$

де  $N$  – довжина часового ряду,  $\tau$  – лаг або час затримки.

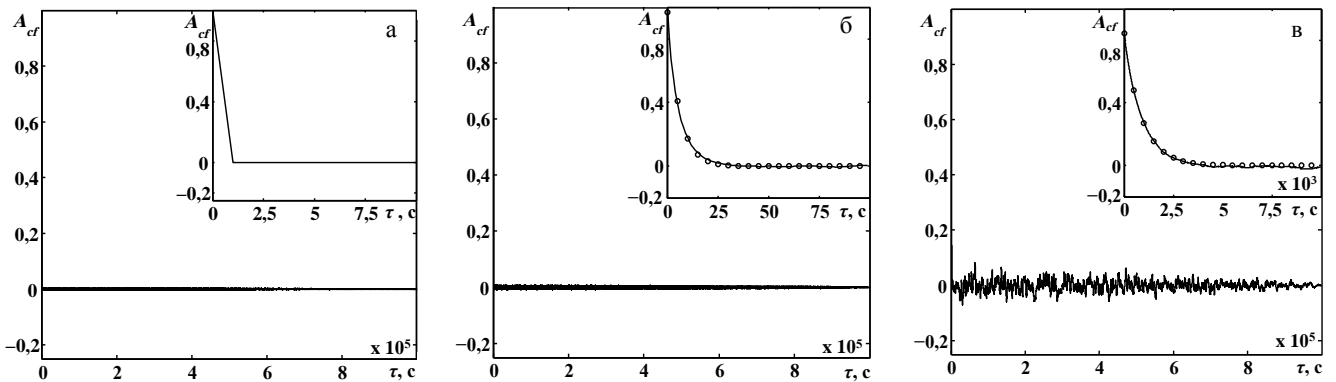


Рис. 4.6. Автокореляційні залежності  $A_{cf}(\tau)$  (4.34) часових кривих. Рисунок а відповідає числовому представленню “білого” шуму. Корелограми, що показано на рисунках б, в, побудовано для усереднених за 10-ма реалізаціями часових залежностей густин МЗ при умовах вказаних на рис. 4.4а, в та значеннях  $N = 10^6$ ,  $T = 5 \cdot 10^4$  с,  $\Delta t = 0,05$  с. Лінії з кружками визначаються рівняннями: б –  $A_{cf}(\tau) = 0,95 \cdot \exp(-0,162\tau)$ ; в –  $A_{cf}(\tau) = 0,83 \cdot \exp(-0,001\tau)$

Отже, на рис. 4.6 представлено автокореляційні залежності двох функцій (базової еволюційної залежності та зміщеної на величину  $\tau$ ) від величини зсуву  $\tau$  у часі, що обчислюються за формулою (4.34). Відмітимо, що розрахунки АКФ проведені за допомогою функції `autocorr()` у програмному середовищі MATLAB. Випадок, який представлено на рис. 4.6а, демонструє корелограму, що отримана у результаті числового моделювання “білого” шуму. Залежності, що зображено на рис. 4.6б, в, побудовано для відповідних на рис. 4.4а, в часових залежностей еволюції густин МЗ. Водночас варто відмітити, що для обчислення АКФ використовувалися часові ряди, які також усереднено за 10-ма реалізаціями та одержано при значеннях  $N = 10^6$ ,  $T = 5 \cdot 10^4$  с,  $\Delta t = 0,05$  с, що дозволило більш

точно оцінити поведінку динамічної системи.

Аналіз отриманих рисунків демонструє, що значення АКФ експоненціально зменшуються до нуля (див. вставки) та проявляють незначні згасні коливання довкола встановленої величини<sup>33</sup>. У такий спосіб, періодичність у одержаних залежностях не спостерігається, а отже еволюція густини МЗ та автокореляція у системі формуються випадковим чином. Очевидно, що з часом АКФ набуває стабільного значення, що дозволяє зробити висновки про стаціонарність часових залежностей.

З рисунків видно, що АКФ у всіх випадках набуває максимального значення при  $\tau = 0$  (тобто час кореляції дорівнює нулю), що відповідає визначенню абсолютно випадкового процесу: “білого шуму”, що має у якості АКФ функцію Дірака. Проте порівнюючи одержані результати на рис. 4.6б, в (див. вставки) з числовим наближенням  $\delta$ -функції на рис. 4.6а, очевидно, що досліджуваній системі притаманна автокореляція протягом певного часового інтервалу. Як підсумок, система (4.6)–(4.8) демонструє немарківську поведінку, що у данному випадку реалізується за рахунок наявності кольорового шуму з ненульовим часом кореляції.

Відомо, що кольоровий шум  $\zeta(t)$  описується процесом Орнштайна-Уленбека [151], який визначається рівнянням:

$$\tau \frac{d\zeta(t)}{dt} = -\zeta(t) + \xi(t), \quad (4.35)$$

де  $\xi(t)$  – представлення білого шуму з інтенсивністю  $\sigma^2 = 1$  та моментами

$$\langle \xi(t) \rangle = 0, \quad \langle \xi(t)\xi(t') \rangle = \sigma^2 \delta(t - t'). \quad (4.36)$$

Водночас кореляційна функція процесу  $\zeta(t)$  має вид

$$\langle \zeta(t)\zeta(t') \rangle = \frac{\sigma^2}{2\tau} \exp\left(-\frac{|t - t'|}{\tau}\right), \quad (4.37)$$

де  $\tau$  – час автокореляції.

<sup>33</sup>Припускається, що наявність коливань довкола нуля пов’язане з точністю обчислень та розмірністю часових рядів (кількістю розрахункових точок). З цього приводу вважається, що в граничному випадку АКФ буде експоненціально спадати до постійного значення, рівного нулю.

Процес (4.35) виступає свого роду “фільтром” для “білого” шуму, оскільки згладжує часові флуктуації параметра порядку. Відповідно з наближенням часу автокореляції  $\tau$  до нуля, отримуємо “білий” шум, де  $\tau = 0$ . Очевидно, що з підвищенням  $\tau$ , система демонструє більше інформації стосовно еволюції випадкового процесу, тобто спостерігається явна залежність від передісторії.

Апроксимуючи одержані залежності на рис. 4.6б, в (див. лінії з кружками на вставках), отримуємо відповідні рівняння  $A_{cf}(\tau) = 0,95 \cdot \exp(-0,162\tau)$  (випадок б) та  $A_{cf}(\tau) = 0,83 \cdot \exp(-0,001\tau)$  (випадок в), що визначають вигляд АКФ. Отже, еволюційні залежності густин МЗ  $h_g$ , що представлено на рис. 4.4а, в, мають часи автокореляції  $\tau \equiv 1/0,162 = 6,17$  с та  $\tau \equiv 1/0,001 = 1000$  с. Наведені значення означають, що протягом визначеного періоду часу  $\tau$  хід еволюції густини МЗ найбільш імовірно буде зберігати тенденцію процесу. Варто зазначити, що кореляція може мати як позитивно спрямований, якщо зберігається тенденція процесу, так і проявляти антикорельований, тобто від’ємний ефект – мають місце зворотні процеси (наприклад, чергування зростання та спадання залежності). Очевидно, що зі збільшенням значення часу автокореляції  $\tau$  проявляється сильніший зв’язок майбутнього з передісторією процесу. Із фізичної точки зору ми можемо припустити, яким буде розмір зерен у досліджуваному зразку у наступний момент часу. Тобто має місце виникнення прогнозованих результатів оброблення ПД.

У випадку, що відповідає еволюції густини МЗ на рис. 4.4в, вважається, що час автокореляції  $\tau \equiv 1000$  с має “ефективне” значення, оскільки система здійснює постійні структурні перетворення. Ці перетворення проявляються у реалізації динамічних переходів між двома граничними структурами (фазами) з визначеними розмірами зерен. Із огляду на це припускається, що система (кристалічна структура металу) за визначених умов та протягом деякого періоду  $\tau$  найбільш імовірно (переважно) буде функціонувати у певному визначеному стаціонарному стані. Згідно з одержаних у підрозділі 4.2 розподілів реалізації густин МЗ (див. рис. 4.3) це означає, що гранична структура металевого зразка визначається різним відсотковим співвідношенням об’ємної долі кристалітів визначених розмірів.

Як підсумок, у наступні моменти часу можливо передбачити переважаючу фазу чи стійкий структурний стан з відповідним розміром зерен у граничній структурі, що формується.

Отже, проведений аналіз АКФ виявив, що під час фрагментації полікристалічної структури металу чи сплаву до визначеного моменту часу  $\tau$  буде існувати пам'ять про передісторію попередніх значень  $h_g$  чи в цілому стійких станів у структурі зразка. Звідси висновок, що величина часу автокореляції впливає на степінь відхилення густини МЗ від середнього значення, а отже розмір зерен у сформованій граничній структурі може набувати різні значень при однакових умовах оброблення. Із цього приводу вважається, що чим більше  $\tau$  у досліджуваній системі (кристалічній структурі), тим більше потрібно часу на оброблення металевго зразка для одержання бажаного результату. У такий спосіб, отримані результати можуть бути корисними з точки зору технічних застосувань, зокрема при встановленні умов оброблення для досягнення бажаного результату: стійкої граничної структури з СМК чи НК розмірами зерен.

#### Висновки до розділу 4

1. Досліджено процес фрагментації металевої структури під час ПД з урахуванням впливу адитивного гаусівського шуму, що дозволило більш точно описати самоузгоджену поведінку структурних дефектів у процесі формування граничних СМК чи НК структур.

2. Дослідження умов формування стаціонарних станів системи при відносному стисненні металевго зразка  $\varepsilon_{ii}^e = -0,1 \%$  демонструє можливі сценарії та режими процесу фрагментації полікристалічної структури. Показано, що у випадку монокристала чи КЗПК процес оброблення розпочинається з поступового накопичення пружної деформації до моменту виникнення пластичної течії, що є необхідною умовою активації процесу фрагментації. Із подальшим навантаженням протікає активна стадія подрібнення зернистої структури, що залежно від значень інтенсивності шуму та пружної зсувної деформації супроводжується формуванням різної кількості стаціонарних структур.

3. Отримано ФД, які демонструють умови формування стаціонарних структур різних типів. Досліджено поведінку системи в кожній області ФД. Виявлено, що при достатній інтенсивності флуктуацій стохастичного джерела система може здійснювати динамічні переходи між фазами матеріалу, що неможливо досягти при розгляді детерміністичного підходу.

4. Розподіл реалізацій густин МЗ дозволив кількісно оцінити склад зернистої структури в об'ємі металевго зразка. Отже, при визначених умовах оброблення можливе формування однієї граничної структури з імовірністю 95% та розмірами зерен в межах  $d \sim 57 - 133$  нм. За умови формування одночасно двох стаціонарних станів чи фаз, гранична структура визначається сумішшю зерен різного розміру. Доля СМК зерен з розмірами до 285 нм становить 15%, а НК зерна з розмірами в межах  $d \sim 66 - 125$  нм складають 60% об'єму металевго зразка.

5. Розраховано часові залежності густин МЗ, що враховують вплив адитивного шуму основних параметрів стану системи та демонструють процес перебудови кристалічної структури металу чи сплаву у ході ІПД. Показано, що у випадку існування єдиного стаціонарного стану, у металевому зразку формується НК структура з розмірами зерен в межах встановленого середнього значення  $d \sim 76$  нм. Випадкові переходи між двома стаціонарними станами системи дозволяють сформувати фрагментовану структуру, що визначається розмірами кристалітів:  $d \sim 714$  нм та  $d \sim 83$  нм.

6. Виявлено, що спектральна густина еволюційної залежності густин МЗ залежить від частоти та відображає наявність у системі корельованих флуктуацій. Дослідження АКФ часових залежностей  $h_g$  дозволило визначити вигляд кореляційної функції та виявити частотні характеристики процесу. Встановлено, що АКФ визначається експоненціальною залежністю та демонструє немарківську поведінку, оскільки у системі за визначених умов присутні часи автокореляції  $\tau \equiv 6, 17$  с та  $\tau \equiv 1000$  с. Встановлено, що одержані результати можуть бути корисними з точки зору технічних застосувань, оскільки дозволяють спрогнозувати розмір зерен чи стан (фазу) у кристалічній структурі металу чи сплаву протягом визначеного моменту часу  $\tau$  та встановити необхідні умови оброблен-

ня для досягнення бажаного результату: стійкої граничної структури з СМК чи НК розмірами зерен.

Результати, що наведені у даному розділі дисертаційної роботи, опубліковано в статті [53], статті в матеріалах конференцій [54] і тезах доповідей на конференціях [57, 58, 67, 68, 131].



## ОСНОВНІ 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 субмікроструктурних 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 металевого 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 ти-

пів. 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 субмікросталічних 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 металевому зразку формується нанокристалічна структура з розмірами зерен у межах установленного 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 установлено, 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 ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

1. Глезер А. М. Нанокристаллы, закаленные из расплава / А. М. Глезер, И. Е. Пермякова. – Москва: Физматлит, 2012. – 360 с.
2. Rusz S. Possibilities of Application Methods Drece in Forming of Non-Ferrous Metals / S. Rusz, A. Klyszewski, M. Salajka // Arch. Metall. Mater. – 2015. – Vol. 30, № 4. – P. 3011–3016.
3. Валиев Р. З. Объемные наноструктурные металлические материалы: получение, структура и свойства / Р. З. Валиев, И. В. Александров. – Москва: ИКЦ “Академкнига”, 2007. – 398 с.
4. Estrin Y. Extreme grain refinement by severe plastic deformation: A wealth of challenging science / Y. Estrin, A. Vinogradov // Acta Mater. – 2013. – Vol. 61, № 3. – P. 782–817.
5. Винтовая экструзия – процес накопления деформации / Я. Е. Бейгельзимер, В. Н. Варюхин, Д. В. Орлов, С. Г. Сынков. – Донецк: Фирма ТЕАН, 2003. – 87 с.
6. Enhanced fatigue properties of nanostructured austenitic SUS 316L stainless steel / H. Ueno, K. Kakihata, Y. Kaneko, S. Hashimoto, A. Vinogradov // Acta Mater. – 2011. – Vol. 59, № 18. – P. 7060–7069.
7. Получение субмикроструктурных композитов с большим равномерным удлинением методом винтовой экструзии: математическое моделирование процесса / О. В. Прокофьева, Я. Е. Бейгельзимер, Р. Ю. Кулагин, Ю. З. Эстрин, В. Н. Варюхин // Металлы. – 2017. – Т. 2. – С. 76–81.
8. Finite element analysis of plastic deformation in twist extrusion / M. I. Latypov, I. V. Alexandrov, Y. E. Beygelzimer, S. Lee, H. S. Kim // Comp. Mater. Sci. – 2012. – Vol. 60. – P. 194–200.
9. Сергеев В. И. Влияние химического состава, фазового и структурного состояния на свойства материалов. Учебное пособие / В. И. Сергеев. – Уфа: УГАТУ, 2007. – 82 с.

10. Исламгалиев Р. К. Эволюция структуры меди при консолидации порошков методом интенсивной пластической деформации кручением / Р. К. Исламгалиев, К. М. Нестеров, Р. З. Валиев // Вестник УГАТУ. – 2013. – Т. 17, № 4. – С. 81–89.
11. Бродова И. Г. Эффективные способы измельчения структуры алюминиевых сплавов / И. Г. Бродова // Журнал СФУ. Техника и технологии. – 2015. – Т. 8, № 4. – С. 519–530.
12. Влияние всесторонней изотермическойковки на структуру и свойства низкоуглеродистой стали 12ГБА / С. Н. Сергеев, И. М. Сафаров, А. В. Корзников, Р. М. Галеев, С. В. Гладковский, Е. М. Бородин // Письма о материалах. – 2012. – Т. 2, № 3. – С. 117–120.
13. Structural changes in aluminum alloys upon severe plastic deformation / A. A. Mazilkin, B. B. Straumal, S. G. Protasova, O. A. Kogtenkova, R. Z. Valiev // Phys. Solid State. – 2007. – Vol. 49, № 5. – P. 824–829.
14. Глезер А. М. О природе сверхвысокой пластической (мегапластической) деформации / А. М. Глезер // Известия РАН. Серия физическая. – 2007. – Т. 71, № 12. – С. 1764–1773.
15. Основы пластической деформации наноструктурных материалов / А. М. Глезер, Э. В. Козлов, Н. А. Конева, Н. А. Попова, И. А. Курзина // – Москва: Физматлит, 2016. – 304 с.
16. Эволюция структуры и фазовых превращений в метастабильной аустенитной стали при интенсивной пластической деформации / Л. А. Мальцева, Н. И. Носкова, Т. В. Мальцева, И. И. Косицына, Н. Н. Озерец, А. В. Мисарь, А. В. Левина // ФТВД. – 2009. – Т. 19, № 1. – С. 83–91.
17. Соколенко В. И. Механические характеристики наноструктурированных циркония и цирконий-ниобиевых сплавов / В. И. Соколенко, А. В. Мац, В. А. Мац // ФТВД. – 2013. – Т. 23, № 2. – С. 96–102.
18. Особенности структуры и свойств проволоки в зависимости от степени деформации при волочении со сдвигом / А. А. Максакова, В. Е. Ольшанецкий, Е. Г. Пашинская, А. В. Климов // НМТ. – 2014. – № 2. – С. 26–29.

19. Влияние волок со сдвигом на особенности структуры и свойств малоуглеродистой проволоки / Е. Г. Пашинская, А. В. Завдоев, А. А. Максакова, В. Н. Варюхин, А. А. Толпа, В. М. Ткаченко // ФТВД. – 2015. – Т. 25, № 1-2. – С. 107–121.
20. Особенности структуры и свойств проволоки в зависимости от степени деформации при волочении со сдвигом / А. А. Максакова, В. Е. Ольшанецкий, Е. Г. Пашинская, А. В. Климов // НМТ. – 2014. – Т. 2. – С. 26–29.
21. Unusual young's modulus behavior in ultrafine-grained and microcrystalline copper wires caused by texture changes during processing and annealing / P. P. Pal-Val, Yu. N. Loginov, S. L. Demakov, A. G. Illarionov, V. D. Natsik, L. N. Pal-Val, A. A. Davydenko, A. P. Rybalko // Mater. Sci. Engin. – 2014. – Vol. 618, № 1-2. – P. 9–15.
22. The effect of annealing on the internal friction in ECAP-modified ultrafine grained copper / L. N. Pal-Val, E. N. Vatazhuk, Y. Estrin, I. S. Golovin, P. P. Pal-Val // Sol. St. Phen. – 2012. – Vol. 184. – P. 284–294.
23. Малыгин Г. А. Дислокационный механизм динамической полигонизации кристаллов при изгибе / Г. А. Малыгин // ФТТ. – 2002. – Т. 44, № 7. – С. 1249–1253.
24. Малыгин Г. А. Кинетический механизм образования фрагментированных дислокационных структур при больших пластических деформациях / Г. А. Малыгин // ФТТ. – 2002. – Т. 44, № 11. – С. 1249–1253.
25. Малыгин Г. А. Дислокационно-кинетическая модель формирования дислокационной структуры при распространении интенсивной ударной волны в нанокристаллическом материале / Г. А. Малыгин // ФТТ. – 2015. – Т. 57, № 5. – С. 955–960.
26. Чувильдеев В. Н. Теория неравновесных границ зерен в металлах и её приложения для описания нано- и микрокристаллических материалов / В. Н. Чувильдеев // Вестник ННГУ. – 2010. – Т. 5, № 2. – С. 124–131.
27. Kopylov V. I. Chapter 1.3: The limit of grain refinement during ECAP deformation / V. I. Kopylov, V. N. Chuvil'deev // Severe Plastic Deformation.

- New York: Nova Science Publishers, 2006. – P. 37–58.
28. Fundamentals and Engineering of Severe Plastic Deformation / V. M. Segal, I. J. Beyerlein, C. N. Tome, V. N. Chuvil'deev, V. I. Kopylov. – New York: Nova Science Publishers, 2010. – 542 с.
29. Чувильдеев В. Н. Модель зернограничной диффузии в *a*- и *b*-фазах титана и циркония / В. Н. Чувильдеев, А. В. Семенычева // ФТТ. – 2017. – Vol. 59, № 1. – P. 5–12.
30. Beygelzimer Y. Grain refinement versus voids accumulation during severe plastic deformations of polycrystals: mathematical simulation / Y. Beygelzimer // Mech. Mater. – 2005. – Vol. 37, № 7. – P. 753–767.
31. Деформационная обработка вторичного алюминия и алюминий содержащих отходов / А. И. Шевелев, Я. Е. Бейгельзимер, В. Н. Варюхин, С. Г. Сынков, А. В. Решетов // – Донецк: Ноулидж, 2010. – 270 с.
32. Метлов Л. С. Неравновесная эволюционная термодинамика и ее приложения / Л. С. Метлов. – Донецк: Ноулидж, 2014. – 250 с.
33. Metlov L. S. Nonequilibrium dynamics of a two-defect system under severe load / L. S. Metlov // Phys. Rev. E. – 2014. – Vol. 90, № 2. – P. 022124 (8 pp).
34. Metlov L. S. Formation of the internal structure of solids under severe load / L. S. Metlov // Phys. Rev. E. – 2010. – Vol. 81, № 5. – P. 051121 (9 pp).
35. Metlov L. S. Nonequilibrium Evolution Thermodynamics of Vacancies / L. S. Metlov // Phys. Rev. Lett. – 2011. – Vol. 106, № 16. – P. 165506 (4 pp).
36. Vonsovskii S. V. Magnetism / S. V. Vonsovskii. – New York: J. Wiley, 1974. – 1256 p.
37. Description of far-from-equilibrium processes by mean-field lattice gas models / J.-F. Gouyet, M. Plapp, W. Dieterich, P. Maass // Adv. Phys. – 2003. – Vol. 52, № 6. – P. 523–638.
38. Кутьин Е. И. Методы теории особенностей в феноменологии фазовых переходов / Е. И. Кутьин, В. Л. Лорман, С. В. Павлов // УФН – 1991. – Т. 161, № 6. – P. 109–147.
39. Панин В. Е. Структурные уровни деформации твердых тел / В. Е. Панин,

- В. А. Лихачев, Ю. В. Гриняев. – Новосибирск: Наука, 1985. – 1256 с.
40. 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. 12, № 2. – Р. 5–26.
41. Глезер А. М Циклический характер эволюции дефектной структуры и свойств металлических материалов при мегапластической деформации / А. М. Глезер, Л. С. Метлов, В. Н. Варюхин // Деформация и разрушение материалов. – 2014. – № 5. – С. 8–13.
42. Numerical Recipes: The Art of Scientific Computing / W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling, B. P. Flannery. – 3rd edn. – New York: Cambridge university press, 2007. – 1256 p.
43. Андронов А. А. Теория колебаний / А. А. Андронов, А. А. Витт, С. Э. Хайкин. – Москва: Наука, 1981. – 918 с.
44. Снеддон И. Преобразования Фурье / И. Снеддон. – Москва: Изд-во иностр. лит., 1955. – 668 с.
45. Теория электрической связи: учебное пособие / К. К. Васильев, В. А. Глушков, А. В. Дормидонтов, А. Г. Нестеренко. – Ульяновск: УлГТУ, 2008. – 452 с.
46. Влияние внешнего периодического воздействия на кинетику фрагментации металлов при интенсивной пластической деформации / А. В. Хоменко, Д. С. Трощенко, Д. В. Бойко, М. В. Захаров // Ж. нано-электрон. физ. – 2015. – Т. 7, № 1. – С. 01039 (11 сс).
47. Khomenko A. V. Thermodynamics and kinetics of solids fragmentation at severe plastic deformation / A. V. Khomenko, D. S. Troshchenko, L. S. Metlov // Condens. Matter Phys. – 2015. – Vol. 18, № 3. – P. 33004 (14 pp).
48. 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).

49. Хоменко А. В. Моделирование кинетики режимов фрагментации материалов при интенсивной пластической деформации / А. В. Хоменко, Д. С. Трощенко, Л. С. Метлов // *Металлофиз. новейшие технол.* – 2017. – Т. 39, № 2. – С. 265–284.
50. Хоменко А. В. Фазовая динамика фрагментации металлов при мегапластической (интенсивной) деформации / А. В. Хоменко, Д. С. Трощенко, Л. С. Метлов // *Деформация и разрушение материалов.* – 2017. – № 8. – С. 2–10.
51. Особенности фазовой кинетики фрагментации металлов при интенсивной пластической деформации / А. В. Хоменко, Д. С. Трощенко, Л. С. Метлов, П. Е. Трофименко // *Наносистемы, наноматериалы, нанотехнологии.* – 2017. – Т. 15, № 2. – С. 203–220.
52. Трощенко Д. С. Modeling of the phase diagram and kinetics of materials fragmentation modes under severe plastic deformation / Д. С. Трощенко, А. В. Хоменко // *Материалы VIII Международной научно-инновационной молодежной конференции “Современные твердофазные технологии: теория, практика и инновационный менеджмент”*, (Тамбов, 27-28 октября 2016). – Тамбов, 2016. – Т. 1. – С. 365–367.
53. Вплив адитивного гаусового шуму на фазову діаграму режимів фрагментації металу при інтенсивній пластичній деформації / О. В. Хоменко, Д. С. Трощенко, Я. О. Кравченко, М. О. Хоменко // *Ж. нано- та електрон. фіз.* – 2017. – Т. 9, № 3. – С. 03045 (8 сс).
54. 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).
55. 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).
56. Трощенко Д. С. Вплив зовнішньої періодичної дії на фазову діаграму режимів фрагментації металів при інтенсивній пластичній деформації / Д. С. Трощенко, О. В. Хоменко // Праці XVII Міжнародного симпозіуму “Методи дискретних особливостей в задачах математичної фізики”, (Харків – Суми, 8–13 Червня 2015). – Харків, 2015. – С. 245–248.
  57. Хоменко А. В. Вплив шуму на фазову діаграму режимів фрагментації при інтенсивній пластичній деформації / А. В. Хоменко, Д. С. Трощенко, Л. С. Метлов // Збірник тез Міжнародної конференції студентів та молодих науковців з теоретичної та експериментальної фізики “ЄВРИКА-2014”, (Львів, 15–17 травня 2014 р.). – Львів, 2014. – С. 27.
  58. 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 5<sup>th</sup> International Conference for Young Scientists “Low Temperature Physics-2014”, (Kharkov, 2–6 June 2014). – Kharkov, 2014. – P. 135.
  59. Хоменко О. В. Моделювання зовнішнього періодичного впливу на фазову діаграму та кінетику фрагментації металів при інтенсивній пластичній деформації / О. В. Хоменко, Д. С. Трощенко, М. О. Хоменко // Збірник тез Міжнародної конференції студентів та молодих науковців з теоретичної та експериментальної фізики “ЄВРИКА-2015”, (Львів, 13–15 травня 2015 р.). – Львів, 2015. – С. F8.
  60. Хоменко А. В. Термодинамика и кинетика фрагментации твердых тел при интенсивной пластической деформации / А. В. Хоменко, Д. С. Трощенко, Е. П. Хоменко // Матеріали Міжнародної конференції молодих учених і аспірантів “ІЕФ-2015”, (Ужгород, 18–25 травня 2015 р.). – Ужгород, 2015. – С. 213.
  61. 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 6<sup>th</sup> International Conference for

- Young Scientists “Low Temperature Physics-2015”, (Kharkov, 1–5 June 2015). – Kharkov, 2015. – P. 117.
62. 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 7<sup>th</sup> International Conference for Young Scientists “Low Temperature Physics-2016”, (Kharkov, 6–10 June 2016). – Kharkov, 2016. – P. 117.
63. 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 4<sup>th</sup> International Conference “Nanotechnologie” “Nano-2016”, (Tbilisi, Georgia, 24–27 October 2016). – Tbilisi, 2016. – P. 208.
64. Хоменко А. В. Двухуровневая и двухмодовая кинетика фрагментации металлов при интенсивной пластической деформации / А. В. Хоменко, Д. С. Трощенко, И. О. Солонар // Матеріали та програма науково-технічної конференції “Інформатика, математика, автоматика-2017”, (Суми, 17–21 квітня 2017 р.). – Суми, 2017. – С. 176.
65. Діаграма стійкості фрагментації металів при інтенсивній пластичній деформації / О. В. Хоменко, Д. С. Трощенко, М. О. Хоменко, И. О. Солонар // Збірник тез Міжнародної конференції студентів та молодих науковців з теоретичної та експериментальної фізики “ЄВРИКА-2017”, (Львів, 16–18 травня 2017 р.). – Львів, 2017. – С. С1.
66. 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 8<sup>th</sup> International Conference for Professionals and Young Scientists “Low temperature physics-2017”, (Kharkov, 29 may – 2 June 2017). – Kharkov, 2017. – P. 198.
67. 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 5<sup>th</sup> International Research and Practice Conference

- “Nanotechnology and Nanomaterials” “NANO-2017”, (Chernivtsi, 23–26 August 2017). – Chernivtsi, 2017. – P. 534.
68. Влияние шума на режимы фрагментации материалов при интенсивной пластической деформации / А. В. Хоменко, Д. С. Троценко, И. О. Солонар, К. В. Васюхно // Матеріали та програма науково-технічної конференції “Інформатика, математика, автоматика-2018”, (Суми, 5–9 лютого 2018 р.). – Суми, 2018. – С. 182.
69. Fundamentals of interface phenomena in advanced bulk nanoscale materials / B. Baretzky, M. D. Baró, G. P. Grabovetskaya, J. Gubicza, M. B. Ivanov, Yu. R. Kolobov, T. G. Langdon, J. Lendvai, A. G. Lipnitskii, A. A. Mazilkin, A. A. Nazarov, J. Nogués, I. A. Ovidko, S. G. Protasova, G. I. Raab, Á. Révész, N. V. Skiba, M. J. Starink, B. B. Straumal, S. Suriñach, T. Ungár, A. P. Zhilyaev // *Rev. Adv. Mater. Sci.* – 2005. – Vol. 9, № 1 – P. 45–108.
70. SPD-induced changes of structure and magnetic properties in the Cu–Co alloys / B. B. Straumal, S. G. Protasova, A. A. Mazilkin, O. A. Kogtenkova, L. Kurmanaeva, B. Baretzky, G. Schütz, A. Korneva, P. Zięba // *Mater. Lett.* – 2013. – Vol. 98. – P. 217–221.
71. Amorphization of Nd-Fe-B alloy under the action of high-pressure torsion / B. B. Straumal, A. R. Kilmametov, A. A. Mazilkin, S. G. Protasova, K. I. Kolesnikova, P. B. Straumal, B. Baretzky // *Mater. Lett.* – 2015. – Vol. 145. – P. 63–66.
72. Эволюция структуры монокристалла  $\alpha$ -титана при интенсивной пластической деформации кручением под давлением / Ю. В. Хлебникова, Л. Ю. Егорова, В. П. Пилюгин, Т. Р. Суаридзе, А. М. Пацелов // *ЖТФ.* – 2015. – Т. 5. – С. 60–68.
73. Влияние скорости кручения в условиях интенсивной пластической деформации на наковальнях Бриджмена на структурно-фазовые превращения в метастабильной аустенитной стали / И. Ю. Литовченко, А. Н. Тюменцев, А. В. Корзников, С. А. Аккузин // *Вестник ТГУ.* – 2013. – Т. 18, № 4. – С. 1970–1971.

74. Процессы пластического структурообразования металлов / В. И. Копылов, Д. А. Павлик, В. Ф. Малышев, В. М. Сегал, В. И. Резников. – Минск: Навука и тэхніка, 1994. – 232 с.
75. Segal V. Chapter 1.1: Processing mechanics and structure formation during SPD / V. Segal // Severe Plastic Deformation. – New York: Nova Science Publishers, 2006. – P. 1–22.
76. Enhancement of TiZr ductility by hcp–fcc martensitic transformation after severe plastic deformation / Z. Zhang, M. Li, D. Guo, Y. Shi, X. Zhang, H. Schaefer // Mater. Sci. Eng. A. – 2014. – Vol. 594. – P. 321–323.
77. Бриджмен П. В. Исследование больших пластических деформаций и разрыва / П. В. Бриджмен. – Москва: Изд-во иностранной литературы, 1955. – 444 с.
78. Plastic flow, structure and mechanical properties in pure Al deformed by twist extrusion / D. Orlov, Y. Beygelzimer, S. Synkov, V. Varyukhin, N. Tsuji, Z. Horita // Mater. Sci. Eng. A. – 2009. – Vol. 519, № 1. – P. 105–111.
79. Структурные изменения в алюминиевых сплавах при интенсивной пластической деформации / А. А. Мазилкин, Б. Б. Страумал, С. Г. Протрасова, О. А. Когтенкова, Р. З. Валиев // ФТТ. – 2007. – Т. 49, № 5. – С. 824–829.
80. Малыгин Г. А. Прочность и пластичность нанокристаллических материалов и наноразмерных кристаллов (обзор) / Г. А. Малыгин // УФН. – 2011. – Т. 181, № 11. – С. 1129–1156.
81. Малыгин Г. А. Размерные поверхностные эффекты при пластической деформации микро- и нанокристаллов / Г. А. Малыгин // ФТТ. – 2012. – Т. 54, № 8. – С. 1507–1511.
82. Малыгин Г. А. Дислокационно-кинетическая модель формирования и распространения интенсивных ударных волн в кристаллах / Г. А. Малыгин, С. Л. Огарков, А. В. Андрияш // ФТТ. – 2013. – Т. 55, № 4. – С. 721–728.
83. Малыгин Г. А. Процессы самоорганизации дислокаций и пластичность кристаллов / Г. А. Малыгин // УФН. – 1999. – Т. 169, № 9. – С. 979–1010.
84. Малыгин Г. А. Анализ деформационного упрочнения кристаллов при боль-

- ших пластических деформациях / Г. А. Малыгин // ФТТ. – 2001. – Т. 43, № 10. – С. 1832–1838.
85. Малыгин Г. А. Пластичность и прочность микро- и нанокристаллических материалов (Обзор) / Г. А. Малыгин // ФТТ. – 2007. – Т. 49, № 6. – С. 961–982.
86. Чувильдеев В. Н. Неравновесные границы зерен в металлах. Теория и приложения / В. Н. Чувильдеев. – Москва: Физматлит, 2004. – 304 с.
87. Релаксация напряжений и вязкость массивного металлического стекла  $Pd_{40}Cu_{30}Ni_{10}P_{20}$  в условиях изохронного нагрева / О. П. Бобров, С. Н. Лаптев, Х. Нейхойзер, В. А. Хоник, К. Чах // ФТТ. – 2004. – Т. 46, № 10. – С. 1801–1806.
88. Внутренние напряжения деформационной природы в объемных металлических стеклах системы Pd–Cu–Ni–P / Г. В. Афонин, С. В. Хоник, А. А. Калоян, В. А. Хоник // ФТТ. – 2012. – Т. 54, № 11. – С. 2022–2026.
89. Кончаков Р. А. Межузельные гантели в компьютерных моделях монокристаллической и аморфной меди / Р. А. Кончаков, В. А. Хоник, Н. П. Кобелев // ФТТ. – 2004. – Т. 57, № 5. – С. 844–852.
90. Пермякова И. Е. Травление аморфных сплавов на основе кобальта / И. Е. Пермякова, А. М. Глезер // Сборник тезисов IV Международной школы-конференции “Микромеханизмы пластичности, разрушения и сопутствующих явлений”, (Тамбов, 24–30 июня 2007 г.). – Тамбов, 2007. – С. 30–33.
91. Microstructure and strain in protrusions formed during severe plastic deformation of aluminum / C. Chen, Y. Beygelzimer, L. S. Toth, J. J. Fundenberger // Mater. Lett. – 2015. – Vol. 159. – P. 253–256.
92. Метлов Л. С. Двухуровневая неравновесная эволюционная термодинамика ИПД / Л. С. Метлов // Вестник ДонГУ, Сер. А: Естественные науки. – 2009. – Т. 2. – С. 144–161.
93. Метлов Л. С. Моделирование законов упрочнения при ИПД объемных твердых тел методами неравновесной эволюционной термодинамики. I. Зависимости от параметров задачи / Л. С. Метлов, В. Н. Варюхин // ФТВД. –

2012. – Т. 22, № 2. – С. 7–21.
94. Метлов Л. С. Мегапластическая деформация как новый вид фундаментального движения / Л. С. Метлов // Сборник тезисов международной конференции “Прочность неоднородных структур. ПРОСТ-2016”, (Москва, 19–21 апреля 2016 г.). – Москва, 2016. – С. 130.
95. Глезер А. М. Физика мегапластической (интенсивной) деформации твердых тел / А. М. Глезер, Л. С. Метлов // ФТТ. – 2010. – Т. 6, № 52. – С. 1090–1097.
96. Rubi J. M. Nonequilibrium thermodynamics versus model grain growth: derivation and some physical implications / J. M. Rubi, A. Gadomski // Physica A: Statistical Mechanics and its Applications. – 2003. – Vol. 326, № 3-4. – P. 333–343.
97. Santamaria-Holek I. Mesoscopic thermodynamics of stationary states / I. Santamaria-Holek, J. M. Rubi, A. Perez-Madrid // Eprint arXiv:cond-mat/0409362. – 2004.
98. Распределение и корреляция показателей физических свойств горных пород: Справочное пособие. / М. М. Протоdjяконов, Р. И. Тедер, Е. И. Ильнищ-хая, О. П. Якобашвили, И. Б. Сафронова, А. И. Цыкин, И. О. Квашнина, Н. Н. Павлова, Л. Н. Левушкин, Ю. В. Зефирова, А. А. Савельев, М. О. Дол-гова. – Москва: Недра, 1981. – 192 с.
99. Качанов Л. М. Основы теории пластичности / Л. М. Качанов. – Москва: Наука, 1969. – 420 с.
100. Базаров И. П. Термодинамика / И. П. Базаров. – Москва: Высшая школа, 1991. – 376 с.
101. Ландау Л. Д. К теории фазовых переходов. I / Л. Д. Ландау // ЖЭТФ. – 1937. – Т. 7. – С. 19–33.
102. Ландау Л. Д. К теории фазовых переходов. II / Л. Д. Ландау // ЖЭТФ. – 1937. – Т. 7. – С. 627–631.
103. Choudhury A. Grand-potential formulation for multicomponent phase transformations combined with thin-interface asymptotics of the double-obstacle potential / A. Choudhury, B. Nestler // Phys. Rev. E. – 2012. – Vol. 85, № 16.

- P. 021602 (16 pp).
104. Rosam J. Quantitative phase-field modeling of solidification at high lewis number / J. Rosam, P. K. Jimack, A. M. Mullis // *Phys. Rev. E.* – 2009. – Vol. 79, № 16. – P. 030601 (4 pp).
105. Паташинский А. З. Флуктуационная теория фазовых переходов / А. З. Паташинский, В. Л. Покровский. – Москва: Наука, 1982. – 382 с.
106. Metlov L. S. Nonequilibrium evolution thermodynamics of vacancies / L. S. Metlov // *Phys. Rev. Lett.* – 2011. – Vol. 106, № 16. – P. 165506 (4 pp).
107. Metlov L. S. Four variants of theory of the second-order phase transitions / L. S. Metlov // Preprint arXiv: cond-mat/1309.6791. – 2013.
108. Метлов Л. С. Неравновесная эволюционная термодинамика. Теория и эксперимент / Л.С. Метлов // *ФТВД.* – 2008. – Т. 18, № 3. – С. 53–61.
109. Метлов Л. С. Ландау теория ИПД с учетом упрочнения и неоднородности / Л. С. Метлов // *Вістник ДонДУ, Сер. А: Природничі науки.* – 2007. – Т. 2. – С. 108–118.
110. Malygin G. A. Kinetic mechanism of the formation of fragmented dislocation structures upon large plastic deformations / G. A. Malygin // *Phys. Solid State.* – 2002. – Vol. 44, № 11. – P. 2072–2079.
111. Структура и свойства высокоэнтропийных сплавов и нитридных покрытий на их основе / А. Д. Погребняк, А. А. Багдасарян, И. В. Якущенко, В. М. Береснев // *Успехи химии.* – 2014. – Т. 83, № 11. – С. 1027–1061.
112. Сивухин Д. В. Общий курс физики. Т.I Механика / Д. В. Сивухин. – Москва: Наука, 1979. – 520 с.
113. Козлов Э. В. Закономерности пластической деформации ультрамелкозернистых металлических материалов / Э. В. Козлов, Н. А. Попова, Н. А. Конева // *Деформация и разрушение материалов.* – 2014. – Т. 56, № 8. – С. 2–7.
114. Ландау Л. Д. Теоретическая физика: Учебное пособие: в 10 т. / Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. – Москва: Наука, 1987. – Т. 7: Теория упругости. – Изд. 4, испр.и доп. – 1987. – 248 с.
115. Korniyushin Yu. V. Influence of dislocation structure on the conditions of crack

- motion / Yu. V. Korniyushin, V. I. Trefilov, S. A. Firstov // *Strength Mater.* – 1976. – Vol. 8, № 9. – P. 1099–1104.
116. Kochegarov G. G. Energy and mechanism of quasimicroplastic deformation in solids / G. G. Kochegarov // *Tech. Phys. Lett.* – 2000. – Vol. 26, № 6. – P. 467–469.
117. Матвеев Н. М. Методы интегрирования обыкновенных дифференциальных уравнений / Н. М. Матвеев. – Изд. 3. – Москва: Высшая школа, 1967. – 565 с.
118. Олемской А. И. Трехпараметрическая кинетика фазового перехода / А. И. Олемской, А. В. Хоменко // *ЖЭТФ*. – 1996. – Т. 110, № 6(12). – С. 2144–2167.
119. Хоменко А. В. Синергетика фазовых и кинетических переходов в низкоразмерных системах. Физические основы, концепции, методы / А. В. Хоменко. – Saarbrücken, Deutschland/Германия: Palmarium Academic Publishing, 2015. – 328 с.
120. Олемской А. И. О возбужденном состоянии границ зерна в нано- и субмикрорекристаллах / А. И. Олемской, Р. З. Валиев, А. В. Хоменко // *Металлофиз. новейшие технол.* – 1999. – Т. 21, № 4. – С. 43–58.
121. Ландау Л. Д. Теоретическая физика: Учебное пособие: в 10 т. / Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. – Москва: Наука, 1976. – Т. 5: Статистическая физика. Ч. 1. – Изд. 3, испр. – 1976. – 584 с.
122. Горшков А. Г. Теория упругости и пластичности / А. Г. Горшков, Э. И. Старовойтов, Д. В. Тарлаковский. – Москва: Физматлит, 2002. – 416 с.
123. Сурикова Н. С. Структурные превращения в монокристаллах никелида титана при интенсивной пластической деформации / Н. С. Сурикова, И. Ю. Литовченко, Е. А. Корзникова // *Вестник ТГУ*. – 2013. – Т. 18, № 4. – С. 1966–1967.
124. Effects of severe plastic deformation on grain refinement and martensitic transformation in a metastable  $\beta$  Ti alloy / A. Zafari, X.S. Wei, W. Xu, K. Xia // *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering*. – 2015. – Vol. 89, № 1. – P. 01205 (8 pp).



125. Лахтин Ю. М. Материаловедение: Учебник для высших технических учебных заведений / Ю. М. Лахтин, В. П. Леонтьева. – Изд. 3. – Москва: Машиностроение, 1990. – 528 с.
126. Интенсифицированное движение дефектов при больших пластических деформациях / Е. Г. Пашинская, Ю. Н. Подрезов, В. В. Столяров, А. В. Завдоев, И. И. Тищенко // Физика и механика материалов. – 2012. – Т. 12, № 1. – С. 26–33.
127. Nanostructured multielement (TiHfZrNbVTa)N coatings before and after implantation of N<sup>+</sup> ions ( $10^{18}$  cm<sup>-2</sup>): Their structure and mechanical properties / A. D. Pogrebnyak, O. V. Bondar, S. O. Borba, G. Abadias, P. Konarski, S. V. Plotnikov, V. M. Beresnev, L. G. Kassenova, P. Drodziel // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. Sect. B. – 2016. – Vol. 385. – P. 74–83.
128. Pogrebnyak A. D. Structure and properties of nanostructured Ti-Hf-Zr-V-NbN coatings / A. D. Pogrebnyak // J. Nanomater. – 2013. – Vol. 2013. – P. 1–12.
129. Pogrebnyak A. D. Modification of wear and fatigue characteristics of Ti-V-Al alloy by Cu and Ni ion implantation and high-current electron beam treatment / A. D. Pogrebnyak, E. A. Bazyl // Vacuum. – 2001. – Vol. 64, № 1. – P. 1–7.
130. Sobol O. V. Effect of the preparation conditions on the phase composition, structure, and mechanical characteristics of vacuum-Arc Zr-Ti-Si-N coatings / O. V. Sobol, A. D. Pogrebnyak, V. M. Beresnev // Phys. Met. Metallogr. – 2011. – Vol. 112, № 2. – P. 188–195.
131. Хоменко А. В. Моделирование влияния шума на фазовую диаграмму режимов фрагментации при интенсивной пластической деформации / А. В. Хоменко, Д. С. Трощенко, Я. А. Ляшенко // Матеріали та програма науково-технічної конференції “Інформатика, математика, автоматика-2014”, (Суми, 21–26 квітня 2014 р.). – Суми, 2014. – С. 160.
132. Моделирование внешнего периодического воздействия на кинетику фрагментации металлов при интенсивной пластической деформации / А. В. Хоменко, Д. С. Трощенко, Д. В. Бойко, М. В. Захаров // Матеріали та програма науково-технічної конференції “Інформатика, математика, автоматика-2015”,

- (Суми, 20–25 квітня 2015 р.). – Суми, 2015. – С. 160.
133. Хоменко О. В. Моделювання кінетики режимів фрагментації матеріалів при інтенсивній пластичній деформації / О. В. Хоменко, Д. С. Трощенко, І. О. Солонар // Матеріали та програма науково-технічної конференції “Інформатика, математика, автоматика-2016”, (Суми, 18–22 квітня 2016 р.). – Суми, 2016. – С. 186.
134. Хоменко А. В. Фазовая динамика и кинетика интенсивной пластической деформации / А. В. Хоменко, Я. А. Ляшенко, Л. С. Метлов // *Металлофиз. новейшие технол.* – 2008. – Т. 30, № 6. – С. 859–872.
135. Кузнецов С. П. Динамический хаос / С. П. Кузнецов. – Москва: Физматлит, 2006. – 355 с.
136. Биргер И. А. Соппротивление материалов / И. А. Биргер, Р. Р. Мавлютов. – Москва: Наука, 1986. – 560 с.
137. Хоменко А. В. Периодический прерывистый режим граничного трения / А. В. Хоменко, Я. А. Ляшенко // *ЖТФ*. – 2010. – Т. 80, № 1. – С. 27–33.
138. Influence of pressing temperature on microstructural development in equal-channel angular pressing / A. Yamashita, D. Yamaguchi, Z. Horita, T. G. Langdon // *Materials Science and Engineering: A*. – 2000. – Vol. 287, № 1. – P. 100–106.
139. Зельцер А. С. Автоблокировка зародышеобразования и универсальность кинетических явлений при фазовых переходах первого рода / А. С. Зельцер, Т. К. Соболева, А. Э. Филиппов // *ЖЭТФ*. – 1995. – Т. 108, № 1. – С. 356–372.
140. Олемской А. И. Трехпараметрическая кинетика фазового перехода / А. И. Олемской, А. В. Хоменко // *ЖЭТФ*. – 1996. – Т. 110, № 6. – С. 2144–2167.
141. Olemskoi A. I. Self-organized criticality within fractional lorenz scheme / A. I. Olemskoi, A. V. Khomenko, D. O. Kharchenko // *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*. – 2003. – Vol. 323. – P. 263–293.
142. Olemskoi A. I. Synergetic theory for a jamming transition in traffic flow / A. I. Olemskoi, A. V. Khomenko // *Phys. Rev. E*. – 2001. – Vol. 63, № 3. –

Р. 036116(4pp).

143. Малашенко В. В. Коллективное преодоление дислокациями точечных дефектов в динамической области / В. В. Малашенко // ФТТ. – 2014. – Т. 56, № 8. – С. 1528–1530.
144. Влияние пластической деформации на изменение разориентировки границ в металлических материалах / Г. А. Салищев, С. Ю. Миронов, С. В. Жеребцов, А. Н. Беляков // Физика и механика материалов. – 2016. – Т. 25, № 1. – С. 42–48.
145. Глезер А. М. О природе сверхвысокой пластической (мегапластической) деформации / А. М. Глезер // Известия РАН. Серия физическая. – 2007. – Т. 71, № 12. – С. 1764–1773.
146. Khomenko A. V. Noise influence on solid–liquid transition of ultrathin lubricant film / A. V. Khomenko // Phys. Lett. A – 2004. – Vol. 329, № 1. – P. 140–147.
147. Khomenko A. V. Phase dynamics and kinetics of thin lubricant film driven by correlated temperature fluctuations / A. V. Khomenko, I. A. Lyashenko // Fluct. Noise Lett. – 2007. – Vol. 7, № 82. – P. L111–L133.
148. Хоменко О. В. Фазова динаміка тонкої плівки мастила між твердими поверхнями при деформаційному дефекті модуля зсуву / О. В. Хоменко, Я. О. Ляшенко // Журнал фізичних досліджень – 2007. – Т. 11, № 3. – С. 268–278.
149. Olemskoi A. I. Field theory of self-organization / A. I. Olemskoi, A. V. Khomenko, D. A. Olemskoi // Physica A: Statistical Mechanics and its Applications. – 2004. – Vol. 332. – P. 185–206.
150. Хорстхемке В. Индуцированные шумом переходы. Теория и применение в физике, химии и биологии / В. Хорстхемке, Р. Лефевр. – Москва: Мир, 1987. – 400 с.
151. Харченко Д. О. Методи описання і моделювання стохастичних систем: навчальний посібник / Д. О. Харченко. – Суми: Вид-во СумДУ, 2007. – 206 с.
152. Risken H. The Fokker-Planck Equation. Methods of Solution and Applications / H. Risken. – Berlin: Springer-Verlag, 1989. – 454 p.

153. Haken H. Information and Self-Organization: A Macroscopic Approach to Complex Systems / H. Haken. – 3rd edn. – Berlin: Springer, 2006. – 258 p.
154. Klimontovich Yu. L. Nonlinear brownian motion / Yu. L. Klimontovich // Phys.Usp.. – 1994. – Vol. 37, № 8. – P. 737–766.
155. Influence of annealing on niti shape memory alloy subjected to severe plastic deformation / Shuyong Jiang, Yanqiu Zhang, Lihong Zhao, Yufeng Zheng // Intermetallics. – 2013. – Vol. 32. – P. 344–351.
156. Phase transformation behaviors and mechanical properties of ti50ni49fe1 alloy with severe plastic deformation / Wen Ma, Bin Chen, Fu-Shun Liu, Qing Xu // Rare Metals. – 2013. – Vol. 32, № 5. – P. 448–452.
157. Phase and structural transformations in the ti49.5ni50.5 alloy with a shape-memory effect during torsion under high pressure / V. G. Pushin, R. Z. Valiev, E. Z. Valiev, N. I. Kourov, N. N. Kuranova, V. V. Makarov, A. V. Pushin, A. N. Uksusnikov // Phys. Met. Metallogr. – 2012. – Vol. 113, № 3. – P. 256–270.
158. Андронов А. А. Теория колебаний / А. А. Андронов, А. А. Витт, С. Э. Хайкин. – Москва: Наука, 1981. – 918 с.
159. Olemskoi A. I. Self-organized criticality within fractional lorenz scheme / A. I. Olemskoi, A. V. Khomenko , D. O. Kharchenko // Physica A. – 2003. – Vol. 323. – P. 263–293.
160. Хоменко А. В. Статистическая теория граничного трения атомарно-гладких твердых поверхностей при наличии смазочного слоя / А. В. Хоменко, Я. А. Ляшенко // УФН. – Т. 182, № 10. – С. 1081–1110.
161. Тяпунина Н. А. Действие ультразвука на кристаллы с дефектами / Н. А. Тяпунина, Е. К. Наими, Г. М. Зиненкова. – Москва: Изд-во МГУ, 1999. – 238 с.
162. Олейнич-Лысюк А. В. Особенности магнитоэластического эффекта в бериллиевом конденсате / А. В. Олейнич-Лысюк, Н. Д. Паранский // ФТТ. – 2012. – Т. 54, № 3. – С. 417–421.
163. Головин Ю. И. In situ исследование влияния магнитного поля на подвижность дислокаций в деформируемых монокристаллах KCl:Ca / Ю.И. Головин, Р.Б. Моргунов, В.Е. Иванов // ФТТ. – 1997. – Т. 39, № 4. – С. 630–633.

164. Гардинер К. В. Стохастические методы в естественных науках / К. В. Гардинер. – Москва: Наука, 1985. – 526 с.
165. Coffey W. T. Chapter 2: The Langevin Equation Langevin Equations and Methods of Solution / W. T. Coffey, Y. P. Kalmykov // The Langevin Equation. – 4th edn. – Singapore: World Scientific, 2017. p. 189–268.
166. Numerical Recipes in C: The Art of Scientific Computing / W. H. Press, B. P. Flannery, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling. – 2nd edn. – New York: Cambridge University Press, 2002. – 949 p.
167. Структурные изменения при больших пластических деформациях в железе и их влияние на комплекс механических свойств / С. А. Фирстов, Н. И. Даниленко, В. И. Копылов, Ю. Н. Подрезов // Изв. вузов. Физика. – 2002. – Т. 3. – С. 41–49.
168. Direct observation of strain-induced non-equilibrium grain boundaries / B. B. Straumal, O. A. Kogtenkova, F. Mukteperavela, K. I. Kolesnikova, M. F. Bulatov, P. B. Straumal, B. Baretzky // Mater. Lett. – 2015. – Vol. 159. – P. 432–435.
169. Kogan Sh. Electronic Noise and Fluctuations in Solids / Sh. Kogan. – Cambridge: Cambridge University Press, 1996. – 374 p.
170. Ovchinnikov I. V. Topological supersymmetry breaking: The definition and stochastic generalization of chaos and the limit of applicability of statistics / I. V. Ovchinnikov, R. N. Schwartz, K. L. Wang // Mod. Phys. Lett. B. – 2016. – Vol. 30, № 8. – P. 1650086 (17 pp).
171. Dana S. K. Complex Dynamics in Physiological Systems: From Heart to Brain / S. K. Dana, P. K. Roy, J. Kurths. – Berlin/Heidelberg: Springer Netherlands, 2009. – 272 p.
172. Koverda V. P.  $1/f$  noise in a nonequilibrium phase transition: Experiment and mathematical model / V. P. Koverda, V. N. Skokov, V. P. Skripov // J. Exp. Theor. Phys. – 1998. – Vol. 86, № 5. – P. 953–958.
173. Скоков В. Н. Самоорганизованная критичность и  $1/f$ -флуктуации при неравновесных фазовых переходах / В. Н. Скоков, В. П. Коверда, А. В. Ре-

- ШЕТНИКОВ // ЖЭТФ. – 2001. – Т. 119, № 3. – С. 613–620.
174. Time Series Analysis: Forecasting and Control / G. E. P. Box, G. M. Jenkins, G. C. Reinsel, G. M. Ljung. – 5th edn. – Wiley: Wiley Series in Probability and Statistics, 2015. – 712 p.
175. Кроновер Р. М. Фракталы и хаос в динамических системах. Основы теории / Р. М. Кроновер. – Москва: ПОСТМАРКЕТ, 2000. – 352 с.
176. Amit D. J. Field theory, the renormalization group, and critical phenomena / D. J. Amit. – New York: McGraw-Hill International Book Co London, 1978. – 336 p.
177. Olemskoi A. I. Self-organized criticality within fractional lorenz scheme / A. I. Olemskoi, A. V. Khomenko, D. O. Kharchenko // Physica A: Statistical Mechanics and its Applications. – 2003. – Vol. 323. – P. 263–293.
178. Назаренко А. М. Эконометрика / А. М. Назаренко. – Сумы: Изд-во СумГУ, 2003. – 276 с.

## Додаток А

Відомо, що повна деформація представляється у виді суми

$$\varepsilon_{ij} = \varepsilon_{ij}^e + \varepsilon_{ij}^p \quad (\text{A.1})$$

оборотної  $\varepsilon_{ij}^e$  (пружної) та необоротної  $\varepsilon_{ij}^p$  (пластичної або залишкової) складових [99]. Вплив пружної деформації  $\varepsilon_{ij}^e$  на структурну будову і властивості матеріалу після припинення зовнішнього впливу (навантаження) повністю усувається, оскільки незначні відхилення атомів кристалічної решітки повертаються до початкового положення. Після впливу пластичної деформації  $\varepsilon_{ij}^p$  відбувається залишкова зміна як властивостей, так і кристалічної структури металевого зразка, що обробляється. Основною причиною незворотності є взаємодія атомів зі структурними дефектами.

Зміна об'єму та форми твердого тіла під впливом прикладених сил визначається тензором деформацій. У даній роботі розглядається тензор 2-го рангу, який складається з 9 компонент, що враховують 3 напрямки. При вивченні напружено-деформованого стану зазвичай використовують інваріанти  $\varepsilon_{ij}^e$ , тобто деякі комбінації компонентів тензора, що не змінюють свої значення при повороті осей. Отже із фізичної точки зору, перший інваріант  $\varepsilon_{ii}^e$  – об'ємна пружна деформація або відносна зміна об'єму, що обумовлена пружними напруженнями. Вважається, що другий інваріант  $I_2$  визначає рівень пружних зсувних деформацій (або характеризує відносну зміну кута між відповідними осями деформування) і є головним фактором, що однаково відповідає за генерацію дефектів, як при розтягненні, так і при стисненні. Відповідно до теорії пружності [122], інваріанти тензора пружних деформацій визначаються наступними співвідношеннями:

$$I_1 \equiv \varepsilon_{ii}^e = \varepsilon_{11}^e + \varepsilon_{22}^e + \varepsilon_{33}^e, \quad (\text{A.2})$$

$$\begin{aligned} I_2 &\equiv (-\varepsilon_{ii}^e \varepsilon_{jj}^e + \varepsilon_{ij}^e \varepsilon_{ji}^e) / 2 = \\ &= -\varepsilon_{11}^e \varepsilon_{22}^e - \varepsilon_{11}^e \varepsilon_{33}^e - \varepsilon_{22}^e \varepsilon_{33}^e + (\varepsilon_{12}^e)^2 + (\varepsilon_{13}^e)^2 + (\varepsilon_{23}^e)^2. \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

## Додаток Б

Маємо кубічне рівняння відносно густини МЗ:

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

що, згідно до основної теореми алгебри, завжди має хоча б один дійсний розв'язок.

Ввівши позначення  $a = -\varphi_{2g}/\varphi_{3g}$ ,  $b = \varphi_{1g}/\varphi_{3g} - \varphi_{gD}^2/(\varphi_{1D}\varphi_{3g})$ ,  $c = -\varphi_{0g}/\varphi_{3g} - (\varphi_{gD}\varphi_{0D})/(\varphi_{1D}\varphi_{3g})$  та зробивши заміну  $h_g = y - a/3$ , перетворимо рівняння (Б.1) до канонічного виду:

$$\begin{aligned} & \left( y - \frac{a}{3} \right)^3 + a \left( y - \frac{a}{3} \right)^2 + b \left( y - \frac{a}{3} \right) + c = \\ & = y^3 - ay^2 + \frac{a^2}{3}y - \frac{a^3}{27} + a \left( y^2 - \frac{2a}{3}y + \frac{a^2}{9} \right) + b \left( y - \frac{a}{3} \right) + c = 0. \end{aligned}$$

Привівши подібні, одержуємо неповне кубічне рівняння

$$y^3 + \left( b - \frac{a^2}{3} \right) y + c + \frac{2a^3}{27} - \frac{ab}{3} = 0, \quad (\text{Б.2})$$

якому відповідає вираз дискримінанта, що дозволяє визначити кількість дійсних коренів (особливих точок системи ЗДР (2.7), (2.8))

$$D = \left( \frac{p}{3} \right)^3 + \left( \frac{q}{2} \right)^2, \quad (\text{Б.3})$$

де коефіцієнти  $p = b - a^2/3$ ,  $q = c + (2a^3)/27 - (ab)/3$ .

Згідно до виразу (Б.3) можливі три випадки:

- 1)  $D > 0$  – один дійсний розв'язок і два комплексно-спряжених;
- 2)  $D = 0$  – корні збігаються (кратні розв'язки);
- 3)  $D < 0$  – три дійсних розв'язки.

Далі, за формулою Кардано знаходимо корні кубічного рівняння (Б.2) у канонічній формі:

$$y_1 = u^* + v^*, \quad (\text{Б.4})$$

$$y_{2,3} = -\frac{1}{2}y_1 \pm i \frac{(u^* - v^*)}{2} \sqrt{3}, \quad (\text{Б.5})$$



де  $u^* = \sqrt[3]{-q/2 + \sqrt{D}}$ ,  $v^* = -p/(3u^*)$ .

Розв'язки вихідного кубічного рівняння (Б.1) обчислюються відповідно до виразу:

$$h_{g_n}^{st} = y_n - \frac{a}{3}, \quad n = 1, \dots, 3. \quad (\text{Б.6})$$

## Додаток В

### Список опублікованих праць за темою дисертації

#### 1. Наукові праці, в яких опубліковані основні наукові результати

1. Хоменко А. В. Моделирование кинетики режимов фрагментации материалов при интенсивной пластической деформации / А. В. Хоменко, **Д. С. Трощенко**, Л. С. Метлов // *Металлофиз. новейшие технол.* – 2017. – Т. 39, № 2. – С. 265–284.

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

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

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

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

6. Влияние внешнего периодического воздействия на кинетику фрагментации металлов при интенсивной пластической деформации / А. В. Хоменко, **Д. С. Трощенко**, Д. В. Бойко, М. В. Захаров // *Ж. нано-электрон. физ.* – 2015. – Т. 7, № 1. – С. 01039 (11 сс).

#### 2. Наукові праці апробаційного характеру

7. 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).

8. 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).

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

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

11. **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 5<sup>th</sup> International Research and Practice Conference “Nanotechnology and Nanomaterials” “NANO-2017” (Chernivtsi, 23–26 August 2017). – Chernivtsi, 2017. – P. 534 (заочна, публікація тез).

12. 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 8<sup>th</sup> International Conference for Professionals and Young Scientists “Low temperature physics-2017” (Kharkov, 29 may – 2 June 2017). – Kharkov, 2017. – P. 198 (очна, стендова доповідь).

13. **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 (очна, стендова доповідь).

14. 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 7<sup>th</sup> International Conference for Young Scientists “Low Temperature Physics-2016” (Kharkov, 6–10 June 2016). – Kharkov, 2016. – P. 117 (очна, виступ з доповіддю).

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 6<sup>th</sup> International Conference for Young Scientists “Low Temperature Physics-2015” (Kharkov, 1–5 June 2015). – Kharkov, 2015. – P. 117 (заочна, публікація тез).

16. Хоменко А. В. Термодинамика и кинетика фрагментации твердых тел при интенсивной пластической деформации / А. В. Хоменко, **Д. С. Трощенко**, Е. П. Хоменко // Матеріали Міжнародної конференції молодих учених і аспірантів “ІЕФ-2015” (Ужгород, 18–25 травня 2015 р.). – Ужгород, 2015. – С. 213 (заочна, публікація тез).

17. Хоменко О. В. Моделирование внешнего периодического влияния на фазовую диаграмму та кінетику фрагментації металів при інтенсивній пластичній деформації / О. В. Хоменко, **Д. С. Трощенко**, 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 (заочна, публікація тез).

18. 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 5<sup>th</sup> International Conference for Young Scientists “Low Temperature Physics-2014” (Kharkov, 2–6 June 2014). – Kharkov, 2014. – P. 135 (заочна, публікація тез).

19. Хоменко А. В. Вплив шуму на фазову діаграму режимів фрагментації при інтенсивній пластичній деформації / А. В. Хоменко, **Д. С. Трощенко**, 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 (заочна, публікація тез).

### **3. Праці, які додатково відображають наукові результати**

20. Влияние шума на режимы фрагментации материалов при интенсивной пластической деформации / А. В. Хоменко, **Д. С. Троценко**, И. О. Солонар, К. В. Васюхно // Матеріали та програма науково-технічної конференції “Інформатика, математика, автоматика-2018” (Суми, 5–9 лютого 2018 р.). – Суми, 2018. – С. 182 (очна, виступ з доповіддю).

21. Діаграма стійкості фрагментації металів при інтенсивній пластичній деформації / О. В. Хоменко, **Д. С. Троценко**, М. О. Хоменко, И. О. Солонар // 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 (заочна, публікація тез).

22. Хоменко А. В. Двухуровневая и двухмодовая кинетика фрагментации металлов при интенсивной пластической деформации / А. В. Хоменко, **Д. С. Троценко**, И. О. Солонар // Матеріали та програма науково-технічної конференції “Інформатика, математика, автоматика-2017” (Суми, 17–21 квітня 2017 р.). – Суми, 2017. – С. 176 (очна, виступ з доповіддю).