# МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ СУМСЬКИЙ ДЕРЖАВНИЙ УНІВЕРСИТЕТ Кафедра наноелектроніки та модифікації поверхні

## МАГІСТЕРСЬКА РОБОТА

зі спеціальності 153 – «Мікро- та наносистемна техніка»

на тему:

«Феноменологічна модель формування мікрополос зсуву в рамках дислокаційно-кінетичного підходу для субмікро- і нанокристалічних матеріалів»

# Кунцевський Дмитро Анатолійович

Завідувач кафедрою

## Науковий керівник

\_\_\_\_ проф. О.Д.Погребняк

# \_\_\_\_\_доц. О.В. Ющенко

« » 2020 p. « » 2020 p.

### РЕФЕРАТ

Робота складається з вступу, торетичного огляду механізму локалізації деформації і формування мікрополос зсуву при пластичній деформації субмікро- і нанокристалічних матеріалів в рамках дислокаційно-кінетичного підходу на основі рівняння еволюції густини дислокацій та з урахуванням властивостей меж зерен, що є джерелами, бар'єрами та стоками для дислокацій. Стаціонархних залежностей щільності меж зерен та швидкості руху дислокацій в залежності від безрозмірної щільності дислокацій.

Звіт містить 65 сторінок, 17 рисунків та 52 літературних джерела.

В даній роботі були розглянуті фундаментальні властивості субмікро- та нанокристалічних матеріалів. В рамках дислокаційно-кінетичного підходу, теоретично опрацьовано процес утворення локалізації деформації та мікрополос зсуву при пластичній деформації в субмікро- і нанокристалічних матеріалах.

Відповідно до рівняння еволюції щільності дислокацій з урахуванням характеристик меж зерен, які є основними джерелами, бар'єрами та стоками для дислокацій, було сформовано теоретичну модель процесу просторової самоорганізації лінійних дефектів у нанокристалічних матеріалах. Для опису процесу формування мікросмуг **3CVBV** була побудована синергетична трипараметрична модель на основі редукованого рівняння Свіфта-Хоенберга в рамках просторової самоорганізації дислокацій. При вирішенні системи синергетичних рівнянь виявлено ефективну енергію системи, мінімальне значення якої відповідає стійким станам нанокристалічного матеріалу. Аналіз цих станів дає змогу визначити умови формування мікросмуг зсуву.

КЛЮЧОВІ СЛОВА: НАНОКРИСТАЛІЧНІ МАТЕРІАЛИ, МЕЖІ ЗЕРЕН, ПЛАСТИЧНА ДЕФОРМАЦІЯ, САМООРГАНІЗАЦІЯ, ДИСЛОКАЦІЇ, ЛОКАЛІЗАЦІЯ.

# 3MICT

ВСТУП 4
РОЗДІЛ 1 СУБМІКРОКРИСТАЛІЧНІ ТА НАНОКРИСТАЛІЧНІ МАТЕРІАЛИ 6
1.1 Явище локалізації пластичної деформації 6
1.1.1 Експериментальні дослідження локалізації пластичної деформації 8
1.1.2 Матеріал та методи дослідження11
1.2 Причини зародження смуг зсуву 15
1.3 Дислокаційний механізм наноміцності та пластичності 17
1.3.1 Співвідношення Холла-Петча 17
1.3.2 Аналіз напружень течії нанокристалічних металів 20
1.4 Мікросмуги зсуву 22
РОЗДІЛ 2 САМООРГАНІЗАЦІЯ ДИСЛОКАЦІЙ У НАНОКРИСТАЛІЧНИХ
МЕТАЛАХ
2.1 Синергетична система рівнянь 27
2.2 Безрозмірна система рівнянь 29
2.3 Адіабатичне наближення 35
2.4 Синергетичний потенціал 37
РОЗДІЛ З ФАЗОВА КІНЕТИКА ПРОЦЕСУ УТВОРЕННЯ МІКРОСМУГ
ЗСУВУ 44
РОЗДІЛ 4 ПРАВИЛА ТЕХНІКИ БЕЗПЕКИ ПРИ РОБОТІ ЗА
ПЕРСОНАЛЬНИМ КОМП'ЮТЕРОМ
ВИСНОВКИ
СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ 57
ДОДАТОК А

### ВСТУП

Більшість сучасних високих технологій базується на використанні нових матеріалів. Впровадження нанокристалічних матеріалів в різні галузі індустрії призводить до динамічного промислового зростання в розвинених країнах. В останні роки наноструктурованим матеріалам приділяється все більше уваги, завдяки своїм структурним характеристикам наноматеріали мають безліч унікальних властивостей і мають величезні перспективи різноманітного технологічного застосування.

Підвищена зацікавленість до матеріалів та структур такого роду, здебільшого пояснюється специфічними високофункціональними властивостями, крім того здатністю до мініатюризації пристроїв та систем різних типів. У всіх випадках обєднуючим фактором є наявність структурних одиниць розміром менше 100 нм у матеріалі або пристрої.

Специфічні особливості деформаційних процесів в субмікро- і нанокристалічних матеріалах проявляються у відхиленнях від відомих законів, що поєднують властивості полікристалічних матеріалів з розміром їх зерна. Закон Холла-Петча є класичним прикладом, що описує співвідношення між межею текучості  $\sigma_y$  і розміром зерна *d* НК-матеріалу.

Завдяки експерименталльним дослідженням було виявлено, що локалізація пластичної течії відбувається, як при динамічній так і при квазістатичній деформації металів. Деформація такого роду призводить до утворення мікросмуг зсуву в яких щільність дефектів кристалічної решітки та величина пластичної деформації у багато разів перевищує значення цих величин в навколишньому металі. В результаті електронно-мікроскопічного дослідженню було виявлено, що нанозерна всередині мікросмуг сильно витягнуті в напрямку зсуву і містять велику щільність дислокацій, в той час як поза смугами, нанозерна залишаються рівноосними і недиформованими. З

ростом ступеня деформації, кількість і ширина смуг збільшується і в результаті чого, вони утворюють просторово-регулярну структуру.

У даній роботі з точки зору дислокаційно-кінетичних позиції розглянуто механізм формування мікросмуг зсуву в НК і СМК-металах. Незважаючи на велику кількість виконаних до теперішнього часу робіт, в даний час відсутні систематичні та повномасштабні дослідження механізму формування і параметрів мікросмуг зсуву в наноматеріалах в залежності від розміру нанозерен і ступеня пластичної деформації, а є лише якісні спостереження і окремі кількісні дані.

Виходячи з викладеного вище, метою даної роботи є аналіз механізму формування мікросмуг зсуву в субмікро- і нанокристалічних матеріалах на основі дислокаційно-кінетичного підходу. Побудова на основі рівняння еволюції щільності дислокацій, теоретичної моделі процесу просторової самоорганізації лінійних дефектів, що є джерелами та стоками для дислокацій.

# РОЗДІЛ 1 СУБМІКРОКРИСТАЛІЧНІ ТА НАНОКРИСТАЛІЧНІ МАТЕРІАЛИ

У даній роботі з дислокаційно-кінетичних позицій представлено механізм формування мікросмуг зсуву в нанокристалічних і субмікрокристалічних матеріалах. У порівнянні з їх великозернистими аналогами специфіка деформації матеріалів з розміром зерен  $d < 1 \, \mu m$  полягає в тому, що в них джерелами, стоками та перешкодами для руху дислокацій є в основному межі зерен [1-3]

В даному розділі розглянемо процес формування мікросмуг зсуву на початковій стадії пластичної деформації кристалів.

#### 1.1 Явище локалізації пластичної деформації

Макроскопічна деформація металів є однорідною в обмеженому діапазоні параметрів навантаження. При підвищенні швидкості деформації, зменшенні температури, або зменшенні розміру зерна матеріалу спостерігаються різні неоднорідності пластичного перебігу, що проявляються в утворенні областей локалізації пластичної деформації. Впродовж останніх 60 років, достатньо велику кількість робіт присвячено дослідженню феномену локалізації [4].

Неоднорідність високошвидкісної пластичної деформації, що проявляється у формуванні вузьких площин зсуву відома, як адіабатичні смуги зсуву. Це двовимірні, майже плоскі утворення, в яких дві сторони певної площини зміщені відносно один одного, але матеріал при цьому залишається фізично безперервним. Від параметрів процесу навантаження суттєво залежать характеристики смуг зсуву. Ширина даних смуг здебільш становить від десятка до декількох сотень мікрометрів, при тому протяжність смуг може становити кілька міліметрів або навіть сантиметрів. До 90% всієї пластичної деформації матеріалу зазвичай зосереджується у смугах зсуву. Смуги зсуву мають досить складну структуру сильно деформованого матеріалу і при цьому містять всередині себе структури дислокацій і нанокристалічних зерен [5] (рисунок 1.1).



Рисунок 1.1 — Подрібненена зернова структура всередині смуги зсуву [5].

З давніх часів смуги смуги зсуву спостерігались при металургійних процесах і вперше були описані в роботі [6]. У ранніх наукових роботах їх згадували, як білі межі травлення [7], або частіше як "теплові смуги" [8]. Згодом стало зрозуміло, що існують різні видозміни смуг зсуву, які відрізняються один від одного відповідною внутрішньою структурою. Особливо виділяються смуги, що спостерігаються в сплавах, де нагрівання матеріалу приводить до фазових переходів і при травленні такі смуги мають характерний білий колір. Іншим важливим практичним прикладом, де локалізація добре помітна і спостерігається досить давно, є процес пробивання металевих перешкод твердим металевим ударником. У роботі [9] було викладено припущення, що формування смуг зсуву при деформації ударника є небажаним процесом, який слід усувати. Але пізніше [10] було показано, що саме утворення смуг зсуву дозволяє ударнику проникати глибше в матеріал за рахунок зменшення діаметра його переднього кінця а, отже, зменшення опору для руху руху.

У багатьох ранніх роботах при констатації факту утворення смуг зсуву не проводиться обговорення причин їх зародження. Першим важливим у цьому напрямку кроком була робота Холломона і Зенера [7], які мали припустили, що локальне підвищення температури в процесі деформації призводить до знеміцнення матеріалу і саме конкуренція механізмів деформаційного зміцнення і теплового знеміцнення призводить до нестійкого стану пластичного течії і локалізації пластичної деформації. Дану точку зору підтримувало багато авторів і до недавнього часу часто вважалась, як єдино можлива. На сьогоднішній день, механізм і причини формування смуг локалізації, незважаючи на величезну кількість досліджень самого явища, залишаються дискусійними.

Залежність структури смуг зсуву та ступеня локалізації від температури, швидкості деформації і розміру зерна матеріалу є предметом особливо інтенсивних досліджень останніх десятиліть. Особливої актуальності, у зв'язку з розвитком технології отримання та обробки нанокристалічних матеріалів набули дослідження залежності ступеня локалізації від розміру зерна матеріалу [11].

### 1.1.1 Експериментальні дослідження локалізації пластичної деформації

Локалізація пластичної деформації експериментально спостерігається в широкому діапазоні швидкостей деформації і в різних матеріалах (полімери, метали, гірські породи, кераміки, гранульовані речовини та ін.). Особливе місце, обумовлене їх технологічною вагомістю, займають пластичні речовини — полімери і метали. Накопичено велику кількість експериментальних досліджень явища локалізації в сталях [12-14] в сплавах та титані [15, 16], нержавіючих сталях [17, 18], алюмінієвих сплавах [19, 20], цирконії [21], танталі [22] та урані [23]. При цьому смуги зсуву не спостерігалися в чистих алюмінії та міді [24].

Основним підсумком експериментального дослідження локалізації став детальний опис мікроструктури смуг зсуву в різних досліджуваних матеріалах. Усередині смуг зсуву спостерігалися фазові перетворення, рекристалізація, динамічне повернення, аморфізація матеріалу. У сталі 4340 в центрі смуги зсуву спостерігалися нанозерна розмірами 8-20 нм – ймовірно, результат динамічної рекристалізації, але не спостерігалося перетворення мартенситу в аустеніт [5]. Подібні результати були отримані при дослідженні зразків альфа титану [25] та збройової сталі [26].



Рисунок 1.2 — Смуги зсуву при інтенсивній пластичній деформації ультрамілкозернистого [27].

На рисунку 1.2 показаний витравлений зразок, де чітко видно смуга зсуву з чітко визначеною шириною близько 15 мкм. Даний зразок після навантаження полірували, а потім труїли з використанням 5% Нитала, щоб виявити мікроструктуру, де добре видно смуга зсуву. Дві білі лінії додані для того, щоб полегшити ідентифікацію меж смуги зсуву в зразку.

В роботі [28] на рисунок 1.36, спостерігалося зростання, розгалуження смуг і утворення «сіткових» структур, що містять безліч смуг зсуву.

На рисунок 1.3 та 1.4 представлені фотографії смуг зсуву з розміром зерна 268нм в ультрамілкозернистому залізі.





Рисунок 1.3 — Смуга зсуву в ультрамілкозернистому залізі з розміром зерна 268нм (а) при пластичній деформації 0,3% і (б) сітка смуг зсуву при деформації 7,8% [28].

На рисунку 1.3а спостерігається неоднорідна структура матеріалу всередині смуг зсуву.

З рисунків 1.4а та 1.4б видно, що новоутворені смуги можуть розвиватися набагато інтенсивніше, ніж вже існуючі, а також добре помітно розширення вже існуючих смуг зсуву в процесі деформації.



Рисунок 1.4 — Утворення і розгалуження смуг зсуву в ультрамілкозернистому залізі з розміром зерна 268нм при пластичній деформації 3,7% (а) і 7,8% (б) [28]. Матеріал навантажується уздовж вертикальної осі малюнка.

Як видно з попередніх рисунків, зі збільшенням показника деформації від 3,7% до 7,8%, кількість смуг зсуву збільшується.

### 1.1.2 Матеріал та методи дослідження

Дане дослідження виконане з використанням аустенітної корозійнностійкої сталі 03X19H10 з хімічним складом, %: 0.05C—18.2Cr— 8.8Ni—1.65Mn —0.43Si—0.05P—0.04S, інше складає — Fe. Попередня термомеханічна обробка сталі полягала в гарячому куванні і відпалі при 1100°C з подальшим охолодженням у воду. Листову прокатку зразків з вихідним поперечним перерізом  $30 \times 30$  мм<sup>2</sup> проводили при кімнатній температурі до істинних деформацій  $e \approx 0.5$ ; 1; 2; 3. Дані досліди проводили за допомогою растрового та просвітлюючого електронних мікроскопів. Дані мікроскопи оснащувались детекторами реєстрації, які мали змогу фіксувати відбиторозсіяні електрони. Структурні дослідження проводили в поздовжньому

перерізі (перпендикулярному поперечному напрямку прокатки) катаних зразків. Розмір кристалітів (зерен/субзерен) рахували на зображеннях, отриманих за допомогою просвітлювального електронного мікроскопа за допомогою методу випадкових січних в напрямку перпендикулярному, до напрямку прокатки. Після цього, за допомогою отриманих карт та програмного забезпечення були побудовані функції розподілу.

В результаті попередньої обробки матеріалу була отримана вихідна мікроструктура із середнім розміром зерен 21 мкм [55, 56]. На рисунку 1.5 показана мікроструктура аустенітної корозійностійкої сталі 03Х19Н10 після холодної прокатки. В процесі холодної прокатки до відносно невеликої істинної деформації e = 0.5 відбувається витягування вихідних аустенітних зерен уздовж напрямку прокатки, а всередині зерен формується сітка з субзеренних малокутових границь (рисунок. 1.5 а). Поява розорієнтованих субструктур пов'язано з відмінністю діючих систем ковзання в різних ділянках вихідних Також на ранніх стадіях пластичної деформації зерен. розвиваються деформаційне двійникування і мартенситне перетворення. Двійникування додаткової фрагментації аустенітних зерен за рахунок призводить ДО формування когерентних меж Σ3 з кутом розорієнтування близько 60°. Мартенситне перетворення призводить до формування двофазної структури, що складається з аустенітних і мартенситних зерен (рисунок. 1.5 в). Подальша холодна прокатка до істинної деформації е = 2 призводить до додаткової фрагментації і формування ультрамілкозернистої структури (рисунок. 1.5 б, г), а частка мартенситних зерен збільшилася до 0.65. Утворення мартенситу деформації також сприяє фрагментації структури за рахунок формування міжфазних  $\gamma/\alpha'$ -границь (рисунок. 1.5 г).



Рисунок 1.5 — Мікроструктура (а, б) і фазовий склад (в, г) аустенітної корозійностійкої сталі 03Х19Н10 після холодної прокатки до значення істинних деформацій *e* = 0.5 (а, в) і *e* = 2 (б, г).

Тонка структура аустенітної сталі 03Х19Н10 після холодної прокатки до різних істинних деформацій показана на рисунку 1.6. З рисунка 1.6а видно, що на початкових стадіях холодної деформації в аустенітних зернах формується висока щільність деформаційних двійників з площиною двійникування  $\{111\}$ , які виглядають як тонкі пластини товщиною близько 50 нм. Варто відзначити, що практично весь об'єм зерна заповнений нанодвійниковою структурою. У кожному зерні діє тільки одна система двійникування. Таким чином, вихідні аустенітні зерна розміром 21 мкм фрагментуються на пластини товщиною 50 нм. які поділяються когерентними двійниковими межами  $\Sigma$ 3.





Рисунок 1.6 — Тонка структура аустенітної корозійностійкої сталі 03Х19Н10 після холодної прокатки з істинними значеннями деформації (a) e = 0.5, (б) e = 1, (в) e = 2 i (г) e = 3. Окружності відповідають зонам, з яких отримані картини мікро-дифракції.

Оскільки в сталі 03Х19Н10 вторинне двійникування не розвивається, то можливість пластичної деформації за механізмом двійникування вичерпується. При значенні деформації е = 1 локалізація пластичного перебігу відбувається у вигляді утворення мікросмуг зсуву [29, 30]. Мікросмуги зсуву до напрямку прокатки в комірках нанодвійників формуються під кутом 30° на рисунку 1.6 б. Мікросмуги зсуву та їх перетини є переважними місцями зародження мартенситу деформації, їх поява сприяє зростанню частки мартенситу при

проміжних значеннях деформації, а локалізація пластичного перебігу в мікрополосах зсуву сприяє додатковій фрагментації структури. Таким чином, зсуву складаються з  $\gamma/\alpha'$ -кристалітів, які мікросмуги чергуються 3 поперечними розмірами 100 нм. В процесі подальшої холодної прокатки до великої істинної деформації при значеннях е = 2 та е = 3, границі між кристалітами стають більш тонкими, розорієнтування границь смуг зсуву а розорієнтування спеціальних збільшується, границь, які стають некогерентними, сильно відхиляється від 60.4°, про що свідчать кільцеві електронограми на рисунку 1.6 в, г. В результаті утворення мікросмуг зсуву і кристалів мартенситу деформації відбувається перехід від двомірної двійникової наноструктури до тривимірної структурі змішаного типу. Холодна прокатка зі значенням е = 3, призводить до формування структури, що складається з сильно витягнутих уздовж напрямку прокатки нанокристалітів аустеніту і мартенситу з поперечним розміром близько 80 нм.

### 1.2 Причини зародження смуг зсуву

Смуги зсуву можуть виникати як результат геометричних ефектів, особливостей механічних властивостей матеріалу або як комбінація цих двох випадків. Експерименти і чисельне моделювання деформації стовпчастих зразків алюмінію показали [31], що мікроскопічна локалізація в окремих випадках зароджується на потрійних стиках або уздовж границь зерен орієнтованих під кутом 45 градусів до осі навантаження, але смуги зсуву можуть формуватися і в областях вільних від концентраторів напруг. Дослідження [32, 33] демонструють, що смуги зсуву зароджуються і починають розвиватись вздовж ліній максимальних зсувних напруг, що відповідає дислокаційно-структурному погляду на походження локалізації [34]. У процесі подальшого зростання, внаслідок великих пластичних деформацій, реальна траєкторія зростання смуги сильно відхиляється від початкової орієнтації ліній зсуву.

При локальному збільшенні швидкості деформації, умови деформування змінюються з ізотермічних на квазіадіабатичні і напруги течії починають зменшуватися. Конкуренція між механізмами деформаційного зміцнення і матеріалу повинна теплового знемішнення призводити ЛО локалізації деформації. У разі простого плоского зсуву металевої пластини можна теоретично показати, що на першій стадії зародження смуг локалізації може бути описано лінійною нестійкістю типу Хадамарда і сама умова зародження смуг визначається швидкістю зростання амплітуди збурень в процесі деформації. На другій стадії нестійкість Хадамара взаємодіє з нелінійними особливостями задачі, призводить ЩО до формування когерентного зсуву. Це локалізованого стану асоційованого зі смугою теоретична інтерпретація класичного підходу до проблеми локалізації зсуву, який полягає в адіабатичних ЗСУВУ внаслідок утворенні СМУГ локального теплового знеміцнення матеріалу.

З точки зору структурного підходу, локалізація пластичної деформації є природним розвитком процесу мінімізації енергії системи за рахунок формування різних дефектник підструктур.

У роботі [35] зазначається, що скупчення дислокацій можуть призводити до локального підвищення температури – "гарячі плями", які можуть стати зародками майбутніх смуг зсуву (рисунок 1.7). Автори роботи [36] використовуючи аналогію між тріщинами і смугами зсуву за допомогою спеціальної експериментальної техніки показали, що для зародження смуги зсуву необхідне утворення "гарячої плями" розміром більше 0.1 міліметра, що є досить великою неоднорідністю.



Рисунок 1.7 — Формування "гарячої плями", що зародилась на кінці тріщини в мартенситной сталі, в смугу зсуву [36].

### 1.3 Дислокаційний механізм наноміцності та пластичності

### 1.3.1 Співвідношення Холла-Петча

Вивченню механічних властивостей наноструктур присвячені сотні робіт. Багато з них були спрямовані на з'ясування застосовності для наноматеріалів відомого співвідношення Холла-Петч (ХП), що зв'язує межу текучості ( $\sigma_y$ ) і твердість (*H*) для полікристалічних матеріалів з величиною зерна (*d*).

$$\sigma_{\nu}(d) = \sigma_0 + K_{\nu} d^{-1/2}, \ H = H_0 + K_H d^{-1/2}.$$
(1.1)

де  $K_H$  та  $K_y$  – коефіцієнти Хола-Петча, передбачається, що параметри  $\sigma_0$  і  $H_0$  відповідають межі текучості і твердості монокристалла. Зараз існують дві основні точки зору на механізм виникнення співвідношень (1.1).

Згідно з першою з них, сформульованою на початковому етапі розробки теорії міцності кристалічних тіл, дислокаційної підвищена міцність полікристалів і виникнення співвідношень (1.1) обумовлені естафетним механізмом передачі ковзання від одного зерна до іншого. Межі зерен виступають при цьому в якості бар'єрів для плоских скупчень дислокацій, що викликають концентрацію напружень і активацію дислокаційних джерел в сусідніх зернах. Таким чином, естафетний механізм претендує на пояснення Холла-Петча закону на початковому етапі пластичної деформації полікристалічного агрегату, на межі його текучості. В якості такого звичайного вибирають напругу  $\sigma_{0.2}$ , що відповідає величині пластичної деформації  $\varepsilon =$ 0.2%.

Подальші експерименти [38] показали, що закон Холла-Петча (1.1) виконується і для напруг ( $\sigma$ ), що значно перевищують межу текучості. При цьому знайдено, що коефіцієнт ( $K_{H-P} = \partial \sigma / \partial (d^{-1/2})$  є зростаючою функцією ступеня деформації (рисунок 1.8), але може і знижуватися з ростом величини деформації (рисунок 1.9, крива 2).



Рисунок 1.8 – Зміна коефіцієнта Холла-Петча в полікристалічному Al 99.98% з деформацією є і температурою T в координатах  $K_{H-P} - \varepsilon^{1/2}$ . Експериментальні точки – згідно роботи [38].



Рисунок 1.9 – Залежність коефіцієнта Холла-Петч в полікристалічних Al 99.98% та Al 99.98% від деформації є в координатах  $K_{H-P}/\mu b^{1/2} - \varepsilon$ . ( $\mu$  модуль зсуву, *b* - вектор Бюргерса). Експериментальні точки – згідно роботи [39].

Для пояснення цих фактів у роботі [68] запропоновано інший фізичний механізм для пояснення появи співвідношень (1.1). Згідно з ним, в полікристалі при даному ступені деформації накопичується (акумулюється) значно більше дислокацій, ніж в монокристалічному зразку, з огляду на те, що довжина вільного пробігу дислокацій в полікристалі обмежена розміром зерен. Крім того, межі зерен є джерелом дислокацій. З експерименту в роботі [41] стає зрозуміло, що щільність дислокацій в полікристалічному матеріалі при даному ступені деформації тим більше, чим менше розмір кристалітів. В результаті цього полікристалічний агрегат має більш високу міцність і твердість, ніж монокристалічний зразок.

Співвідношення Холла-Петч виконується в широкому діапазоні розмірів зерен, наприклад, в разі мікротвердості полікристалічних  $\alpha$ -*Fe* та *Ti* від 0.2 до 100  $\mu$ m. Що стосується нанокрісталіческого заліза, то в [42] з'ясовано, що в

інтервалі розмірів нанозерен від 60 до 10 нм його мікротердость підпорядковується співвідношенню (1.1). Аналогічні результати були отримані і для полі- і нанокристалічної міді, а також для інших нанокристалічних металів і сплавів.

В процесі цих досліджень була виявлена і привернула до себе велику увагу особливість пластичної деформації нанокристалічних матеріалів, а саме порушення співвідношення Холла-Петча в них, коли розмір зерен стає менше деякого критичного значення  $d_c \approx 10 - 15$  нм, при досягненні якого межа текучості і твердість наноматеріалів починають знижуватися зі зменшенням розмірів кристалітів . Це порушення в металевих наноматеріалах спостерігається при кімнатній температурі, тобто при температурах порядку (0.2—0.3) $T_m$ . Раніше відхилення від закону Холла-Петча аналогічного характеру з негативними значеннями коефіцієнтів Холла-Петча були зафіксовані в мікрокристалічних металевих і керамічних матеріалах при температурах (0.4—0.5) $T_m$  і ( $d_c \approx 1 - 10 \ \mu m$ ).

### 1.3.2 Аналіз напружень течії нанокристалічних металів

Дислокаційно-кінетичний підхід до проблеми деформації наноматеріалів, передбачає наявність у нанокристалічних металів деформаційного зміцнення, як і в разі більш крупнозернистих зразків, обумовлени[ взаємодією дислокацій один з одним.

На рисунку 1.1а та б представлені криві, які побудовані в припущенні того, що при розмірах зерен d < 10 нм спостерігається зерногрничне знеміцнення, яке поєднане з анігіляцією крайових дислокацій в межах нанозерен.

Щільність дислокацій  $\rho$  у нанокристалічному матеріалі змінюється з деформацією зсуву  $\gamma$  відповідно до кінетичного рівняння [43]:

$$\frac{d\rho}{d\gamma} = \frac{\beta}{bd} - (k_a + k_b)\rho, \qquad (1.2)$$

$$k_b = 4\eta_b \frac{D_{gb}}{m_T \dot{\mathcal{E}}} = \left(\frac{d_b}{d}\right)^2, \quad d_b = \left(\frac{4\eta_b D_{gb}}{m_T \dot{\mathcal{E}}}\right)^{1/2}.$$

 $\beta$  – коефіцієнт, що визначає інтенсивність накопичення дислокацій в об'ємі зерен внаслідок обмеження довжини вільного пробігу дислокацій розміром зерна ( $\beta \approx 1$ ),  $d_b = d_b(T, \dot{\varepsilon})$  – типовий розмір нанозерен, унаслідок зернограничного знеміцнення наноматеріалу,  $D_{gb} = D_{gb}(T)$  – параметр зернограничної дифузії, b – вектор Бюргерса,  $k_a$  – коефіцієнт анігіляції гвинтових дислокацій, T – температура,  $k_b$  – коефіцієнт анігіляції крайових дислокацій,  $\eta_b \approx \mu b^3/k_BT$ ,  $k_B$  – стала Больцмана,  $\dot{\gamma}$  та  $\dot{\varepsilon} = \dot{\gamma}/m_T$  та – швидкості відповідно зсувної та одноосної,  $\mu$  – модуль зсуву,  $m_T = 3,05$  – фактор Тейлора.

Проінтегрувавши рівняння (1.2), отримуємо залежність щільності дислокації від степені одноосної деформації  $\varepsilon = \gamma/m_T$  в наноматеріалі:

$$\rho(\varepsilon) = \rho_0 \exp(-m_T k\varepsilon) + \rho_m [1 - \exp(-m_T k\varepsilon)], \qquad (1.3)$$

де  $\rho_0 = \beta_0/bd$  – початкова ( $\varepsilon = 0$ ) щільність дислокацій внаслідок їх генерації з границь зерен [44],  $k = k_a + k_b$ ,  $p_m = \beta/bdk$  – показник рівноважної щільності дислокацій,  $\beta_0$  – коефіцієнт, який залежить від щільності сходинок в границях, ( $\varepsilon \to \infty$ ). Враховуючи співвідношення Тейлора,  $\tau = \alpha \mu b \rho^{1/2}$  та рівняння (1.3), залежність напруги течії НК-матеріала  $\sigma = m_T \tau$ від деформації  $\varepsilon$  описується наступним виразом

$$\sigma(\varepsilon) = m_T \alpha \mu b \{ \rho_0 \exp(-m_T k \varepsilon) + \rho_m [1 - \exp(-m_T k \varepsilon)] \}^{1/2}, \qquad (1.4)$$

 $\alpha$  — постійна взаємодії дислокацій. Так як  $\rho_0 \sim \rho_m \sim d^{-1}$ , то рівнянню (1.4) можна надати вигляду

$$\sigma(\varepsilon) = m_T \alpha \mu \left(\frac{b}{d}\right)^{1/2} \left\{ \beta_0 \exp(-m_T k\varepsilon) + \frac{\beta}{k} \left[1 - exp(-m_T k\varepsilon)\right] \right\}^{1/2}.$$
 (1.5)

Результати комп'ютерного моделювання [45] та електронномікроскопічних опрацювань [46] пластичної деформації нанокристалічних металів, демонструють, що границі зерен є: 1) джерелами дислокацій, 2) бар'єрами, що сприяють накопиченню всередині нанозерен дислокацій, та 3) стоками дислокацій. Дані кінетичні процеси враховують рівняння (1.2) і (1.3) для щільності дислокацій та рівняння (1.4) і (1.5) для напруження течії. Інтенсивність перших двох кінетичних процесів визначають параметри  $\beta$  та  $\beta_0$ , тим часом  $k = k_a + k_b(d, T, \dot{c})$  коефіцієнт анігіляції дислокацій, залежить від температури, розміру зерен та швидкості деформації (1.2) і контролює ефективність границь зерен, як стоків для решіткових дислокацій. Результати комп'ютерного моделювання [47] і експерименти [48], підтверджують, що щільність дислокацій всередині нанозерен і напруги течії нанокристалічних металів тим менше, чим менше розмір зерна, вище температура і нижче швидкість деформації. Ттобто більше, згідно (1.2), коефіцієнт анігіляції дислокацій  $k_h$ .

3 рівняння (1.5) при розмірах зерен  $d \gg (m_T \varepsilon_y)^{\frac{1}{2}} d_b \approx 14$  нм та значеннях параметрів  $m_T k_b \varepsilon_y \ll 1$  та  $k_a = 0$ , утворюється співвідношення Холла-Петча  $H = K_{HP} d^{-1/2}$ , яке описує ефект зернограничного зміцнення полікристалічного матеріалу, звідси, коефіцієнт Холла-Петча для мікротвердості —  $K_{HP} = 3m_T \alpha \mu b^{\frac{1}{2}} (\beta_0 + m_T \beta \varepsilon_y)^{\frac{1}{2}}$ .

### 1.4 Мікросмуги зсуву

В роботах [49, 50] втсановлено, що пластична деформація зразків нанокристалічного заліза протікає неоднорідно, як результат відбувається

утворенням мікросмуг зсуву ширина яких  $w \approx 60d$ , величиною зсуву в смугах 200–300% та середнім значенням відстані між смугами  $\Lambda \approx (2 - 10)w$ . В такому випадку, неоднорідність даної деформації можна спостерігати, якщо значення розміру зерен має значення менше деякого порогового значення  $d_c$ .

Характерною особливістю пластичної деформації НК-матеріалів є роль меж зерен як стоків, джерел та бар'єрів для дислокацій. Формування регулярної системи мікросмуг, споріднено з просторовим процесом самоорганізації дислокацій. Ці умови для щільності дислокацій, враховує кінетичне рівняння виду [51]

$$\rho \frac{\partial \rho(x, y, \gamma)}{\partial \gamma} + (\xi - 1) \frac{\lambda_D}{b} \left( \frac{\partial^2 \rho}{\partial y^2} + \frac{M}{\rho} \left( \frac{\partial \rho}{\partial \gamma} \right)^2 \right) = \\ = \left( 1 - \beta_{gb} \right) \frac{n}{b} + \frac{\beta}{bd} \rho - k_a \rho^2 .$$
(1.6)

де x – координата в напрямку видовження мікросмуг,  $\lambda_D \approx d$  – відстань дифузійного проходу дислокацій при розширенні мікросмуги, y – координата в напрямку поширення смуг,  $\xi > 1$  – параметр, що забезпечує просторову нестійкість розподілу щільності дислокацій (нестійкість Тюринга), m(d) – коефіцієнт швидкісної чутливості напруги течії, M = 1/m(d) – коефіцієнт, що враховує дисперсію швидкості дислокацій в наслідок її залежності від щільності дислокацій. В рівнянні (1.7) перший член в правый частини описує баланс стоків  $n_g = \beta_{gb}n$  та щільності джерел  $n = (sl_bd)^{-1}$  дислокацій в межах зерен, де  $l_b^{-1}$  – показник лінійної щільність джерел в границях зерен,  $s \approx 2b$  – ширина границь зерен,  $\beta_{gb} = n_g/n$  – параметр, що характеризує відносну ефективність границь зерен як стоків та джерел дислокацій. У другому доданку відображено процес накопичення дислокацій всередині нанозерен через обмеження їх вільного пробігу величиною зерна ( $\beta \approx 1$ ), у третьому доданку враховано анігіляцію гвинтових складових дислокаційних петель. Оскільки швидкість подовження мікросмуг значно вище швидкості їх розширення, то замість двомірної задачі розглянемо одномірний варіант,  $\rho = \rho(y, \gamma)$ . Розв'язок нелінійного рівняння (1.6) можна шукати у вигляді  $\rho = v(\gamma)\psi(y)/bd$ , де

$$\nu(\gamma) = \beta_0 \exp(k_a \gamma) + \frac{\beta}{k_a} (1 - \exp(-k_a \gamma)).$$
(1.7)

за допомогою рівняння (1.7) в нанокристалічному металі, можна описати деформаційну складову росту щільності дислокацій. Після підстановки рівняння (1.7) в (1.6) та поділу змінних у та  $\gamma$ , для просторової компоненти щільності дислокацій  $\psi(y)$ , отримуємо рівняння:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial Y^2} + \frac{M}{\psi} \left( \frac{\partial \psi}{\partial Y} \right)^2 = \left( 1 - \beta_{gb} \right) \frac{d}{v_0(\gamma) d_0} + \psi - \psi^2 \,. \tag{1.8}$$

де 
$$Y = y/\Lambda_0$$
,  $\Lambda_0(d) = [(\xi - 1)\lambda_D d/\beta]^{1/2} \sim d, d_0 = \beta^2 s l_b/b k_a$ 

Рівняння (1.8) містить в правій частині функцію  $\nu_0(\gamma) = \left(\frac{k_a}{\beta}\right)\nu(\gamma)$ , яка не сильно відрізняється від одиниці при  $\beta_0 \approx \beta/k_a$ , тож рівняння (1.7) і (1.8) можна вважати практично розділеними по зінним у та  $\gamma$ .

При значенні  $\beta_{gb} > 1$  та граничній умові  $d\psi/dY|_{\psi=0} = 0$ , розв'язок рівняння (1.8) являється  $F(\theta, k)$  еліптичний інтеграл першого роду [51]. Спираючишь на вищесказане, розв'язок рівняння можна записати у більш компактному вигляді користуючись еліптичною функцією Якобі sn(y),

$$\psi(y,d) = \frac{\psi_0(d)}{1 - k^2 s n^2(y/\Lambda(d))},$$
(1.9)

де k = k(d) – еліптичний інтегральний модуль,  $\Lambda(d)$  та  $\psi_0(d)$  – відповідно відстань між мікросмугами та безрозмірна щільність дислокацій між ними. На рисунку 1.10а, б можемо спостерігати розподіл густини дислокацій в нанокристалічному металі,  $\rho = (y, \gamma, d) = (1/bd) v(\gamma) \psi(\gamma, d)$ , згідно 3 рівняннями (1.8) та (1.9) при  $\gamma \to \infty$  в координатах  $\rho/\rho_m - y/\Lambda$  та відмінних розмірах зерен d, де критичний розмір нанозерен  $-\rho_m = \beta/bd_ck_a$ ,  $d_c =$  $3\beta^3 s l_b / 16 (\beta_{gb} - 1) b k_a^2$ , при перевищенні значення котрого мікросмуги не формуються [51]. З рівнянь (1.9) та (1.8) слідує, що розмір зерен дорівнює деякому критичному параметру  $d = d_c$ , k(d) = 0 і в нанокристалічному матеріалі щільність дислокацій розподілена однорідно,  $\rho(y, d_c) = (1/2)\rho_m$ , (з рисунка 1.10а). На рисунку 1.10б, розподіл щільністі дислокацій не є рівномірним при розмірах нанозерен  $d < d_c$ , при цьому утворюючи мікросмуги з високою щільністю дислокацій. Зі зменшенням розміру зерна, спостегігається  $\rho_{\rm max} \sim 1/d$  збільшення максимальної щільності дислокацій в смугах. При цьому, на рівні залишається щільність дислокацій між смугами, пунктирною лінією, (рисунок 1.36)  $\rho(y, d_c) = (1/2)\rho_m$ .

На рисунок 1.10в представлено залежності ширини мікросмуг зсуву *w* від величини нанозерен в НК-залізі, експерементальні дані роботи [52]. Крива на цьому рисунку, при  $d_c = 350$  нм [51] ілюструє залежність відповідно до рівняння (1.10). Ширина смуг при критичному значенні нанкристалічного зерна  $d = d_c$  стає нескінченно великою, а значення щільності дислокацій в нанозернах залишається незмінним (1/2) $\rho_m$ .

З точки зору дислокаційної кінетики, просторова нестійкість пластичної деформації НК-металів у вигляді мікросмуг зсуву утворюється при певній кількості співвідношень між щільністю стоків та джерел дислокацій в границях зерен, їх акумуляцією та анігіляцією в об'ємі нанозерен. Рентгенівські промені при розмірі зерен d = 2-3 нм фіксують безперервні дифузні кільця Ni–W в сплаві і лише високоякісні електронні мікроскопи можуть встановити наявність границь у нанозернах такого розміру.



Рисунок 1.10 – Розподіл щільності дислокацій  $\rho$  в нанокристалічному металі згідно з співвідношенням (1.9), при різних розмірностях нанозерен: (a)  $d = d_c$ , (б)  $d = 0.9d_c$  (1),  $d = 0.5d_c$  (2),  $d = 0.2d_c$  (3),  $d = 0.1d_c$  (4), (в) залежність ширини смуг *w* в нанокристалічному Fe від розміру нанозерен [52].

# РОЗДІЛ 2 САМООРГАНІЗАЦІЯ ДИСЛОКАЦІЙ У НАНОКРИСТАЛІЧНИХ МЕТАЛАХ

2.1 Синергетична система рівнянь

З мікроскопічної точки зору пластична деформація кристалів є результатом руху лінійних дефектів-дислокацій, а в більш загальному випадку - дислокацій і дисклінацій. Перші з них є межами областей кристала, де стався трансляційний зсув однієї частини кристала відносно іншої на вектор Бюргерса, другі - межами областей, де стався пластичний поворот однієї частини кристала відносно іншої на вектор Франка. Так, в процесі деформації нанокристалічного заліза, в роботах [2, 3], автори спостерігали формування системи мікросмуг зсуву, між тим, ширина яких *w* збільшувалася зі збільшенням середнього розміру нанозерен *d* і на порядок перевищувала, *w* ≈ 60*d*.

Локалізоване формування смуг зсуву зафіксовано в нанокристалічному никелю, паладію, субмікрокристалічному алюмінієвому сплаві та міді. З представлених даних в роботах [2, 3] слідує, що мікрополоси є місцями сильної локалізації деформації, в яких деформація зсуву досягає 200–300%.

Смуги орієнтовані в напрямку дії максимальних дотичних напружень, прикладених до матеріалу. З ростом ступеня деформації збільшуються як число смуг, так і їх ширина. В результаті вони утворюють просторово-регулярну структуру.

Середня відстань в НК-Fe між мікросмугами  $\Lambda \approx (2 - 10)w$  має значення в декілька десятків мікрон. У разі великих розмірів зерен, деформація матеріалу протікає рівномірно, однорідно, охоплюючи всі зерна та не локалізуючись у вигляді мікросмуг.

Процес самоорганізації дислокацій є переважаючим у формування мікросмуг зсуву. Найпростішим для опису процесів самоорганізації є синергетична трипараметрична модель, яка визначається рівняннями для швидкості зміни параметра порядку, керуючого параметра та спряженого поля. У випадку утворення мікросмуг зсуву та процесу просторової самоорганізації дислокацій, провідним параметром, що відокремлює стан системи є щільність дислокацій.

Таким чином, розглянемо відносну щільність дислокацій, яка набуває нульового значення в звичайяному стані, а для стану утворення мікросмуг зсуву, набуває не нульове значення. Як відомо з експериментальних даних, при великих значеннях щільності дислокацій формуються мікросмуги зсуву. Рівняння еволюції середньої щільності дислокацій  $\rho$  у нанометалі представимо у вигляді спрощеного рівняння Свіфта-Хоенберга, яке у правій частині містить дислокаційні процеси властиві для нанозеренних структур.

У якості керуючого пареметра та спряженого поля використаємо щільність границь зерен та швидкість руху дислокацій відповідно. В результаті, перехід до стану утворення мікросмуг зсуву описує наступна систему рівнянь самоорганізації

$$\left( \frac{\partial \rho}{\partial t} = -\frac{\rho}{\tau_{\rho}} + \frac{\beta}{d} u\rho - h_a u\rho^2 + \left(1 - \beta_{gb}\right) nu;$$
 (2.1)

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} = -\frac{u}{\tau_u} + a_1 \rho n; \tag{2.2} \end{cases}$$

$$\left(\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{n_e - n}{\tau_n} - a_2 \rho u;\right)$$
(2.3)

*t* – час;

 $\rho$  – щільність дислокацій;

*n* – щільність границь зерен;

d – розмір зерен;

и – швидкість дислокацій;

*h<sub>a</sub>* – відстань анігіляції гвинтових дислокацій в мікросмузі механізмом поперечного ковзання;

 $a_1, a_2 > 0$  – константи нелінійного зворотнього зв'язку.

 $\tau_{\rho}, \tau_{u}, \tau_{n}$  – час релаксації щільності та швидкості дислокацій і щільності границь зерен відповідно.

Як видно з рівняння (2.1), у правій частині перший доданок в автономному режимі описує процес релаксації відносної щільності дислокацій, другий доданок відображає процес накопичення внутрішніх дислокацій в нанокристалічних зернах із-за обмеження довжини їх вільного пробігу розміром зерна ( $\beta \approx 1$ ), в третьому доданоку враховується анігіляція гвинтових компонент дислокаційних петель, четвертий член описує баланс об'ємних густин стоків  $\beta_{ab}n$  та витоків *n* дислокацій в границях зерен.

У рівнянні (2.2) швидкість зміни спряженого поля (прискорення руху дислокацій) задається релаксаційною складовою з відповідним часом релаксації  $\tau_u$  та позитивним зворотнім зв'язком щільності дислокацій зі щільністю меж зерен ( $a_1$  – позитивна константа зв'язку). Саме цей позитивний зв'язок між щільностями дислокацій та меж зерен і є причиною самоорганізації.

На відміну від попередніх рівнянь, рівняння (2.3) задає швидкість зміни щільності меж зерен. При цьому, в правій частині релаксаційний доданок описує зміну щільності меж зерен, яке прямує не до нуля, а до рівноважного значення  $n_e$ , яке задається зовнішніми умовами. В правій частині рівняння (2.3), другий доданок задається негативним зворотнім зв'язком швидкості та щільності дислокацій зі швидкістю зміни щільності меж зерен.

### 2.2 Безрозмірна система рівнянь

Аналітичний розв'язок системи рівнянь (2.1)-(2.3) отримати неможливо. Крім того, велика кількість констант ускладнює аналіз цих рівнянь. Для того щоб скоротити дану чисельність необхідно проаналізувати безрозмірну систему. В такому разі введемо для основних параметрів системи: швидкості дислокацій, часу, щільності та щільності меж зерен, деякі масштаби відповідно  $u_m t_m$ ,  $\rho_m$  та  $n_m$ . При всьому цьому безрозмірні параметри представимо в наступному вигляді

$$x = \frac{\rho}{\rho_m}; \ y = \frac{u}{u_m}; \ z = \frac{n}{n_m}; \ t' = \frac{t}{t_m}; \ z_e = \frac{n_e}{n_m}$$

Приймемо початкові параметри

$$t = t't_m; \ \rho = x\rho_m; \ u = yu_m; \ n = zn_m.$$

З метою подальшого аналізу, а також спрощення рівняння (2.1) слід підставити вищезазначені параметри *t*, *ρ*, *u*, *n*:

$$\frac{\partial x \rho_m}{\partial t' t_m} = -\frac{x \rho_m}{\tau_\rho} + \frac{\beta}{d} y u_m x \rho_m - h_a y u_a x^2 \rho_m^2 + (1 - \beta_{gb}) z n_m y u_m y u$$

Розділимо попередній вираз на  $\frac{\tau_{\rho}}{\rho_m}$ , і в результаті перетворень, отримаємо формулу (2.4)

$$\frac{\tau_{\rho}}{t_{m}}\frac{\partial x}{\partial t'} = -x + \frac{\beta}{d}\tau_{\rho}u_{m}xy - h_{a}u_{m}\rho_{m}\tau_{\rho}yx^{2}$$
$$+ (1 - \beta_{gb})\frac{n_{m}}{\rho_{m}}\tau_{\rho}u_{m}yz; \qquad (2.4)$$

Так як масштаби для основних змінних можемо прийняти зручним для нас чином, то орієнтуючись на розмірність змінних запишемо дві умови

$$\frac{\tau_{\rho}}{t_m} = 1;$$

$$\frac{\beta}{d}\tau_{\rho}u_{m}=1;$$

Також введемо два допоміжні позначення

$$h_a u_m \rho_m \tau_\rho = A;$$
$$\frac{n_m}{\rho_m} \tau_\rho u_m = B.$$

Таким чином, ми маємо визначення масштабу часу, що збігається з часом релаксації щільності зміщення.

$$t_m = \tau_\rho. \tag{2.5}$$

В результаті знерозмірювання рівняння (2.1), кінцева рівність приймає вигляду

$$\frac{\partial x}{\partial t'} = -x + xy - Ayx^2 + (1 - \beta_{gb})Byz.$$

Приймемо до розгляду рівняння (2.2) первинної системи і зробимо його безрозмірним. Для цього робимо заміну, аналогічно попередньому випадку

$$\frac{\partial yu_m}{\partial t't_m} = -\frac{yu_m}{\tau_u} + a_1 x \rho_m z n_m.$$

Розділимо попереднє рівняння на  $(\frac{\tau_u}{u_m})$ , в результаті спрощення, отримуємо наступне

$$\frac{\tau_u}{t_m}\frac{\partial y}{\partial t'} = -y + \frac{\tau_u}{u_m}a_1\rho_m n_m xz;$$

Приймаючи до уваги розмірність, прирівняємо константі вираз  $\frac{\tau_u}{u_m}a_1\rho_m n_m = 1$ , після чого, масштаби швидкості руху дислокацій, щільностей границь зерен та дислокацій пов'язані співвідношенням

$$u_m = \tau_u a_1 \rho_m n_m; \tag{2.6}$$

Приймемо параметр, який відповідає відношенню часів релаксації швидкості руху та щільності дислокацій

$$\frac{\tau_u}{t_m} = \frac{\tau_u}{\tau_\rho} = \delta .$$
(2.7)

Рівняння (2.2) початкової системи в результаті знерозмірювання набуває вигляду

$$\delta \frac{\partial y}{\partial t'} = -y + xz.$$

Проаналізуємо рівняння (2.3) початкової системи та знерозміримо його. Візьмемо до уваги, що аналогічна попереднім випадкам підстановка, приводить до наступного рівняння

$$\frac{\partial z n_m}{\partial t' t_m} = \frac{(z_e - z) n_m}{\tau_n} - a_2 x \rho_m y u_m.$$

Дане рівняння розділимо на  $\frac{\tau_n}{n_m}$ , в результаті спрощень отримаємо

$$\frac{\tau_n}{t_m}\frac{\partial t}{\partial t'} = z_e - z - \frac{\tau_n a_2 \rho_m u_m}{n_m} xy.$$

3 точки зору розмірності приймемо, що  $\frac{\tau_n a_2 \rho_m u_m}{n_m} = 1$ ,

$$n_m = \tau_n a_2 \rho_m u_m; \tag{2.8}$$

Параметр, що відповідає відношенню дислокацій щільності меж зерен та часів релаксації, набуває вигляду

$$\frac{\tau_n}{t_m} = \frac{\tau_n}{\tau_\rho} = \sigma;$$

При цьому з рівняння (2.4) слідує, що

$$u_m \frac{\beta \tau_\rho}{d} = 1; \tag{2.9}$$

для швидкості руху дислокацій з рівняння (2.9) виразимо масштаб

$$u_m = \frac{d}{\beta \tau_\rho}; \tag{2.10}$$

Знайдемо для інших масштабів явні вирази. Для цього скористаємось співвідношенням

$$u_m = \tau_u a_1 \rho_m n_m;$$
  
$$n_m = \tau_n a_2 \rho_m u_m.$$

Використаємо співвідношення розділивши  $u_m$  на  $n_m$  та запишемо новоутворену рівність

$$\frac{u_m}{n_m} = \frac{\tau_u a_1 n_m}{\tau_n a_2 u_m}.$$

Розділивши на параметр  $n_m$  попередню рівність, отримаємо

$$u_m^2 = \frac{\tau_u a_1 n_m^2}{\tau_n a_2}.$$

Звідси випливає

$$u_m = \sqrt{\frac{\tau_u a_1}{\tau_n a_2}} n_m;$$

Підставимо в отриманий вираз формулу (2.10)

$$\frac{d}{\beta\tau_{\rho}} = \sqrt{\frac{\tau_u a_1}{\tau_n a_2}} n_m;$$

Через константи системи рівнянь (2.1)-(2.3), виразимо масштаб для щільності границь зерен

$$n_m = \frac{d}{\beta \tau_\rho} \sqrt{\frac{\tau_n a_2}{\tau_u a_1}};$$

Таким чином, для масштабу густини дислокацій отримаємо наступне,

$$\rho_m = (\tau_u a_1 \tau_n a_2)^{-\frac{1}{2}}.$$

Як результат, форма безрозмірної системи рівнянь (2.1)-(2.3) приймає вигляд

$$\left(\frac{\partial x}{\partial t'} = -x + xy - Ayx^2 + \left(1 - \beta_{gb}\right)Byz;$$
(2.11)

$$\begin{cases} \delta \frac{\partial y}{\partial t'} = -y + xz;\\ \frac{\partial z}{\partial z} \end{cases}$$
(2.12)

$$\left(\sigma \frac{\partial z}{\partial t'} = z_e - z - xy.\right)$$
(2.13)

2.3 Адіабатичне наближення

Так як аналітичного розв'язку система рівнянь (2.11)-(2.13) не має, то використаємо наближенням

$$\tau_{
ho} \gg \tau_n, \tau_u \to \sigma, \delta \approx 0,$$

яке означає, що щільність меж зерен та швидкість руху дислокацій змінюються набагато стрімкіше ніж щільність дислокацій. Таким чином, ліві частини рівнянь (2.12), (2.13) прирівняємо до нуля, так як  $\delta, \sigma \approx 0$ 

$$\begin{cases} \frac{\partial x}{\partial t'} = -x + xy - Ayx^2 + (1 - \beta_{gb})Byz; \quad (2.14) \end{cases}$$

$$0 = -y + xz;$$
 (2.15)

$$(0 = z_e - z - xy.$$
 (2.16)

Виразимо у з рівняння (2.15)

$$y = xz$$
.

та знайдене значення підставимо в рівняння (2.16):

$$0 = z_e - z - x^2 z.$$

Виразимо змінну z та винесенням за дужки

$$0 = z_e - z(1 + x^2).$$

Залежність безрозмірної щільності меж зерен від щільності дислокацій приймає вигляд

$$z = \frac{z_e}{1 + x^2};$$
 (2.17)

Таким чином, безрозмірна швидкість руху дислокацій залежно від щільності дислокацій:

$$y = \frac{xz_e}{1+x^2}.$$
 (2.18)

На основі залежностей безрозмірної щільності меж зерен (2.17) та швидкості руху дислокацій (2.18) відповідно, побудуємо графіки



Рисунок 2.1 – Безрозмірна щільність дислокацій в залежності від щільності меж зерен згідно до рівняння (2.17). Нижня крива відповідає значенню  $z_e = 0,5$ , верхня крива, значенню  $z_e = 6$ .

З рисунка 2.1 видно, що в стаціонарному стані щільність меж зерен, які задаються зовнішніми умовами, зменшує своє значення від  $z_e$  до значення  $z_e/2$  в інтервалі від 0 до 1 для показників безрозмірної щільності дислокацій.



Рисунко 2.2 – Безрозмірна густини дислокацій в залежності від швидкості руху дислокацій згідно формули (2.18). Нижня крива відповідає значенню  $z_e = 0,5$ , верхня крива приймає значення  $z_e = 6$ .

3 рисунка 2.2 видно, що в інтервалі від 0 до 1 швидкість руху дислокацій в стаціонарному стані відносно до безрозмірної густини дислокацій, збільшує значення від 0 до  $z_e/2$ .

Збільшення швидкості руху дислокацій є передумовою утворення мікросмуг зсуву та процесу самоорганізації дислокацій.

### 2.4 Синергетичний потенціал

В рівняння (2.14) підставимо (2.17) та (2.18), безрозмірне значення щільності меж зерен та швидкості руху дислокацій відповідно

$$\frac{\partial x}{\partial t'} = -x + \frac{x^2 z_e}{1 + x^2} - A \frac{x^3 z_e}{1 + x^2} + (1 - \beta_{gb}) B \frac{x z_e^2}{(1 + x^2)^2}.$$

Після врахування вказаних залежностей, новоутворене диференційне рівняння приймає вигляд рівняння Ландау-Халатнікова:

$$\frac{\partial x}{\partial t'} = -\frac{dV}{dx}.$$

V – параметр ефективної енергії системи (або синергетичний потенціал). При цьому, скоротимо змінні і прирівняємо рівняння  $\frac{\partial x}{\partial t'}$  та  $(-\frac{dV}{dx})$ 

$$\frac{dV}{dx} = x - \frac{x^2 z_e}{1 + x^2} + A \frac{x^3 z_e}{1 + x^2} - (1 - \beta_{gb}) B \frac{x z_e^2}{(1 + x^2)^2}.$$

Звідси отримаємо

$$\int dV = \int x dx - z_e \int \frac{x^2 dx}{1 + x^2} + A z_e \int \frac{x^3 dx}{1 + x^2} - \left(1 - \beta_{gb}\right) B z_e^2 \int \frac{x dx}{(1 + x^2)^2}.$$
 (2.19)

З правої частини (2.19) розглянемо кожну частину інтегрального виразу окремо

1)

$$\int x dx = \frac{x^2}{2} + C;$$

2)

$$\int \frac{x^2 dx}{1+x^2} = \int \left(\frac{x^2+1}{x^2+1} - \frac{1}{x^2+1}\right) dx$$
$$= \int \left(1 - \frac{1}{x^2+1}\right) = \int 1 dx - \int \left(\frac{1}{x^2+1}\right) dx = x - \arctan(x) + C_1;$$

$$\int \frac{x^3 dx}{1+x^2} = \begin{cases} 1+x^2 = u \\ dx = \frac{1}{2x} du \end{cases} = \frac{1}{2} \int \frac{u-1}{u} du$$
$$\int \frac{u-1}{u} du = \int \left(1-\frac{1}{u}\right) du = \int 1 du - \int \frac{1}{u} du$$
$$\int 1 du = u$$
$$\int \frac{1}{u} du = \ln(u)$$
$$\int 1 du - \int \frac{1}{u} du = u - \ln(u)$$
$$\frac{1}{2} \int \frac{u-1}{u} du = \frac{u}{2} - \frac{\ln(u)}{2} = \{u = x^2 + 1\} = \frac{x^2+1}{2} - \frac{\ln(x^2+1)}{2}$$
$$\int \frac{x^3}{x^2+1} dx = \frac{x^2+1}{2} - \frac{\ln(x^2+1)}{2} = \frac{x^2 - \ln(x^2+1)}{2} + C_2$$

4)

$$\int \frac{x dx}{(1+x^2)^2} = \begin{cases} u = 1+x^2 \\ dx = \frac{1}{2x} du \end{cases} = \frac{1}{2} \int \frac{1}{u^2} du$$
$$\int \frac{1}{u^2} du = -\frac{1}{u}$$
$$\frac{1}{2} \int \frac{1}{u^2} du = -\frac{1}{2u} = \{u = 1+x^2\} = -\frac{1}{2(1+x^2)}$$
$$\int \frac{x}{(1+x^2)^2} dx = -\frac{1}{2(1+x^2)} + C_3$$

Приймемо константи інтегрування, як початок відліку синергетичного потенціалу. Таким чином отримаємо залежність

$$V = \frac{x^2}{2} - z_e [x - \arctan(x)] + A z_e \frac{x^2 - \ln(x^2 + 1)}{2} + (1 - \beta_{gb}) B z_e^2 \frac{1}{2(1 + x^2)}$$
(2.20)

Розглянемо детальніше залежність синергетичного потенцілу (2.20). На основі (2.20) з набором параметрів: A = 1; B = 2;  $\beta_{gb1}$  = 1,2;  $\beta_{gb2}$  = 0,8,  $z_e$  = 6, рисунок 2.3 описує залежність синергетичного потенціалу від щільності дислокацій.



Рисунок 2.3 – Синергетичний потенціал (2.20) при наборі:  $\beta_{gb1} = 0,8$  (верхня крива)  $\beta_{gb2} = 1,2$  (нижня крива),  $z_e = 6$ ; A = 1; B = 1.

Рисунок 2.4 описує залежність потенціалу від параметру ефективності границь зерен та щільності дислокацій.



Рисунок 2.4 – Синергетичний потенціал (2.20) при наборі:  $z_e = 6$ ; A = 1; B = 2.

Таким чином, на залежності потенціала формується не нульове мінімальне значення при перевищенні щільності границі зерен  $z_e$ , критичним значення  $z_c = 1$ , яке задається зовнішними умовами.

Використовуючі такі параметрии, стає можливим процес формування мікросмуг зсуву.

Слід зазначити, що мікрополоси зсуву при значенняч  $z_e$  менших критичного, не формуються незалежно від ефективності границь зерен, як джерел та стоків дислокацій (рисунок 2.5).



Рисунок 2.5 – Синергетичний потенціал (2.20) при наборі:  $z_e = 0,5; A = 1; B = 2.$ 

В даному розділі також проаналізували, який вигляд прийматиме синергетичний потенціал залежно від різних значень коефіцієнтів A та B. З рисунка 2.6 видно, що на стан формування мікросмуг зсуву та різницю енергій основного стану ( $x_{min} = 0$ ) впливає лише кількісний показник.



Рисунок 2.6 – Синергетичний потенціал (2.20) при наборі:  $z_e = 6$ ,  $\beta_{gb} = 0.8$ .

В результаті було визначено

Таким чином на процес утворення мікросмуг зсуву впливає два параметри: 1) щільність меж зерен  $z_e$ , що задається зовнішніми умовами та має перевищувати критичне значення ( $z_c = 1$ );

2) параметр, що визначає відносну ефективність меж зерен як джерел та стоків дислокацій, має бути меншим 1.

# РОЗДІЛ З ФАЗОВА КІНЕТИКА ПРОЦЕСУ УТВОРЕННЯ МІКРОСМУГ ЗСУВУ

При достатньо великих напруженнях процес деформації твердого тіла супроводжується залишковими деформаціями, поява яких пов'язано з перебудовою дефектної кристалічної структури та з нееластичними ефектами. Як і в інших перерахованих вище випадках припустимо, що при формуванні мікросмуг зсуву домінуючим є процес самоорганізації дислокацій. Рівняння еволюції середньої щільності дислокацій в нанометалі запишемо у вигляді редукованого рівняння Свіфта-Хоенберга, що містить у своїй правій частині характерні для нанозеренних структур дислокаційні процеси.

За основу візьмем безрозмірну систему рівнянь самоорганізації (2.11)-(2.13), що описує перехід до стану утворення мікросмуг зсуву.

$$\left(\frac{\partial x}{\partial t'} = -x + xy - Ayx^2 + \left(1 - \beta_{gb}\right)Byz;\right)$$
(3.1)

$$\begin{cases} \delta \frac{\partial y}{\partial t'} = -y + xz; \tag{3.2} \end{cases}$$

$$\left(\sigma \frac{\partial z}{\partial t'} = z_e - z - xy.\right)$$
(3.3)

Ліві частини системи рівнянь прирівняємо до нуля,

$$f0 = -x + xy - Ayx^{2} + (1 - \beta_{gb})Byz;$$
(3.4)

$$0 = (-y + xz)\frac{1}{\delta};$$
(3.5)

$$\left(0 = (z_e - z - xy)\frac{1}{\sigma};\right.$$
(3.6)

3 рівняння (3.5) виразимо у,

$$y = xz;$$

Аналогічним чином, з рівняння (3.6) знайдемо значення z,

$$z = z_e - xy;$$

Підставимо значення у в попереднє рівняння

$$z = z_e - x^2 z;$$

В результаті підстановок виразимо значення z та y:

$$z_{e} = z(1 + x^{2});$$

$$z = \frac{z_{e}}{1 + x^{2}};$$

$$xz_{e}$$
(3.7)
(3.7)

$$y = \frac{x z_e}{1 + x^2};$$
 (3.8)

Підставимо (3.7) і (3.8) в рівняння (3.4);

$$0 = -x + x \frac{xz_e}{1+x^2} - Ax^2 \frac{xz_e}{1+x^2} + (1-\beta_{gb})B \frac{xz_e}{1+x^2} \cdot \frac{z_e}{1+x^2};$$
  

$$0 = -x(1+x^2)^2 + x^2z_e(1+x^2) - Az_ex^3(1+x^2) + (1-\beta_{gb})Bxz_e^2;$$
  

$$0 = -x(1+2x^2+x^4) + z_ex^2 + z_ex^4 - Az_ex^3 - Az_ex^5 + (1-\beta_{gb})Bz_e^2x;$$
  

$$0 = x\{-1-2x^2-x^4+z_ex+z_ex^3 - Az_ex^2 - Az_ex^4 + (1-\beta_{gb})Bz_e^2\}.$$

прирівняємо до нуля в правій частині виразу *x* та вираз в фігурних дужках.

1) 
$$x = 0$$
;  
2)  $\{-1 - 2x^2 - x^4 + z_e x + z_e x^3 - Az_e x^2 - Az_e x^4 + (1 - \beta_{gb})Bz_e^2\} = 0.$ 

$$(Az_e + 1)x^4 - z_e x^3 + (Az_e + 2)x^2 - z_e x + 1 - (1 - \beta_{gb})Bz_e^2 = 0;$$
(3.9)

Використаємо підстановку Ляпунова

$$fx = x_0 + ae^{\lambda t}; ag{3.10}$$

$$\begin{cases} x = x_0 + ae^{\lambda t}; & (3.10) \\ y = y_0 + be^{\lambda t}; & (3.11) \\ z = z_0 + ce^{\lambda t}. & (3.12) \end{cases}$$

$$z = z_0 + c e^{\lambda t}. \tag{3.12}$$

де x<sub>0</sub>, y<sub>0</sub>, z<sub>0</sub> – координати особливих точок, *a*, *b*, *c* - незначні відхилення від стаціонарного стану, λ - показники Ляпунова.

Підставивши (3.10) в (3.1), отримаємо

$$\begin{aligned} a\lambda e^{\lambda t} &= -x_0 - ae^{\lambda t} + (x_0 + ae^{\lambda t})(y_0 + be^{\lambda t}) - A(y_0 + be^{\lambda t})(x_0 + ae^{\lambda t})^2 \\ &+ (1 - \beta_{gb})B(y_0 + be^{\lambda t})(z_0 + ce^{\lambda t}); \\ a\lambda e^{\lambda t} &= -x_0 - ae^{\lambda t} + x_0y_0 + y_0ae^{\lambda t} + x_0be^{\lambda t} - A(y_0 + be^{\lambda t})(x_0^2 + 2x_0ae^{\lambda t}) \\ &+ B(1 - \beta_{gb})(y_0z_0 + z_0be^{\lambda t} + y_0ce^{\lambda t}); \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} a\lambda e^{\lambda t} &= -x_0 + x_0 y_0 - a e^{\lambda t} + y_0 a e^{\lambda t} + x_0 b e^{\lambda t} - A y_0 x_0^2 - A x_0^2 b e^{\lambda t} \\ &- A y_0 2 x_0 a e^{\lambda t} + B (1 - \beta_{gb}) y_0 z_0 + B (1 - \beta_{gb}) z_0 b e^{\lambda t} \\ &+ B (1 - \beta_{gb}) y_0 c e^{\lambda t}. \end{aligned}$$

$$(-x_0 + x_0 y_0 - A y_0 x_0^2 + B(1 - \beta_{gb}) y_0 z_0) \equiv 0.$$

В останньому рівнянні скоротимо на  $e^{\lambda t}$ , і в рузультаті чого отримаємо

$$a\lambda = -a + y_0 a + x_0 b - Ax_0^2 b - Ay_0 2x_0 a + B(1 - \beta_{gb})z_0 b + B(1 - \beta_{gb})y_0 C.$$
  

$$a\lambda + a - y_0 a + Ay_0 x_0 2a - x_0 b + Ax_0^2 b - B(1 - \beta_{gb})z_0 b - B(1 - \beta_{gb})y_0 C = 0;$$
  

$$a[\lambda + 1 - y_0 + 2Ax_0 y_0] + b[Ax_0^2 - x_0 - B(1 - \beta_{gb})z_0] +$$

$$+c[-B(1-\beta_{gb})y_0] = 0; (3.13)$$

Підставимо рівняння Ляпунова (3.11) в (3.2):

$$\begin{split} \delta\lambda b e^{\lambda t} &= -y_0 - b e^{\lambda t} + (x_0 + a e^{\lambda t})(z_0 + c e^{\lambda t});\\ \delta\lambda b e^{\lambda t} &= -y_0 - b e^{\lambda t} + x_0 z_0 + x_0 c e^{\lambda t} + z_0 a e^{\lambda t};\\ \delta\lambda b &= -b + x_0 c + z_0 a;\\ a[-z_0] + b[\delta\lambda + 1] + c[-x_0] = 0; \end{split}$$
(3.14)

Аналогічно попереднім замінам, підставимо рівняння Ляпунова (3.12) в (3.3):

$$\sigma\lambda ce^{\lambda t} = z_e - z_0 - ce^{\lambda t} - (x_0 + ae^{\lambda t})(y_0 + be^{\lambda t});$$
  

$$\sigma\lambda ce^{\lambda t} = z_e - z_0 - ce^{\lambda t} - x_0y_0 - x_0be^{\lambda t} - y_0ae^{\lambda t};$$
  

$$\sigma\lambda c = -c - x_0b - y_0a;$$
  

$$a[y_0] + b[x_0] + c[\sigma\lambda + 1] = 0.$$
(3.15)

В результаті підстановок умов (3.10)-(3.12) в безрозмірну систему рівнянь (3.1)-(3.3), отримамали алгебраїчні рівняння.

Сформуємо матрицю з коефіцієнтів рівнянь (3.13)-(3.15), детермінант якої формує показники Ляпунова.

$$\begin{vmatrix} \lambda + 1 - y_0 & Ax_0^2 - x_0 - B(1 - \beta_{gb})z_0 & -B(1 - \beta_{gb})y_0 \\ -z_0 & \delta\lambda + 1 & -x_0 \\ y_0 & x_0 & \sigma\lambda + 1 \end{vmatrix} = 0.$$
(3.16)

Детермінант матриці (3.16) буде мати вигляд:

$$(\lambda + 1 - y_0 + 2Ax_0y_0)(\delta\lambda + 1)(\sigma\lambda + 1) - -x_0y_0(Ax_0^2 - x_0 - B(1 - \beta_{gb})z_0) +$$

$$+x_{0}z_{0}B(1-\beta_{gb})y_{0} + (\delta\lambda+1)B(1-\beta_{gb})y_{0}^{2} + x_{0}^{2}[\lambda+1-y_{0}+2Ax_{0}y_{0}] + z_{0}(\sigma\lambda+1)(Ax_{0}^{2}-x_{0}-B(1-\beta_{gb})z_{0}) = 0.$$
(3.17)

Розкриємо дужки в рівнянні (3.17), та представимо його в наступному вигляді

$$a_1\lambda^3 + b_1\lambda^2 + c_1\lambda + d_1 = 0. (3.18)$$

Для 1-ї особливої точки D маємо наступні координати

$$x_0 = 0;$$
  
 $y_0 = 0;$   
 $z_0 = z_e.$ 

Знаходимо показники Ляпунова для точки D використовуючи рівнянння (3.17) та підставляючи коефіцієнти в рівняння

$$\begin{aligned} (\lambda+1)(\delta\lambda+1)(\sigma\lambda+1) + z_e(\sigma\lambda+1)\big(-B\big(1-\beta_{gb}\big)z_e\big) &= 0; \\ (\sigma\lambda+1)\big[\lambda+1+\delta\lambda^2+\delta\lambda-B\big(1-\beta_{gb}\big)z_e^2\big] &= 0; \end{aligned}$$

Звідси

$$\sigma \lambda + 1 = 0;$$
  

$$\lambda_1 = -\frac{1}{\sigma};$$
(3.19)

Зазначимо, що корінь  $\lambda_1$  завжди має від'ємне значення. З квадратного рівняння знаходяться інші два кореня

$$\delta\lambda^{2} + \lambda(1+\delta) + 1 - B(1-\beta_{gb})z_{e}^{2} = 0;$$
  
$$\lambda_{2,3} = \frac{-(1+\delta) \pm \sqrt{(1+\delta)^{2} + 4\delta B z_{e}^{2}(1-\beta_{gb})}}{2\delta}.$$
 (3.20)

Отримавши корені  $\lambda_{2,3}$ , можна сказати, що ці два комплексно-спряжених кореня також мають від'ємну дійсну частину. При цьому, від типу коренів залежить тип стійкості стаціонарної точки.

Знайдемо x<sub>0</sub>, y<sub>0</sub>, z<sub>0</sub>, для наступних точок, виконавши аналогічні точці D розрахунки. Відповідні результати представлені в таблиці 3.1.

Таблиця 3.1 Значення параметрів, координат та показників Ляпунова для точки N, T в залежності від параметрів A, B, δ, σ, β<sub>gb</sub>, z<sub>e</sub>.

	Набір параметрів		
	Α	5	
	В	1	
Параметри	ze	6	
	Bgb	0,8	
	δ	1	
	σ	1	

	x_2	-0.33449
Координати точок	x_3	0.50033
	y_2	-2.54031
	y_3	2.82133
	z_2	4.59586
	z_3	4.01982

Показники	λ_1	-17.17102	-1.20532 – 0.50011 i	-1.20532 + 0.500110 i
Ляпунова	λ_2	-15.09517	-1.17759 – 0.67465 i	-1.17759 + 0.67465 i

Побудуємо фазовий портрет для всіх наборів параметрів за допомогою пакету MatLab



Рисунок 3.1 – Тривимірний фазовий портрет з координатами x, y, z при наборі: ze = 6; bgb = 0.8;  $\delta$  = 1;  $\sigma$  = 1; A = 5; B = 1.

# РОЗДІЛ 4 ПРАВИЛА ТЕХНІКИ БЕЗПЕКИ ПРИ РОБОТІ ЗА ПЕРСОНАЛЬНИМ КОМП'ЮТЕРОМ

#### Електробезпека при роботі

Користуючись комп'ютерною технікою та периферійними пристроями, кожен користувач повинен дбайливо поводитися з електропроводкою та обладнанням і завжди памятати, що ігнорування правил техніки безпеки може загрожувати здоров'ю та життю.

За для уникнення ураження електричним струмом, необхідно чітко та беззаперечно дотримуватись правил безпечного поводження з електричним струмом та електрообладнанням. Слід постійно контролювати на своєму робочому місці справність вимикачів, електропроводки, заземлення та штепсельних розеток за допомогою яких обладнання вмикається до мережі. У разі виявлення несправності негайно знеструмити електрообладнання та продовжити роботу можливо лише після усунення.

Виникненню коротких замикань та уникненню пошкодження шару ізоляції дротів можна слідуючи правилам.

Забороняється:

а) вішати будь-які речі(предмети) на шнури живлення;

в) білити та зафарбовувати шнури і дроти;

б) висмикувати з розетки за шнур штепсельну вилку;

г) раз-у раз без необхідності вмикати та вимикати комп'ютер;

д) розміщувати дроти і кабелі за водопровідними, газовими трубами та батареями системи опалення;

е) починати робочий процес на обчислювальній техніці та периферійному обладнанні вологими руками;

г) використовувати переферійне обладнання та засоби обчислювальної техніки, які мають ушкоджену цілісність корпусу та ізоляцію проводів.

д) розміщувати сторонні предмети на комп'ютері та периферійному обладнанні.

є) очищати від забруднень поверхню комп'ютера, коли він знаходиться у включеному стані;

ж) під час роботи знімати будь-які складові частини комп'ютера та периферії.

) неприпустимо включати персональний комп'ютер в подовжувачі й розетки, в яких відсутня заземлювальна шина;

) забороняється починати роботу в приміщеннях з підвищеною вологістю, а також в разі, якщо поруч присутні відкриті джерела вологості;

#### Освітлення

Робоче місці користувача ПК повинно бути облаштоване з дотриманням відповідних норм освітлення. Система освітлення повинна відповідати наступним вимогам:

- освітлення в робочій зоні повинно бути змішаного типу, природним та штучним. В якості штучних джерел освітлення необхідно застосовувати переважно люмінесцентні або компактні люмінесцентні лампи;

- освітлення повинно бути постійним та рівномірним, не дуже яскравим, але і не зовсім відсутнім;

- відносно вікон, робоча зона повинна бути розташована так, щоб природне світло було збоку, аби уникнути попадання прямого світла в очі;

- відблисків від робочої поверхні можна уникнути, прикривши вікно шторою або жалюзями.

- яскравість монітору відповідно до освітлення приміщення повинна бути приблизно однаковою.

#### Робоча поза

Правильно організувати робоче місце, означає створити необхідні умови для комфортної та продуктивної праці. Робоче місце повинно складатися зі столу, крісла, монітору, клавіатури, системного блоку, підставки під документи та підставки для ніг. Правильна робоча поза може покращити дихання, кровотік та уникати перенапруги м'язів. Спина повинна бути розташована майже вертикально по відношенню до підлоги і спиратися на спинку крісла.

В області попереку спина не повинна згинатися назад, а навпаки трохи вперед. Положення рук та стегон повинно бути паралельно підлозі, так щоб кут в колінах становив не менше 90 градусів. Зручне положення рук забезпечують підлокітники, при необхідності використовувати підставку для ніг.

Конструкція робочого крісла повинна бути підйомно-поворотною і регульованою по висоті, а нахилена вперед спинка — відповідати фізіологічним вигинам хребта, аби забезпечувати підтримку раціональної робочої пози при роботі, для запобігання стомлення. Рівень очей від екрана монітора повинен бути приблизно на відстані витягнутої руки, а кут між оком та центром екрана 15-30 градусів.

На протязі робочого процесу обов'язково робити невеликі перерви щогодини по 10-15 хвилин та при цьому вправи для шиї та очей або просто провести час в русі.

#### Вимоги до монітору

Монітор не рекомендується розміщувати поруч з яскравим джерелом світла. Поверхня екрану повинна бути чистою і без світлових відблисків. Монітор необхідно розташовувати так, щоб днем яскраве світло з вікна не потрапляло прямо в очі користувачеві. Окуляри при роботі за монітором повинні бути ідеально чистими. На моніторах з рівнем захисту нижче рівня MPR 2, обов'язково використовувати захисні екрани та сидіти якомога далі, бажано розташовувати тильною стороною до стіни.

#### Вимоги безпеки перед початком роботи:

- провітрити приміщення;

- прибрати з робочого місця та обладнання зайві придмети, які заважають дивитись на екран та користуватись пристроями введення інформації;
- перевірити загальний стан обладнання, справність електропроводки, розеток, штепсельних вилок та заземлення на наявність пошкоджень;
- відрегулювати освітленість робочої зони, переконатись у відсутності відблисків на екрані та зустрічного світлового потоку;
- перевірити правильність закріплення обладнання, крісла, столу;
- відрегулювати кут нахилу монітору, положення крісла, підставки під ноги, підлаштувати яскравість монітору під освітленість приміщення, воно не повинно бути занадто яскравим, та занадто тьмяним, щоб не втомлювати очі;
- перевірити правильність підключення обладнання до електромережі;
- при включенні комп'ютера слід дотримуватись послідовності включення обладнання;
- забороняється розпочинати роботи при виявлення пошкоджень.

### Вимоги безпеки під час виконання роботи:

- При роботі необхідно:
- на протязі робочого дня тримати в порядку та чистоті робоче місце;
- слідкувати, щоб були відкриті всі вентиляційні отвори пристроїв;
- після кожної години роботи провітрювати приміщення;
- згідно з інструкцією з експлуатації, дотримуватись правил експлуатації обчислювальної техніки;
- виконувати встановлені режимом робочого часу перерви в роботі, виконувати вправи для очей, рук, ніг, тулуба;

### Вимоги безпеки після закінчення роботи

- завершити всіх активні процеси;

- відключити живлення обчислювального термінала та периферійних пристроїв;
- оглянути та привести до належного стану робоче місце.
- виконати вправи на розслаблення для очей і пальців рук.
- виконати вправи на розслаблення для очей і пальців рук.

### ВИСНОВКИ

В магістерській роботі з точки зору дислокаційно-кінетичного підходу субмікро- і нанокристалічних матеріалів теоретично обговорюється для механізм локалізації деформації та феноменологічна модель формування пластичній деформації. Пластична мікросмуг зсуву при деформація нанокристалічних i субмікрокристалічних металів супроводжується неоднорідним в мікронному масштабі її розподілом по деформованому матеріалу. Як відомо з досліджень, при деформуванні НК-заліза спостерігалось утворення системи мікросмуг зсуву, ширина яких збільшувалася з ростом середнього розміру нанозерен і на порядок його перевищувала. В ході експериментів, було виявлено, що з росто ступеня деформації збільшувалась як кількість смуг так і їх ширина і в результаті вони утворювали простороворегулярну структуру. При великих розмірах зерен деформація матеріалу протікає однорідно, рівномірно охоплюючи всі зерна, не локалізуючись у вигляді мікросмуг.

Для опису процесу формування мікросмуг зсуву в рамках просторової організації дислокацій була побудована синергетична трипараметрична модель на основі редукованого рівняння Свіфта-Хоенберга. В рамках адіабатичного наближення були досліджені стаціонарні залежності щільності меж зерен та швидкості руху дислокацій в залежності від безрозмірної щільності дислокацій.

Було визначено, що на процес утворення мікросмуг зсуву впливає також параметр, що визначає відносну ефективність меж зерен як джерел дислокацій. В даний час відсутні повномасштабні і систематичні дослідження механізму формування і параметрів мікросмуг в наноматеріалах в залежності від розміру нанозерен і ступеня пластичної деформації. Є лише якісні спостереження і окремі кількісні дані.

Були розраховані показники Ляпунова та на основі отриманих результатів були побудовані фазові портрети.

### СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

- 1. Cheng S. Acta Mater / S. Cheng, E. Ma, Y. M. Wang. 2005. №53. C. 1521.
- 2. Малыгин Г. А. ФТТ / Г. А. Малыгин. 2007. №49. С.961.
- 3. Малыгин Г. А. ФТТ / Г. А. Малыгин. 2007. №49. С. 2161.
- 4. Cai H. N. Localized amorphism after high-strain-rate deformation in TWIP steel / H. N. Cai, L. P. Ru, W. Yandong. // Acta Materialia. 2011. №59. C. 6369–6377.
- 5. Gbadebo O. Shear strain localization in AA 2219-T8 aluminum alloy at high strain rates / O. Gbadebo, B. Denzell, W. H. 2016. C. 212–220.
- Tresca H. On further application of the flow of solids. /H. Tresca //Proceedings of the Institution of mechanical engineers / Tresca. // Proceedings of the Institution of mechanical engineers. – 1878. – №30. – C. 301–345.
- Zener C. Effect of strain rate upon plastic flow of steel / C. Zener, J. Hollomon. // Journal of applied physics. – 1944. – №15. – C. 22–32.
- Slater R. Transaction of the Manchester engineering association / R.A.C Slater. // Journal of the Australia institute of metals. – 1965. – №5. – C. 1–43.
- Sudhakar I. Enhancement of Wear and Ballistic Resistance of Armour Grade AA7075 Alu-minium Alloy using Friction Stir Processing / I. Sudhakar, V. Madhu, R. Madhusudan. – 2015. – №11. – C. 10–17.
- Magness L. S. High strain rate deformation behaviors of kinetic energy penetrator materials during ballistic impact / Magness. // Mechanics of materials. – 1994. – №17. – C. 147–156.
- Малыгин, Г. А. Механизм формирования микрополос сдвига при пластической деформации нанокристаллических материалов / Г. А. Малыгин,. // Физика твердого тела. – 2009. – №9. – С. 1709–1715.
- Chen Y. J. Spontaneous and forced shear localization in high-strain-rate deformation of tantalum / Y. J. Chen, M. A. Meyers, V. F. Nesterenko. // Materials science and engineering. 1999. №268. C. 70–82.

- Cronje S. Twinning in copper deformed at high strain rates / S. Cronje, R. E. Kroon, W. D. Roos. // Bull. Mater. Sci. 2013. №36. C. 157–162.
- 14. Bigoni D. The unrestrainable growth of a shear band in a prestressed material / D.
  Bigoni, C. F. Dal. 2008. №464. C. 2365–2390.
- Evolution of microstructure and shear-band formation in α-hcp titanium / M.
   A.Meyers, G. Subhash, B. K. Kad, L. Prasad. 1994. №17. C. 175–193.
- 16. da Silva M. G. Material science and engineering / M. G. da Silva, T. Ramesh. –
  1997. №232. C. 11.
- 17. Lee D. G. Material science and engineering / D. G. Lee, G. Kim, H. Nam. 2005.
   C. 221.
- Cerreta E. Acta materialia / E. Cerreta, Q. Xue, T. Gray. 2007. №55. C.
   691–704.
- Oborin V. Fractal analysis of fracture surface of aluminum alloy AMg6 under fatigue and dynamic loading / V. Oborin, M. Bannikov, Y. Bayandin. // PNRPU Mechanics Bulletin. – 2015. – C. 116–126.
- Билалов Д. А. Исследование локализации пластического сдвига в алюминиевых сплавах при динамическом нагружении. / Д. А. Билалов, М. А. Соковиков. // Вычислительная механика сплошных сред. – 2015. – №3. – С. 319–328.
- 21. Kad B. K. Ultrafine grain-sized zirconium by dynamic deformation / B. K. Kad, J. M. Gebert.
- 22. Аниськин М. В. Механические свойства тантала с различной сикроструктурой при высокоскоростной деформации / М. В. Аниськин, О. Н. Игнатова, И. И. Каганова. // Физическая мезомеханика. 2010. №13. С. 65–71.
- Годин Ю. Г. Ядерные топливные материалы / Ю. Г. Годин, В. В. Тенишев, М. Новиков. – 2008. – С. 604.
- 24. Yellup J. M. Mechanics research communication / J. M. Yellup, R. L. Woodward.
   1980. №1. C. 41–57.

- 25. Yazhou G. A novel approach to testing the dynamic shear response of Ti-6Al-4V
  / G. Yazhou, L. Yulong. // Acta Mechanica Solida Sinica. 2012. №25. C.
  299–311.
- Meunier Y. Shock Wave and High- Strain-Rate Phenomena in Materials / Y. Meunier, R. Roux, J. Moureaud. – 1992. – C. 637–644.
- 27. FuPing Y. Dynamic shear response and evolution mechanisms of adiabatic shear band in an ultrafine-grained austenite–ferrite duplex steel [Електронний ресурс]
  / Y. FuPing, B. Xiangde, J. Ping // Mechanics of Materials. 2015.
- 28. Rongtao Z. A quantitative experimental study on non-homogenous deformation behaviors of nanocrystalline Ni sheet [Електронний ресурс] / Z. Rongtao, L. Yanfeng // Materials Science and Engineering A. – 2014.
- Odnobokova M. V. Grain refinement and strengthening of austenitic stainless steels during large strain cold rolling / M. V. Odnobokova, A. N. Belyakov, R. Kaibyshev. // Phil. Mag. – 2019. – №5. – C. 531–556.
- Odnobokova M. V. Effect of Cold Rolling and Subsequent Annealing on the Microstructure and the Microtexture of Austenitic Corrosion-Resistant Steels / M. V. Odnobokova, A. N. Belyakov. – 2019. – №4. – C. 315–325.
- Sachtleber M. E. Experimental investigation of plastic grain interaction / M. E. Sachtleber, Z. Zhao. // Materials science and engineering. 2002. №336. C. 81–87.
- Backman M. E. Metallurgical effects at high strain rates / M. E. Backman, S. A. Finnegan, R. W. Rohde. // Plenum Press. 1973. C. 531–44.
- 33. Flockhart C. J. International journal of impact engineering / C. J. Flockhart, R. L. Woodward, Y. C. Lam., 1991. 93 c.
- 34. Малыгин Г. А. Механизм формирования микрополос сдвига при пластической деформации нанокристаллических материалов / Г. А. Малыгин. // Физика твердого тела. – 2009. – №9. – С. 1709–1715.
- 35. Coffey C. S. Journal of applied physics / Coffey., 1991. 4248 c.
- 36. Curran D. Shock Waves in Condensed Matter / D. Curran, L. Seaman. New York: Plenum Press, 1985. – 315 c.

- 37. Kamyshanchenko N. V. BEHAVIORS TWIN DISLOCATIONS IN NORMALIZED STRUCTURE OF VT 1-0 TITANIUM WITH (0001) GRAIN ORIENTATION / N. V. Kamyshanchenko, V. V. Krasilnikov, A. V. Galtsev,. // Научные ведомости Белгородского государственного университета. – 2019. – С. 262–269.
- 38. Fujita H. Acta Met. / H. Fujita, T. Tabata., 1973. 355 c.
- 39. Hansen N. Acta Met. / Hansen., 1977. 863 c.
- 40. Ashby M. F. Phil. Mag. A / Ashby., 1977. 863 c.
- 41. Zhang X. Dislocation-based plasticity and strengthening mechanisms in sub-20 nm lamellar structures in pearlitic steel wire / X. Zhang, N. Hansen. // Acta Materialia. 2016.
- 42. Md. Meraj. Effect of grain refinement on superplasticity in micrograined materials / Md. Meraj, P. Snehanshu. // Metals and Materials International. 2017. №23.
- 43. Malygin G. A. Phys. Solid State / Malygin. 2017. №59. C. 321.
- 44. Konakov Y. V. / Y. V. Konakov, I. A. Ovid'ko. // Phys. Solid State. 2016. №58. C. 1819.
- 45. Bitzek E. THE STRESS-STRAIN RESPONSE OF NANOCRYSTALLINE METALS: A STATISTICAL ANALYSIS OF ATOMISTIC SIMULATIONS / Bitzek. // Acta Mater. – 2008. – №56. – C. 4846.
- 46. Wu X. Appl. Phys. Lett. / X. Wu, E. Ma. 2006. V.88. C. 231911.
- 47. Гуткин М. Ю. Дефекты и механизмы пластичности в наноструктурных и металлических материалах / М. Ю. Гуткин, И. И. Овидько. – СПб: Логос, 2001. – 178 с.
- Wang L. Shear band evolution of nanocrystalline Ni under obvious plastic deformation / L. Wang, S. Zhang, J. Zhou. // Cailiao Gongcheng/Journal of Materials Engineering. – 2013.
- 49. Wei Q. Appl. Phys. Lett. / Wei. 2002. V.81. C. 1240.
- 50. Jia D. Acta Mater. / D. Jia, K. T. Ramesh, E. Ma. 2003. V.51. C. 3495.
- 51. Malygin G. A. Phys. Solid State / Malygin. 2017. №59. C. 321.

- 52. Dynamic Mechanical Responses of Ultrafine-Grained IF Steel Over a Wide
  - Range of Temperatures / L.Yulong, F. Yuqing, S. Tao, L. Jiejian. // International Journal of Applied Mechanics. 2018.

### ДОДАТОК А

Програма побудови фазового портрету

> ze:=6: bgb:=0.8; delta:=1: sigma:=1: A:=5; B:=1;

	$bgb \coloneqq .8$
	<i>A</i> := 5
	<i>B</i> := 1
1:=0;z1:=ze;	
	x1 := 0
	<i>y1</i> := 0
	<i>z1</i> := 6
ze⊥1.	

>A1:=A\*ze+1;

> x1:=0;y

*A1* := 31

>B1:=A\*ze+2;

*B1* := 32

>C1:=1-(1-bgb)\*B\*ze^2;

*C1* := -6.2

> x2:=solve(A1\*x^4-ze\*x^3+B1\*x^2-ze\*x+C1);

*x*2 := -.3344954789, .01385312117 - 1.093083696 *I*, .01385312117 + 1.093083696 *I*, .5003376237

> y2\_1:=x2[1]\*ze/(1+x2[1]\*x2[1]);

*y2\_1* := -2.540317547

> y2\_2:=x2[2]\*ze/(1+x2[2]\*x2[2]);

*y*2\_2 := 1.859489802 + 17.04887923 *I* 

> y2\_3:=x2[3]\*ze/(1+x2[3]\*x2[3]);

*y2\_3* := 1.859489802 - 17.04887923 *I* 

> y2\_4:=x2[4]\*ze/(1+x2[4]\*x2[4]);

*y2\_4* := 2.821337946

> z2\_1:=ze/(1+x2[1]\*x2[1]);

*z2\_1* := 4.595865522

> z2\_2:=ze/(1+x2[2]\*x2[2]);

*z*2\_2 := -14.30784751 + 1.831667227 *I* 

> z2\_3:=ze/(1+x2[3]\*x2[3]);

 $z2_3 := -14.30784751 - 1.831667227 I$ 

> z2\_4:=ze/(1+x2[4]\*x2[4]);

*z2\_4* := 4.019829495

 $> lambda1:=solve((l+1-y2_1+2*A*x2[1]*y2_1)*(delta*l+1)*(sigma*l+1)-x2[1]*y2_1*(A*x2[1]*x2[1]-x2[1]-B*(1-bgb)*z2_1)+x2[1]*z2_1*B*(1-bgb)*y2_1+(delta*l+1)*B*(1-bgb)*y2_1+x2[1]*x2[1]*(l+1-y2_1+2*A*x2[1]*y2_1)+z2_1*(sigma*l+1)*(A*x2[1]*x2[1]-x2[1]-B*(1-bgb)*z2_1)=0,l);$ 

 $\lambda 1 := -17.17102091, -1.205320717 - .5001100193 I, -1.205320717 + .5001100193 I$ 

 $> lambda2:=solve((l+1-y2_2+2*A*x2[2]*y2_2)*(delta*l+1)*(sigma*l+1)-x2[2]*y2_2*(A*x2[2]*x2[2]-x2[2]-B*(1-bgb)*z2_2)+x2[2]*z2_2*B*(1-bgb)*y2_2+(delta*l+1)*B*(1-bgb)*y2_2*y2_2+x2[2]*x2[2]*(l+1-y2_2+2*A*x2[2]*y2_2)+z2_2*(sigma*l+1)*(A*x2[2]*x2[2]-x2[2]-B*(1-bgb)*z2_2)=0,l);$ 

```
\begin{split} \lambda 2 &:= -202.2075930 + 35.35246510 \ \textit{I}, \ -2.135437554 - .02017222665 \ \textit{I}, \\ .1240453758 + .03325862203 \ \textit{I} \end{split}
```

 $> lambda3:=solve((l+1-y2_3+2*A*x2[3]*y2_3)*(delta*l+1)*(sigma*l+1)-x2[3]*y2_3*(A*x2[3]*x2[3]-x2[3]-B*(1-bgb)*z2_3)+x2[3]*z2_3*B*(1-bgb)*y2_3+(delta*l+1)*B*(1-bgb)*y2_3*y2_3+x2[3]*x2[3]*(l+1-y2_3+2*A*x2[3]*y2_3)+z2_3*(sigma*l+1)*(A*x2[3]*x2[3]-x2[3]-B*(1-bgb)*z2_3)=0,l);$ 

$$\begin{split} \lambda 3 &:= -202.2075930 - 35.35246510 \ \textit{I}, -2.135437554 + .02017222665 \ \textit{I}, \\ .1240453758 - .03325862203 \ \textit{I} \end{split}$$

 $> lambda4:=solve((l+1-y2_4+2*A*x2[4]*y2_4)*(delta*l+1)*(sigma*l+1)-x2[4]*y2_4*(A*x2[4]*x2[4]-x2[4]-B*(1-bgb)*z2_4)+x2[4]*z2_4*B*(1-bgb)*y2_4+(delta*l+1)*B*(1-bgb)*y2_4*y2_4+x2[4]*x2[4]*(l+1-bgb)*y2_4+x2[4]*x2[4]*(l+1-bgb)*y2_4+x2[4]*x2[4]*x2[4]*(l+1-bgb)*y2_4+x2[4]*x2[4]*x2[4]*(l+1-bgb)*y2_4+x2[4]*x2[4]$ 

 $y2_4+2*A*x2[4]*y2_4)+z2_4*(sigma*l+1)*(A*x2[4]*x2[4]-x2[4]-B*(1-bgb)*z2_4)=0,l);$ 

 $\lambda 4 := -15.09517666, -1.177597849 - .6746521035 \, I, -1.177597849 + .6746521035 \, I$