

ІНТЕНСИВНА ПЛАСТИЧНА ДЕФОРМАЦІЯ: МЕТОДИ ТА МАТЕМАТИЧНІ МОДЕЛІ ФОРМУВАННЯ НАНОМАТЕРІАЛІВ

О. В. Хоменко 

Сумський державний університет
вул. Римського-Корсакова, 2, Суми, 40007, Україна,
e-mail: o.khomenko@mss.sumdu.edu.ua

(Отримано 15 листопада 2019 р.; в остаточному вигляді — 23 січня 2020 р.; прийнято до друку — 17 лютого 2020 р.; опубліковано онлайн — 29 травня 2020 р.)

Розглянуто методи отримання та відповідні теоретичні моделі ультрадрібнозернистих і наноструктурних матеріалів. Основну увагу приділено методам інтенсивної пластичної деформації: наведено приклади схем та особливості процесу обробки. Описано експериментальні дослідження закономірностей отримання нанокристалічних структур у різних металах чи сплавах у процесі інтенсивної пластичної деформації. Проведено огляд низки теоретичних підходів щодо опису процесу фрагментації твердих тіл під час інтенсивної пластичної деформації. Розглянуто метод нерівноважної еволюційної термодинаміки, що дає змогу однозначно встановити поведінку нерівноважних змінних під час обробки твердих тіл. Наведено феноменологічні підгрунтя підходу, що об'єднують перший та другий закони термодинаміки, викладено модель, що дозволяє описати специфіку фрагментації та формування граничної (стаціонарної) структури під час інтенсивної пластичної деформації. Із урахуванням дводефектного наближення визначено основні співвідношення в термінах ефективної внутрішньої енергії та описано стадійність фрагментації. Показано, що співвідношення Тейлора подає самоузгоджений зворотний зв'язок між формуванням стаціонарної структури та умовою її утворення у вигляді діючих напружень. Зроблено висновок, що існує низка ще не цілком досліджених питань, що стосуються інтенсивної пластичної деформації. Саме на ці моменти потрібно спрямувати увагу дослідників.

Ключові слова: межа зерна, дислокація, інтенсивна пластична деформація, фазовий перехід, внутрішня енергія, фрагментація.

DOI: <https://doi.org/10.30970/jps.24.2001>

Зміст

I Вступ	1	Б Зв'язок нерівноважної еволюційної термодинаміки та теорії фазових переходів Ландау	15
II Методи отримання наноструктурних матеріалів	2	В Двомодова дворівнева модель інтенсивної пластичної деформації	15
А Основні схеми та особливості обробки методами інтенсивної пластичної деформації	3	V Висновки	17
Б Експериментальні дослідження дефектної мікроструктури під час інтенсивної пластичної деформації	5	Література	17
III Теоретичні представлення процесу фрагментації твердих тіл	7		
А Теорія фрагментації дислокаційних структур Г. О. Малигіна	7	I. ВСТУП	
Б Теорія диспергування у процесі інтенсивної пластичної деформації В. І. Копилова та В. М. Чувільдєєва	8	Сучасне виробництво потребує різноманітних конструкцій та деталей, що виготовляються з матеріалів із високими фізико-механічними властивостями. Зокрема, основною властивістю наноструктурних та ультрадрібнозернистих металів є їхня стійкість до руйнування під час великих циклічних навантажень (стійкість до втоми), що становить одну з найважливіших причин їх комерційного використання. Багато досліджень присвячено саме технологіям отримання ультрадрібнозернистих та наноструктурних матеріалів [1–18]. На сьогодні відомо декілька технологій, що дають змогу отримати об'ємні наноструктурні матеріали: електроосадження, шарове розмелення, інтенсивна пластична деформація (ІПД) і компактування. Усі ці методи дозволяють синтезувати метали з розмірами кристалітів приблизно 100 нм, а інколи й до	
В Інженерна теорія Я. Ю. Бейгельзімера	10		
Г Кінетичний підхід до опису нерівноважних систем.	12		
IV Модель нерівноважної еволюційної термодинаміки фрагментації твердих тіл Л. С. Метлова	13		
А Феноменологічні основи нерівноважної еволюційної термодинаміки	13		



5 нм. Проте застосування саме методів ПД дає змогу одержати об'ємні металеві зразки з практично безпороистою субмікрокристалічною (СМК) чи нанокристалічною (НК) структурою, що неможливо звичайною термомеханічною обробкою [2–5].

Фізичні процеси, що протікають у твердих тілах під час ПД, з одного боку, складні, а з іншого — є універсальними [19, 20]. Ряд експериментальних досліджень зводяться до вивчення стаціонарних (кінцевих) структурних станів та їхніх властивостей, не аналізуючи при цьому природи фізичних процесів, що протікають під час їх формування. Крім того, є роботи, у яких стикаються з проблемою утворення нестабільних конфігурацій чи прояву аномальних ефектів у властивостях матеріалу, що виникають за рахунок зміни умов обробки (швидкість, температура, прикладений тиск, кількість проходів та ін.) [21–25]. Отже, визначення оптимального температурно-силового режиму обробки для матеріалів різних класів є ключовим фактором для формування стійкої СМК- чи НК-структури під час ПД. Таким чином, розроблення теоретичних моделей [9], що дають змогу описати процес фрагментації металевої структури під час ПД та встановити необхідні умови для отримання рівноважних СМК- чи НК-структур з унікальним поєднанням великої міцності та підвищеної пластичності [10], має вагоме значення.

На сьогодні відомо декілька теорій [7, 9, 26–31], що описують явища, які відбуваються під час ПД, проте досі не існує єдиної, яка здатна охопити повну картину. Кожен із методів описує свій аспект закономірностей процесів деформації й руйнування твердих тіл, і всі разом вони складають повніше уявлення про об'єкт дослідження. Зокрема, існує багато питань, що стосуються ПД, які на сьогодні ще не розв'язані, а методи дослідження часто становлять узагальнення експериментальних даних. Наприклад, теоретично не прогнозовано можливість формування декількох стаціонарних “граничних” структур — мінімального середнього розміру зерен [11], не пояснено фрактальної поведінки, що спостерігаються під час експериментів, не визначено умов виникнення різних режимів фрагментації, не описано кінетики фазових перетворень, не знайдено умов формування стійких граничних структур, не розкрито ролі температурних аспектів проблеми, впливу флуктуацій основних параметрів тощо, що є актуальним з практичного погляду. Отже, дослідження фрагментації металів чи сплавів під час ПД є актуальною проблемою. Зокрема, в огляді окрему увагу зосереджено на узагальненій феноменологічній теорії [32–34], що в межах єдиного підходу дозволяє відобразити ефекти та процеси, що протікають під час подрібнення полікристалічної структури металів.

Метою оглядової роботи є опис структурних та кінетичних явищ, що відбуваються протягом фрагментації металів чи сплавів під час ПД, досліджень стійкості сформованих станів полікристалічних металів, впливу основних параметрів технологічного процесу на еволюцію структурних дефектів.

У розділі II описано й пояснено експериментально спостережувані ефекти, що відбуваються під час ПД та можуть бути використані під час синтезування металів різних класів для 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 чи виникнення проблем під час експлуатації.

У розділі III розглянуто теоретичні дослідження, що вказують на конкретні параметри, які істотно впливають на формування НК- чи СМК-станів у металах чи сплавах. Відображено різні режими фрагментації та можливі сценарії поведінки структурних дефектів, що може зіграти важливу роль з погляду технічних застосувань. Зокрема, наведено кінетичні рівняння, що дозволяють описати формування стійких СМК- або НК-структур із необхідною густиною дефектів і стабільними фізико-механічними властивостями.

Модель ПД на основі нерівноважної еволюційної термодинаміки (НЕТ) (розділ IV) передбачає можливість виникнення нових режимів фрагментації залежно від параметрів термодинамічної системи і, відповідно, формування НК- чи СМК-матеріалів, що мають бажані фізико-механічні властивості. Одержані результати в цілому добре пояснюють та дають змогу прогнозувати експериментальні дані. У висновках анонсовано перспективні напрями для подальших досліджень.

II. МЕТОДИ ОТРИМАННЯ НАНОСТРУКТУРНИХ МАТЕРІАЛІВ

Останнім часом усе більшу увагу приділяють дослідженню та технологіям отримання ультрадрібнозернистих та наноструктурних матеріалів. Це зумовлено розвитком сучасного технологічного процесу: збільшенням силових та термічних навантажень, наявністю різноманітних та агресивних середовищ експлуатації, високою собівартістю виготовлення тощо. Отже, виникла потреба в 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 різної методики обробки. За допомогою першого методу під час розкладання, осадження чи синтезу речовини отримують різноманітні наночастинки (твердотільні нанокластери, нанопроволоки, нанотрубки), плівки та покриття, нанорозмірні порошки та компактовані з них матеріали, поміж ними й нанокомпозити, що утворені введенням наночастинок до різних матриць. Другий метод полягає в тому, що наноструктурування відбувається внаслідок сильного впливу на отримані іншими метода-

ми мікроструктурні матеріали: відпалення аморфних сплавів, ПД вихідної металевої структури, механохімічний синтез тощо [3]. У цьому разі відбувається формування композитних матеріалів, що містять різні аморфні та кристалічні нанофази [35–39].

Прийнято вважати, що одним із найголовніших структурних факторів матеріалу є розмір зерен, оскільки він охоплює майже всі аспекти фізичної та механічної поведінки полікристалічних матеріалів, а також їхню хімічну реакцію на навколишнє середовище [4]. Керування розмірами зерен уже тривалий час визначається основним способом виготовлення матеріалів із бажаними властивостями, що мають достатню міцність, твердість, тріщиностійкість, пружність, пластичність, в'язкість, зносостійкість тощо. При цьому відомо, що більшість із згаданих властивостей сильно залежать від зменшення розміру зерен у структурі матеріалу [3, 4]. Отож, весь час триває розробка та удосконалення технологій виготовлення й обробки матеріалів, що дозволяють поліпшити якість продукції.

Об'єктами наномасштабу є утворення декількох, у крайньому разі, десятків нанометрів. Але щодо металів, підданих ПД, вважається, що зерна близько 100 нанометрів — це вже об'єкти наномасштабу. В цьому разі дрібнішого розміру зерна досягти важко [11]. Межу подрібнення зерен ставить сама природа ПД, а саме: стаціонарний стан, після досягнення якого дефектна структура перестає змінюватися, принаймні з урахуванням тільки стандартних дефектів — дислокацій і меж зерен (МЗ). З огляду на це властивості, які досягаються в стаціонарному стані, і є властивостями наномасштабу для металів під час ПД.

Застосування ультрадисперсних порошоків і їх консолідація дає змогу отримати зразки заданої форми та розмірів з необхідними структурами та властивостями. Консолідація повинна забезпечити, з одного боку, практично повне ущільнення структурних елементів зразка (тобто забезпечити відсутність у структурі макро- та мікропор), а з іншого — зберегти нанорозмірність матеріалу (у спечених матеріалах розмір зерен повинен бути меншим від 100 нм). Проте створення щільних зразків є складною проблемою, оскільки пресування НК - порошоків недостатнє [3, 14].

Найбільш продуктивним способом отримання великої кількості НК-порошків різних матеріалів є механічне розмелення. Під час механічного подрібнення порошоків чи їхньої суміші у млині й наступного компактування відбувається подрібнення та пластична деформація речовин, прискорюється масоперенесення, а також виконується перемішування компонентів на атомарному рівні (механічне легування). Унаслідок механічного впливу в межах контакту твердої речовини відбувається сильна пластична деформація. Релаксація виниклих напружень може відбуватися за рахунок виділення тепла, утворення нової поверхні, виникнення різних дефектів та активації різних хімічних реакцій у твердій фазі [3]. Схема цього процесу показана на рис. 1.

Використання згаданих вище методів дозволяє

отримати зразки, що мають нанорозмірну зернисту структуру. Проте в низці випадків постають проблеми, що пов'язані з усуненням залишкової пористості під час компактування, із введенням домішок під час їх консолідації, а також зі збільшенням розмірів одержаних зразків та практичним використанням цих методів.

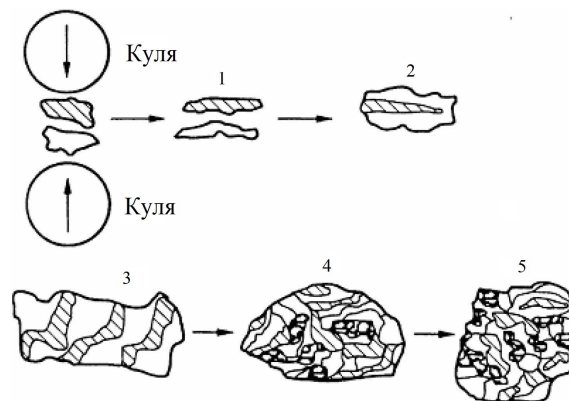


Рис. 1. Схема впливу на матеріал під час кульового розмелення [3]: 1–5 — стадії механічного легування двох металів; 2, 3 — механічне сплавлення; 4, 5 — утворення наноструктур і нових сполук.

Більшість із зазначених проблем розв'язуються завдяки застосуванню методів ПД. Використовуючи ці методи, вдалося одержати об'ємні наноструктурні зразки та заготовки для найрізноманітніших металів і сплавів, включно з промисловими сплавами та інтерметалідами [2–5]. Останніми роками методи ПД також використовують для обробки деяких композитних матеріалів і навіть напівпровідників [35–39]. Крім того, методи ПД успішно застосовують для компактування порошоків, зокрема ультрадисперсних [3, 14].

А. Основні схеми та особливості обробки методами інтенсивної пластичної деформації

Застосування методів ПД є ефективним способом отримання об'ємних (макроскопічних) металевих зразків із практично безпористою СМК- чи НК-структурою, які неможливо одержати звичайною термомеханічною обробкою [2–5, 40]. В умовах прикладення великих напружень за відносно низьких температур відбувається подрібнення мікроструктури зразка до субмікро- (100–1000 нм) або нанорозмірів (< 100 нм) з висококутовою розорієнтацією кристалічних ґраток сусідніх зерен (до 20°). Отримані матеріали придатні до механічних випробувань і мають здебільшого високі фізичні та механічні властивості.

Загалом для отримання наноструктур в об'ємних зразках та заготовках методи ПД повинні задовольняти такі вимоги [3–5]: 1) забезпечувати можливість отримання ультрадрібнозернистих структур, що мають переважно висококутові МЗ, оскільки саме в цьо-

му разі 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 механічні пошкодження чи руйнування.

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

Як зазначалось раніше, відмінною рисою обробки ПД 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 для виняткового подрібнення зернистої структури. На сьогодні існує декілька варіантів методів ПД: кручення під високим тиском (чи інтенсивна пластична деформація крученням (ІПДК)) [3, 14, 17, 40–45], рівноканальне кутове пресування (РККП) [15, 29, 40, 46, 47], прокатка [48], багаторазовий вигин [26] і випрямлення смуги [3], всебічне кування [16, 45], гвинтова екструзія (ГЕ) [5, 8, 12] тощо. Ці методи ґрунтуються на багаторазовій інтенсивній пластичній деформації 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.

Рівноканальне кутове пресування. На сьогодні цей метод є найбільш високорозвинутою технологією обробки (див. схему на рис. 2,а), оскільки дає змогу отримати об'ємні наноструктурні заготовки з різноманітних металевих матеріалів [3–5, 40]. Метод РККП деформує масивні зразки за допомогою принципу простого зсуву під час протискання заготовки через два канали, що мають однакові поперечні перерізи та перетинаються зазвичай під прямим кутом (90°).

Особливість цього методу полягає в тому, що розміри поперечного перерізу заготовки до і після обробки незмінні, що дозволяє повторно пресувати та накопичити великі деформації. При цьому обертання заготовки довкола осі пресування між проходами дає змогу реалізувати різні варіанти РККП, що здебільшого приводять до різних результатів з огляду на сформовану мікроструктуру та фактуру [3, 4, 40]. Отже, загальний ступінь деформації залежить від кількості проходів та орієнтації заготовки під час кожного проходу. Зазвичай, зміцнення матеріалу досягає стадії

насичення вже після декількох циклів. За необхідності під час обробки матеріалів, що важко деформуються, деформація здійснюється за підвищених температур.

Зазначимо, що основні переваги та концепцію методу РККП, включно з механікою екструзії, виведенням оптимальних умов процесу, що передбачають баланс між тертям, геометрією інструмента, шляхом деформації та ефективністю фрагментації зерна, сформулював В. Сегал у серії ранніх публікацій [29, 46, 47], які згодом розвинули інші дослідники [2].

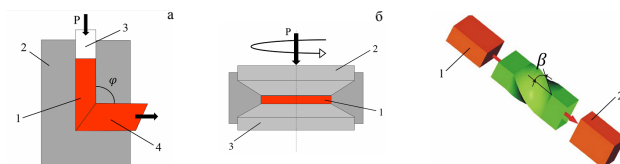


Рис. 2. Принципові схеми методів ПД: а — РККП: 1 — зразок; 2 — оснащення; 3 — пуансон; 4 — в'язкопластичне середовище [3]; б — кручення під високим тиском: 1— зразок; 2 — пуансон; 3 — оснащення [4, 5]; в — процес ГЕ: 1, 2 — зразок відповідно до і після обробки [8].

Кручення під високим тиском. Принципова схема ІПДК зображена на рис. 2,б. Цей метод базується на концепції наковальні Бріджмена [45], що полягає в реалізації взаємного повороту площин кристалічної структури зразка на кути від десятків градусів до декількох оборотів із застосуванням нормального тиску в 10–15 ГПа. Отже, метод є результатом комбінації високого тиску (діапазон ГПа) з обертальним напруженням. На сьогодні цю методику оцінюють багато дослідників як таку, що дозволяє найефективніше подрібнити зерно [4, 11].

Із застосуванням ІПДК в умовах гідростатичного стиснення, згідно з наведеною схемою на рис. 2,б, 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) у декілька ГПа. За рахунок обертання бойків виникають сили поверхневого тертя, що викликають зсувні деформації. При цьому 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, 40]. У зв'язку з обмеженням розміру зразків, які одержано за допомогою ІПДК під високим тиском, їх використовують переважно для дослідницьких цілей.

Гвинтова екструзія. Цей метод є ще одним варіантом простого процесу деформації зсуву, який запропонував Я. Бейгельзімер [5, 8, 12]. Особливість методу ГЕ полягає в поєднанні процесів екструзії і ІПДК. При цьому заготовка притискається

через оснащення, що має гвинтову лінію осі каналу (рис. 2,в). Тобто зразок під час обробки проходить через матрицю “скручування”. Незважаючи на те, що перевагою цього методу є висока пропускна здатність, проте він страждає від практично такої ж загальної проблеми, як і метод ШДК під високим тиском: деформація, що виникає у структурі матеріалу, — неоднорідна та має найменше значення вздовж осі екструзії. Дослідження Д. Орлова та співавторів [49] показали, що для отримання ультрадрібнозернистої структури метод ГЕ є менш ефективним порівняно з РККП та ШДК.

Формування композитів і матеріалів із внутрішньою архітектурою. Останнім часом найбільше зацікавлення в дослідженнях ШД викликає формування цими методами багатомасштабних структур, властивості яких визначаються не тільки нанорівнем. Тому сучасний тренд їх розвитку полягає у формуванні композитів і матеріалів із внутрішньою архітектурою [35–39]. Зокрема, у роботі [35] показано, що фундаментальний механізм перемішування під час деформації не обов’язково однаковий у всіх системах, але залежить також від різниці міцності фаз і, відповідно, поведінки деформації. Крім того, на кінцеві металеві композити, композити з металевою матрицею та композити з аморфною металевою матрицею впливає деформаційний шлях та початкова структура [36]. Зазначено [37], що формування композитних зразків, що приводить до локального розчинення або дисперсійного зміцнення або навіть до хімічних реакцій, може бути досягнуто за рахунок синергетичного ефекту індукованого процесами далекодійного потоку матеріалу та прискорення дифузії. У роботі [38] спостерігалось, що ШДК біметалевого ламінату може спричинити вихрову складчастість шарів, зумовлену пластичними нестійкостями, завдяки локалізації деформації зсуву. Крім того, розглянуто два шляхи формування просторових структур металевих композитів: 1) біфуркації за пластичної течії, що включають утворення під час зсуву полос, складок та періодичних вихрів; 2) самоорганізація, спричинена неоднорідними хімічними реакціями під час пластичного деформування середовища [39]. Ці механізми потрібно розуміти інженерам-матеріалознавцям, щоб мати змогу контролювати синтез у результаті ШД.

В. Експериментальні дослідження дефектної мікроструктури під час інтенсивної пластичної деформації

. На сьогодні маємо багато експериментальних напрацювань, що спрямовані на дослідження закономірностей отримання НК-структур у різних металах і сплавах у процесі ШД. Зокрема, виявлено, що для різних груп металів є деякий граничний мінімальний розмір зерен. Подальша фрагментація нижче від цього значення неможлива [3, 11, 14–16]. Так, для відносно пластичних та малозміцнених металів і сплавів (як-от: Al, Cu, Ni, Fe і ін.) застосування ме-

тоду РККП не дозволяє сформувати ультрадисперсну зернисту структуру з розмірами, дрібнішими за 0.3 – 1 мкм [3, 15]. Навіть найсильніші застосування деформацій зсуву під високим тиском не дають змоги отримати структуру з розмірами кристалітів, дрібнішими за 50–200 нм [3, 14, 17].

Проте останні дослідження показують, що кристалічна ґратка таких субмікронних зерен, своєю чергою, має специфічну будову. Унаслідок великих пружних спотворень кристаліти фрагментуються на ділянки когерентного розсіювання, які за рентгенівським даними мають значно менші розміри ($\ll 100$ нм) [3, 14, 41, 42].

Крім того, є ряд матеріалів, у яких застосування методів ШД дозволяє одержати граничний мінімальний розмір зерен, що становить 10–30 нм [3, 15, 50, 51]. Переважно такими матеріалами є різноманітні інтерметалідні з’єднання, сплави метал–металоїд, перехідні метали, напівпровідникові матеріали, сплави зі 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 ефективне застосування ШДК за консолідації порошків, що дозволяють одержати об’ємні наноструктурні зразки з високою густиною дефектів [3, 14]. Наприклад, дослідження ШДК порошкової міді продемонструвало формування рівноважної НК-структури із середнім розміром зерен 100 нм та густиною дислокацій $2 \times 10^{15} \text{ м}^{-2}$ [14]. Крім того, основна увага роботи [14] спрямована на дослідження механізмів, закономірностей та умов росту зерен у НК міді під час обробки ШДК. Отже, показано, що застосування попереднього компактування під тиском 0.35 ГПа за кімнатної температури привело до отримання зразків у вигляді передкомпактів, що мають досить велику об’ємну долю пор 0.64 (рис. 3,а). Підвищення тиску попереднього компактування до 1.95 ГПа дало змогу знизити пористість до величини 0.24 (рис. 3,б). При цьому середній розмір порошків у передкомпактах становив 37 мкм. Водночас виявлено, що застосування ШДК для консолідації порошків за температури 150°C спричинило підвищення середнього розміру зерен до 167 нм (рис. 3,в).

Відомо, що тверді й тугоплавкі матеріали краще піддаються наноструктуруванню, однак переважно в умовах дії високого тиску зі зсувом. Найчастіше у сплавах розмір зерен в умовах ШД може бути значно меншим [3, 15, 17], ніж у чистих металах, що пояснюється гальмуванням процесів рекристалізації за рахунок виникнення вторинних фаз (атомів домішок). У роботі А. А. Мазилкіна та інш. [17] досліджено структуру та фазовий склад сплавів Al–Zn, Al–Mg і Al–Mg–Zn у станах до і після ШДК. При цьому електронно-мікроскопічний аналіз свідчить, що внаслідок деформації зерен структура сплавів зазнала значного подрібнення. На рис. 4 зображено структуру трьох сплавів Al–10% Zn, Al–Mg і Al–Zn–Mg після деформації за $N = 5$ (кількість оборотів). У структу-

рі сплаву Al-10% Zn наявні зерна двох фаз: (Al) із розміром 600 нм (до деформації — 500 мкм) і (Zn) із розміром 200 нм (до деформації — 3–5 мкм). Структура сплаву визначається низькою для такої великої деформації густиною дислокацій 10^{12} 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 ($> 10^{14} \text{ м}^{-2}$) [17]. Отже, робота демонструє, що ПДК спричинила формування фазового стану, що порівняно з недеформованим станом є ближчим до термодинамічно рівноважного.

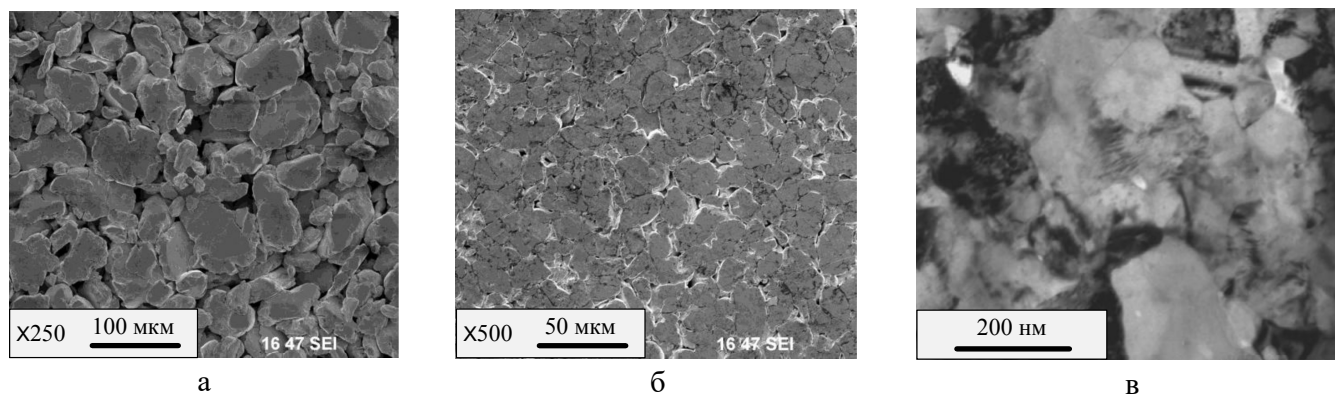


Рис. 3. Світлопільне зображення: а, б — мікронних порошоків міді підданих криогенному помолу й компактуванню під тиском 0.35 ГПа та 1.95 ГПа; в — структура після ПДК за температури 150°C, що ілюструє середній розмір зерен 167 нм [14].

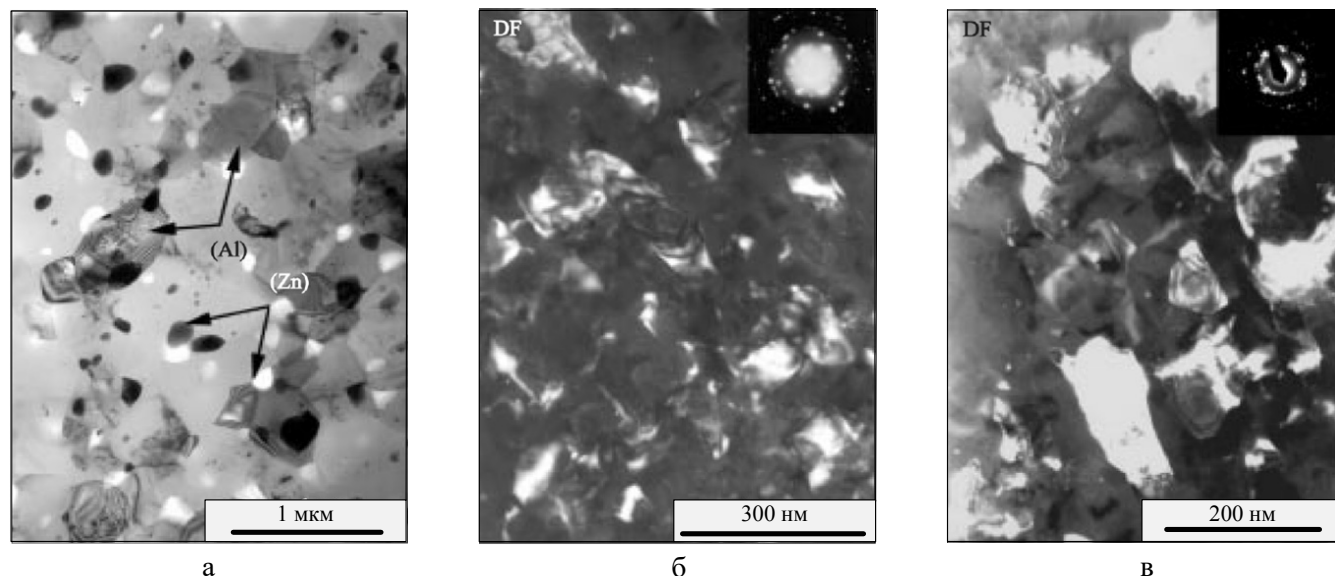


Рис. 4. Мікроструктура сплавів: а — Al-10% Zn після ПД, стрілками показано зерна (Al) та (Zn); б — Al-5% Mg; в — Al-2% Mg-5% Zn [17].

Одним з основних структурних параметрів матеріалів є розмір зерна, що згідно з законом Голла-Петча визначає величину напружень плинності [1, 3–5]. Для температур, що істотно нижчі від температури плавлення, твердість речовини пропорційна межі плинності. Згідно з законом Голла-Петча твердість наноструктур має зростати зі зменшенням розміру нанокристаліта. Проте в наноматеріалах цей закон порушується, адже дифузійні процеси, що відбуваються на межах зерен, дають вагомий внесок у процес деформації. Отже, властивості міцності наноматеріалів визначаються співвідношенням між межею плинності та швидкістю деформації з урахуванням зростання

коефіцієнта дифузії за зменшення розміру елементів структури.

Важливими чинниками, що визначають формування субмікро- чи нанозерен під час ПД, є умови деформування: швидкість, температура, прикладений тиск, кількість проходів. Отже, одержані розміри зерен граничні лише для певного набору параметрів. Найвні дослідження, що вивчають структурні перетворення та властивості металів у процесі ПД, проте дуже часто стикаємося з проблемою формування нестабільних конфігурацій чи прояву аномальних ефектів у властивостях матеріалу, що виникають за рахунок зміни температури чи інтенсивності обробки

(величини прикладеного тиску та зсуву під тиском) [21–25, 52]. На сьогодні питання добору оптимального температурно-силового режиму обробки для матеріалів різних класів, що забезпечує найбільш сприятливі умови для формування рівноважних СМК- чи НК-структур з рівномірним розподілом розмірів зерен та високими фізико-механічними властивостями, усе ще відкрите.

III. ТЕОРЕТИЧНІ ПРЕДСТАВЛЕННЯ ПРОЦЕСУ ФРАГМЕНТАЦІЇ ТВЕРДИХ ТІЛ

Фізичні процеси, що відбуваються у твердих тілах під час ПД, мають специфічні особливості та пов'язані з наявністю в їхній структурі порушень у вигляді цілої ієрархії структурних дефектів [3–5, 40]. Більшість експериментальних досліджень зводяться до вивчення кінцевих (стаціонарних, граничних) структур та відповідних властивостей матеріалів без аналізу при цьому природи фізичних процесів, що протікають під час їх утворення. Крім того, отримана інформація, на жаль, має неоднозначний характер, оскільки в багатьох експериментах спостерігається формування здебільшого різних структурних станів із розмірами зерен близько 100 нм за однакових умов обробки для одних і тих же матеріалів. Отже, розвиток теоретичних моделей, що дозволяють описати формування стаціонарної структури, набуває вагомого значення.

На сьогодні відомо декілька теоретичних методів опису процесу ПД [9]. Зазначимо, що в роботі Л. С. Метлова [32] зроблено докладний огляд методів. Наведемо найбільш поширені з них.

A. Теорія фрагментації дислокаційних структур Г. О. Малигіна

Теорія фрагментації дислокаційних структур Г. О. Малигіна, яка, фактично, описує формування висококутових МЗ під час великих пластичних деформацій, базується на механізмі деформування, в основу якого покладено уявлення про самоорганізацію дислокацій [28, 53]. Деформації, що виникають у процесі РККП та в умовах ударного навантаження матеріалу, приводять до генерації великої кількості геометрично необхідних дислокацій (ГНД), 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 [54], на опис формування більшого дефекту — межі зерна.

Основою моделі є нелінійне рівняння реакційно-дифузійного типу для густини дислокацій, що включає процеси розмноження, анігіляції й дифузії дислокацій з урахуванням сильного поглинання дислокацій

межами нанозерен [28, 53]

$$\frac{\partial \rho(x, t)}{\partial t} = \lambda_D u \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2} + \frac{u}{\lambda_m} \rho + \delta_f u \rho^{3/2} - \frac{\rho}{t_g} - h_a u \rho^2, \quad (1)$$

де $\rho(x, t)$ — залежна від часу t і координати x в напрямку поширення хвилі густина дислокацій, u — швидкість дислокацій, λ_D — характерна відстань дифузії дислокацій у наноматеріалі, λ_m і $1/(\delta_f \rho^{1/2})$ — довжина пробігу дислокацій між актами їх розмноження на перешкодах недеформаційного ($\lambda_m^{-1} = \beta/d + \delta_f \rho^{1/2}$) та деформаційного (ліс дислокацій з густиною ρ) походження відповідно, $\beta \approx 1$ і $\delta_f \approx 10^{-2}$, ρ_G — густина ГНД на фронті ударної хвилі, t_g — час анігіляції дислокацій в межах нанозерен, h_a — характерна відстань анігіляції гвинтових ділянок дислокаційних петель в об'ємі нанозерен механізмом поперечного ковзання.

У безрозмірних змінній $\psi = \rho/\rho_f$ і координатах $X = x/\Lambda_0$, $T = t/t_0$ рівняння (1) набуває вигляду

$$\frac{\partial \psi(X, T)}{\partial T} = \frac{\partial^2 \psi}{\partial X^2} + a\psi + \psi^{3/2} - \psi^2, \quad (2)$$

де $\rho_f = (\delta_f/bk_a)^2$,

$$\Lambda_0 = \delta_f^{-1}(\lambda_D b k_a)^{1/2}, \quad \lambda_D = (1/d + 1/\rho_G^{1/2})^{-1},$$

$$t_0 = \delta_f^{-2}(bk_a/u), \quad a = \delta_f^{-2} \left(\delta_f b \rho_G^{1/2} + \beta \frac{b}{d} - \frac{b}{ut_g} \right) k_a, \quad (3)$$

де $k_a = h_a/b$ — коефіцієнт анігіляції дислокацій.

Розв'язок рівняння (2) обчислюємо у вигляді біжучої хвилі

$$\psi(X, T) = \frac{1}{[f + C \exp(qX - hT)]^2}, \quad (4)$$

де $C = f$ — стала інтегрування,

$$f(a) = \frac{1}{2a} [(1 + 4a)^{1/2} - 1],$$

$$q(a) = \left[\frac{a}{6} \left(\frac{2}{(1 + 4a)^{1/2} - 1} + 1 \right) \right]^{1/2}, \quad (5)$$

$$h(a) = \frac{2a}{3} \left[\frac{1}{(1 + 4a)^{1/2} - 1} + \frac{5}{4} \right].$$

У розмірних одиницях рівняння (4) визначається

$$\rho(x, t) = \frac{\rho_m}{[1 + \exp(\frac{x-Ut}{\omega})]^2}, \quad (6)$$

де U — швидкість хвилі густини дислокацій, ω — ширина її фронту, $t_\omega = \omega/U$ — час формування хвилі, ρ_m — максимальна густина дислокацій у хвилі,

$$U = [h(a)/q(a)](\lambda_D/bk_a)^{1/2} \delta_f u, \\ \omega = \delta_f^{-1}(\lambda_D b k_a)^{1/2}/q(a), \quad (7)$$

$$t_\omega = t_0/h(a), \quad \rho_m = \rho_f/f(a)^2.$$

Оскільки параметри λ_D та a , згідно з позначеннями (3), залежать від розміру нанозерен d і густини ГНД $\rho_G = \rho_G(P)$ і, отже, від тиску P , параметри хвилі (7) також залежать від розміру нанозерен і тиску у хвилі.

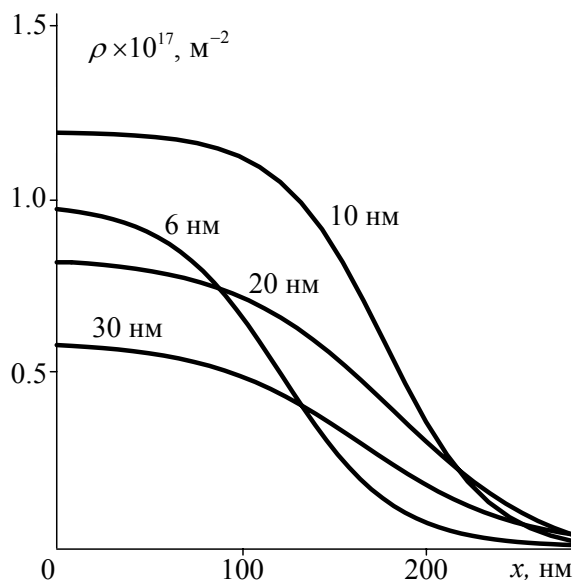


Рис. 5. Залежність густини дислокацій в ударній хвилі в НК матеріалі (міді) з різним розміром зерен (указано біля кривих) при тиску 10 ГПа від координати x у напрямку поширення хвилі. Розрахунок відповідно до рівнянь (6), (7) [28].

На рис. 5 наведено результати розрахунку згідно зі співвідношеннями (6), (7) залежностей густини дислокацій в НК міді ($b = 0.256$ нм, $E = 128$ ГПа, $\nu = 0.34$, $k_a = 2$, $B = 10^{-4}$ Па·с) від координати x за тиску $\sigma = 10$ ГПа, часі $t = 2.5$ нс і варіюванні величини нанозерен d (указані біля кривих). Видно, що відповідно до результатів моделювання густина дислокацій в НК міді становить $\sim 10^{17}$ м $^{-2}$, тобто вона на два порядки вища за густини дислокацій у мікросталічних зразках міді. Також видно, що залежність густини дислокацій від розміру нанозерен має неоднозначний характер.

Отже, теорія описує розмноження, анігіляції та дифузії дислокацій під впливом обробки з урахуванням кінетичних особливостей НК матеріалів, а саме: сильного поглинання дислокацій межами нанозерен. Однак викладена теорія дещо порушує ієрархічну послідовність подій, оскільки логічніше уявити формування МЗ внаслідок самоорганізації пористих структур, а не елементарних дислокацій. На 4-й і 5-й стадії зміцнення матеріалу [55] знову сформована структура повинна перетинати кілька елементарних дислокаційних осередків, зберігши при цьому деяку цілісність. Можна вважати, що дислокаціям вигідніше покинути об'єм дислокаційної комірки чи зерен та "осісти" на їхніх межах. Саме останнє має здатність

підвищити рівень надлишкової енергії (нерівноважності) та привести в результаті до формування нової межі, що відбувається завдяки процесу релаксації надлишкової енергії меж.

Б. Теорія диспергування у процесі інтенсивної пластичної деформації В. І. Копилова та В. М. Чувільдєєва

Теорія диспергування матеріалу у процесі ПД В. І. Копилова та В. М. Чувільдєєва [29, 30, 56] базується на конкретному механізмі деформування, в основу якого покладені уявлення про міжзеренні прослизання й аномально високу дифузію на МЗ. Крім того, в основу теорії покладені уявлення про вільний об'єм, що запозичено із теорії аморфних матеріалів.

В основу феноменологічної моделі покладені ідеї Н. Ф. Мотта про "острівцеву" структуру меж та ідеї Г. Зегера і А. Шотткі про можливість описання властивостей меж за допомогою терміносполуки "вільний об'єм" [29, 30, 56]. Привабливість використання останнього для побудови єдиної теорії автор пояснює тим, що вільний об'єм, з одного боку, є мікроскопічним параметром, що відображає структурний стан МЗ, а з іншого — зручний феноменологічний параметр, який можна легко визначити через термодинамічні константи та безпосередньо з експериментів. Отже, автор стверджує, що вільний об'єм межі за абсолютного нуля температури — геометрично необхідний вільний об'єм, що задає вихідний (нульовий) рівень нерівноважності межі.

При цьому носіями вільного об'єму є й інші дефекти кристалічної ґратки: вакансії та дислокації. Поглинання цих дефектів межею за визначених умов спричиняє перерозподіл вільного об'єму дефектів і збільшення вільного об'єму межі. Межа, що визначається надлишковим (щодо геометрично необхідного) вільним об'ємом, який утворився за рахунок поглинання інших дефектів, може бути названа нерівноважною. Мірою нерівноважності в цьому разі виступає величина надлишкового вільного об'єму.

У моделі враховано три типи дефектів: граничні дислокації, дислокації орієнтаційної невідповідності (ДОН) та, відповідно, МЗ. Отже, опис процесу деформації, повернення та рекристалізації матеріалів полягає в розв'язанні системи рівнянь, що відображають кінетику накопичення вказаних дефектів на МЗ [29, 30, 56]. Температурну залежність коефіцієнта зернограничної дифузії в МЗ обчислюємо

$$D_b^* = D_{b0}^* \exp(-Q_b^*/kT), \quad (8)$$

де D_{b0}^* та Q_b^* — передекспоненціальний множник та енергія активації дифузії на нерівноважних МЗ.

Вирази для розрахунку енергії активації дифузії і передекспоненціального множника коефіцієнта дифузії в нерівноважних МЗ мають вигляд:

$$Q_b^* = W_1[\alpha^*/(\alpha + \Delta\alpha) - 1] + W_2[(\alpha^*/(\alpha + \Delta\alpha))^{1/2} - 1] + Q_L, \quad (9)$$

$$D_{b0}^* = \varphi D_{L0} \exp\{Z_1[\alpha^*/(\alpha + \Delta\alpha) - 1] + Z_2[(\alpha^*/(\alpha + \Delta\alpha))^{1/2} - 1]\}, \quad (10)$$

де $\varphi = 0.1$, W_1 , W_2 , Z_1 і Z_2 — числові коефіцієнти, що залежать від термодинамічних і кристалогеометричних параметрів матеріалу [29].

Рівняння, що зв'язує величину надлишкового вільного об'єму МЗ $\Delta\alpha$ з густиною розподілених у межі дефектів (густиною дислокацій орієнтаційної невідповідності ρ_b і густиною вектора Бюргерса ковзних компонент делокалізованих дислокацій ω_t):

$$\Delta\alpha = (\rho_b \Delta b + \omega_t)/\omega_0, \quad \omega_0 = 0.1. \quad (11)$$

Кінетика накопичення ДОН (ρ_b) з нормальною Δb_n і тангенціальною Δb_t компонентами вектора Бюргерса (ковзних ω_t і нормальних ω_n компонент вектора Бюргерса делокалізованих дислокацій у межах зерен за наявності потоку кристалічних дислокацій I) визначається за допомогою системи рівнянь:

$$\begin{aligned} \dot{\rho}_b &= I - \rho_b/t_1, \\ \dot{\omega}_t &= \rho_b \Delta b_t/t_1 - \omega_t/t_2, \end{aligned} \quad (12)$$

$$\dot{\omega}_n = \rho_b \Delta b_n/t_1 - \omega_n/t_3.$$

Зазначимо, що, зважаючи на рівність $\varpi = \sum_{i=1}^k \omega_n^i = \psi \omega_n$, останнє рівняння описує кінетику накопичення стикових дисклінацій потужністю ϖ , $\psi \approx 0.01 - 0.1$.

Вирази, що описують час дифузійного виходу з межі ДОН (t_1), часи дифузійного виходу з межі ковзних компонент делокалізованих дислокацій (t_2) та зі стиків зерен дисклінаційних дефектів, що пов'язані з нормальними компонентами делокалізованих дислокацій (t_3):

$$\begin{aligned} t_1 &= A_1 kT/(\rho_b \Delta b)^3 D_b^* \delta G, \\ t_2 &= (d/b)^2 kT/C_1 \omega_t D_b^* \delta G, \\ t_3 &= A_1 (d/b)^3 kT/D_b^* \delta G. \end{aligned} \quad (13)$$

Позначення та числові значення параметрів наведено у роботі [29].

Величину внутрішнього поля напружень σ_i , що виникає за допомогою стаціонарної густини розподілених у МЗ ДОН і ковзних компонент делокалізованих дислокацій, визначаємо так:

$$\sigma_i = \varphi_1 G \rho_b^{st} \Delta b + \varphi_2 G \omega_t; \quad \varphi_1, \varphi_2 \sim 1. \quad (14)$$

При цьому середній розмір зерна, що має густину ДОН рівну густині ковзних компонент делокалізованих дислокацій обчислюється згідно:

$$\left(\frac{d_1}{b}\right) = \left(\frac{D_b^* \delta G}{kT}\right) \left(\frac{1}{\dot{\varepsilon}_v}\right)^{1/4} \xi_1^{1/2}. \quad (15)$$

Вирази для матеріалів із розміром зерна $d > d_1$ та $d < d_1$ відповідно мають вигляд:

$$D_b^* = D_b \exp(\omega_t^{st}/\omega_0 \alpha_B), \quad (16)$$

$$D_b^* = D_b \exp(\rho_b^{st} \Delta b/\omega_0 \alpha_B), \quad (17)$$

де α_B визначаємо за формулою:

$$\alpha_B^{-1} = \frac{\alpha^*}{\alpha^2} \left(\frac{W_1}{kT} - \frac{Z_1}{k} + \frac{1}{2} \left(\frac{W_2}{kT} - \frac{Z_2}{k} \right) \left(\frac{\alpha}{\alpha^*} \right) \right). \quad (18)$$

В. М. Чувільдєєв вважає, що запропонована теорія є ефективною для матеріалознавства, оскільки визначає можливість знаходити підходи до виконання різноманітних практичних завдань. Проте цей підхід, на нашу думку, має дещо суперечливу природу. Так, в експериментальній роботі В. О. Хоніка [57] поставлено під сумнів той факт, що вільний об'єм можна використовувати як визначальний термодинамічний параметр для опису аморфних сплавів, принаймні в тому класичному трактуванні, яке прийняте в переважній більшості праць. Справді, надлишковий об'єм визначає міру збільшення середньої відстані між атомами, що приводить до зростання середньої потенціальної енергії цих атомів, які розійшлися на відстань більшу від рівноважної. Однак у твердому тілі збільшення відстані між одними атомами через замкнутість силових ліній неминуче спричиняє зменшення відстаней між іншими атомами (локальне стиснення). Причому, оскільки зміна потенціальної енергії відштовхування атомів має різкіший характер, ніж потенціальна енергія слабкого ван-дер-ваальсівського притягання, то за меншої зміни об'єму за рахунок стиснення потенціальна енергія, що збережена в цій ділянці, може значно перевищувати потенціальну енергію, яка накопичена в ділянці надлишкового вільного об'єму. Тому дуже важливо в теорії враховувати не лише надлишковий вільний об'єм, але й "спресований об'єм", якого не вистачає, чого дотепер ніхто не робив. Крім того, у роботах А. М. Глезера [1, 20] говориться, що вільний об'єм має принаймні двомодову структуру за розмірами. При цьому аморфні матеріали, що мають більш дрібноструктурований вільний об'єм, є пластичнішими, тоді як із крупноструктурованим вільним об'ємом — крихкішими. Очевидно, що співвідношення між вільним і спресованим об'ємами для них буде різним.

До того ж роль власне дифузійного масоперенесення в теорії В. М. Чувільдєєва виглядає перебільшеною. На нашу думку, під дією надлишкової енергії нерівноважної межі й пов'язаних з нею внутрішніх напружень відбувається перебудова структури матеріалу, в якій МЗ беруть активну участь. Межа істо-

тно полегшує таку перебудову, забезпечуючи додаткові ступені свободи. При цьому сам процес перебудови супроводжується масопереносом, проте він не пов'язаний безпосередньо з надлишковою концентрацією атомів.

В. Інженерна теорія Я. Ю. Бейгельзімера

Відома теорія, що базується на узагальненні експериментальних даних у ділянці ПД, — інженерна теорія Я. Ю. Бейгельзімера. В її основі лежать прості механічні уявлення про процес деформування [5, 7, 31]. Система лінійних кінетичних рівнянь конструюється на підставі узагальнення результатів і закономірностей, що спостерігаються в експериментах.

Так, у роботі [31] розглянуто виникнення дезорієнтованих меж у кристалах та утворення мікропор як додаткового механізму релаксації внутрішньої деформації під час ПД полікристалів. При цьому кінетичні рівняння одержуємо з припущення про самоподібність процесу фрагментації зерна. Як основні параметри виступають величини, що характеризують структуру матеріалу: загальну площу меж фрагментів та загальний об'єм мікропор на одиницю об'єму матеріалу.

Згідно з викладеною теорією, фізичною моделлю межі ядра є часткова дисклінація, що являє собою рухомий концентратор напруження, яке, власне, приводить до вигину кристалічної ґратки, унаслідок чого формуються висококутової межі. Крім того, за визначенням, загальна довжина меж S на одиницю площі поперечного перерізу типового елемента об'єму дозволяє вимірювати міру розвитку висококутових меж. При цьому загальний об'єм пор на одиницю об'єму матеріалу є кількісним показником міри руйнування типового елемента об'єму. Вважається, що кожний фрагмент являє собою групу комірок, що оточені великокутовими межами. Останні формують деяку систему з середнім розміром $L \approx 1/(S_0 + S)$, де S_0 — довжина МЗ на одиницю площі поперечного перерізу. Своєю чергою, межі комірок утворюють деяку зону з розміром зерен d_c та великокутовими межами, що розподілені вздовж системи. Звідси d_c — мінімальний розмір висококутової межі чи найменший розмір фрагмента. Саме цей розмір визначається складом матеріалу, температурою та швидкістю деформації, проте не залежить від початкової структури матеріалу та типу навантаження. Вважається, що самоподібність процесу розвитку геометричної множини спричиняє утворення фрактальних структур [58, 59]. Звідки впливає, що самоподібність процесу фрагментації зерна приводить до утворення фрактальної структури, яка складається з множини висококутових меж. Саме це спостереження використано в роботах Я. Ю. Бейгельзімера та співавторів [7, 31] для виявлення співвідношення Голла–Петча.

Отже, модель базується на схематизованих уявленнях про фізику великих пластичних деформацій. Че-

рез блокування зрушень по площинах ковзання дислокації накопичуються в так званих зонах накопичення (ЗН). У результаті, в ЗН відбувається локальне викривлення кристалічної ґратки, яка релаксує або шляхом утворення “зародка” висококутової межі (дисклінації), або шляхом народження мікропори. Імовірність формування зародка висококутової межі визначаємо співвідношенням:

$$P = 1 - \exp(-\gamma/\gamma_b), \quad (19)$$

де γ_b — середній степінь монотонної деформації, яка необхідна для того, щоб інтенсивність дотичних напружень у ЗН досягала свого критичного значення [31]. Звідси визначаємо співвідношення для приросту dN_b кількості зародків висококутових меж в одиниці площі перерізу полікристала, що обумовлений приростом деформації зсуву $d\gamma$:

$$dN_b = Nd\gamma/\gamma_b, \quad (20)$$

де N — кількість ЗН на одиницю площі перерізу полікристалу. Згідно зі співвідношенням (19) ймовірність утворення зародка висококутової межі безперервно зростає зі збільшенням деформації зсуву γ , тобто співвідношення (19) і (20) не враховують порогового характеру фрагментації.

Отже, система диференціальних рівнянь, що описує спільний ефект подрібнення металевих зерен та руйнування металу під час пластичної деформації під тиском, має вигляд [31]:

$$\begin{aligned} \frac{d\bar{N}}{d\gamma} &= (C_1 + C_2 C_5 \bar{N}_b) F(\bar{S}) - (C_3 + C_4) \bar{N}, \\ \frac{d\bar{N}_b}{d\gamma} &= C_4 \bar{N} - C_5 \bar{N}_b, \\ \frac{d\bar{S}}{d\gamma} &= \frac{C_5 \bar{N}_b}{\bar{S} + \bar{S}_0}, \\ \frac{d\Theta}{d\gamma} &= C_3 \bar{N}^{3/2} d_c^{-3} \nu - C_6 \Theta, \end{aligned} \quad (21)$$

де C_1 — параметр, що залежить від складу та структури матеріалу, температури та швидкості деформації; γ — інтенсивність деформації зсуву; C_2 — середня кількість перешкод на одне з'єднання меж, Θ — пористість матеріалу. Коефіцієнти C_3 та C_4 визначаємо як

$$C_3 = \frac{1}{\gamma_p(p)}, \quad C_4 = \frac{1}{\gamma_b}. \quad (22)$$

Значення γ_p збільшується разом із величиною гідростатичного тиску p у типовому елементарному об'ємі матеріалу.

Співвідношення $F(S)$ відображає частину фрагментів, що дробляться під час ПД, та визначається згідно з виразом

$$F(S) = \begin{cases} 1, & \text{якщо } S/S_c < \exp(-k\sqrt{20}), \\ \frac{S/S_c - 1}{\exp(k\sqrt{20}) - 1}, & \text{якщо } \exp(-k\sqrt{20}) \leq S/S_c < 1, \\ 0, & \text{якщо } S/S_c \geq 1. \end{cases} \quad (23)$$

Зазначимо, що одержані кінетичні рівняння (21) визначаємо для заданих N , N_b , S і Θ . При цьому N — кількість ЗН на одиницю площі, а N_b — кількість висококутових утворень на одиницю площі перерізу полікристала. Під визначенням ЗН маємо на увазі такі ділянки (зони) кристалів, де накопичення дислокацій приводить до виникнення мікропор чи нової гілки високої кутової межі.

Отже, наведена (репрезентована) в роботах [7, 31] модель описує основні закономірності ПД металів, що мають високу енергію дефекту упаковки. При цьому проведений аналіз моделі надає низку рекомендацій щодо підвищення ефективності процесів ПД. Підхід Я. Ю. Бейгельзімера дозволяє описати широкий клас процесів, що спостерігаються під час ПД. Так, математичне моделювання процесу ГЕ дало змогу визначити умови отримання композита типу СМК-оболонка-крупнокристалічна серцевина [7]. Дослідження демонструє умови, які впливають на формування міцності матеріалу за збереження досить великих деформацій однорідного (рівномірного) подовження. Головна ідея запропонованого методу отримання СМК-композита полягає у зменшенні інтенсивності фрагментації металів під час циклічної деформації. Цей ефект проявляється у зменшенні скупчення дислокацій під час реверсування деформації, що приводить до формування висококутових меж. При цьому математичне моделювання процесу обробки металу методом ГЕ дозволяє визначити параметри обробки, що забезпечують формування СМК-структур у зовнішньому шарі зразка, зберігаючи великі зерна в осьовій зоні.

Як основу для прогнозування структури і властивостей металів під час великих деформацій використано описану вище модель [31], що в подальшому отримала назву RVA-моделі (RVA: Refinement versus Voids Accumulation). Вона дає змогу розрахувати такі важливі показники структури, як характерний розмір зерен D і мікропористість (пошкодженість) металу Θ , що визначають його механічні характеристики. Як зазначалось раніше, співвідношення (19) і (20), які визначаються для RVA-моделі [31], не враховують порогового характеру фрагментації. Щоб відобразити в RVA-моделі ефект порогості фрагментації у співвідношенні (20) вводимо поправку, що дає вираз [7]:

$$dN_b = \eta(\gamma - \gamma_b) N d\gamma / \gamma_b, \quad (24)$$

де $\eta(x)$ — функція Гевісайда,

$$\eta(x) = \begin{cases} 1, & \text{якщо } x \geq 0, \\ 0, & \text{якщо } x < 0. \end{cases}$$

За $\gamma \geq \gamma_b$ співвідношення (24) набирає вигляду (20), а при $\gamma \leq \gamma_b$ маємо $dN_b = 0$, тобто в цьому випадку зародки висококутових меж не утворюються і фрагментація відсутня.

Отже, відповідно до наведеної моделі у зразку після досить великої кількості проходів повинні утворитися дві зони: приосьова з крупнокристалічною структурою та зовнішня з СМК-структурою [7]. Результати розрахунків, що показані на рис. 6, демонструють це припущення. Видно, що для точок перетину, в яких γ_1 не перевищує 0.7, фрагментація зерен відсутня. При цьому для точок перетину з разовою деформацією $\gamma_1 = 0.9$ і більше характерна інтенсивна фрагментація, починаючи вже з першого проходу ГЕ. Отже, перехідний шар між крупнокристалічною і СМК зонами являє собою прошарок, що утворений точками з разовою деформацією $0.7 < \gamma_1 < 0.9$.

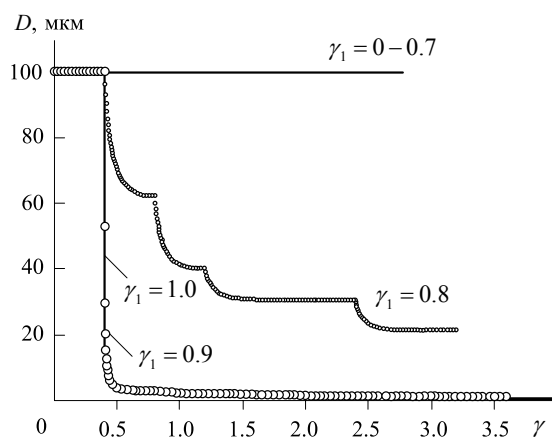


Рис. 6. Залежність середнього розміру зерна D від деформації зсуву γ за чотири проходи ГЕ для точок перетину, що розрізняються разовою деформацією γ_1 [7].

Проте в межах інженерного підходу Я.Ю. Бейгельзімера важко пояснити багато важливих особливостей процесу ПД, зокрема, він не може описати формування “граничної” структури металів — мінімального середнього розміру зерен. Для того щоб описати фрагментацію зерен, у теорію “руками” вводимо деякий притягальний аттрактор, який примушує систе-

му прямувати до стану з потрібним (заданим) розміром зерен. Крім того, не встановлений зв'язок між утворенням декількох типів дефектів, як-от: МЗ та дислокація. Саме взаємодія цих дефектів описує виникнення та формування стаціонарних ділянок (зон) на фазовій діаграмі [32, 33, 60–67].

Водночас логічніше припустити, що досягнення граничного розміру зерна внаслідок диспергування під час ШД є загальною властивістю досягнення матеріалу стаціонарного стану і може бути досліджено в загальному вигляді незалежно від конкретного механізму деформування. У зв'язку з цим у наступному розділі IV викладено основи запропонованої Л. С. Метловим узагальненої теорії процесу ШД, яка ґрунтується на мезоскопічній нерівноважній термодинаміці. Формування стаціонарної структури в межах 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 [32–34, 60–68]. Особливість цього підходу полягає в тому, що, на відміну від звичайної термодинаміки, яка є безструктурною теорією, аналогічно до мезоскопічної термодинаміки [69, 70], дефектну структуру враховуємо шляхом явного введення відповідних доданків у базовому термодинамічному співвідношенні. Мезоскопічність моделі полягає в тому, що як структурні елементи середування в такому розгляді можуть бути досить великі утворення типу зерен, МЗ, скупчення дислокацій тощо.

Г. Кінетичний підхід до опису нерівноважних систем

Перебудова дефектної структури під час обробки методами ШД відбувається в сильно нерівноважних умовах, тому вважаємо доцільним розгляд методів та підходів, що використовують у межах нерівноважної термодинаміки. Більшість підходів переважно різняться способом урахування дисипативних ефектів, що дозволяють описати нерівноважні процеси та явища [32, 71–73]. Є декілька способів опису еволюції нерівноважних термодинамічних систем у термінах локально-рівноважної формалізації, що доповнена за рахунок уведення нових параметрів. Моделювання спостережуваних макроявищ, що враховують різні структурні рівні, зводиться до з'ясування особливостей кінетики цих параметрів [72]. Зокрема, одержання кінетичних рівнянь є важливим завданням будь-якого підходу. Формалізація цієї проблеми може бути як у межах механіки суцільного середовища, так і на основі методів статистичної механіки. Особливе місце в цьому ряду займає варіант нерівноважної термодинаміки, який запропонував Л. Д. Ландау [74, 75]. На введений ним внутрішній змінний стану у формі параметра порядку (ПП) була побудована якісна теорія фазових переходів. У сучасній науці цей напрям продовжений у теоріях фазових полів [76, 77].

Згідно з кінетичним представленням поведінки реальних твердих тіл залежить не лише від середніх

характеристик теплового руху, але також від відхилень їх від середніх значень, тобто від флуктуацій, особливо від високоенергетичних флуктуацій [78, 79]. Врахування флуктуацій у багатьох випадках принципово важливе і визначає рівень досліджень у царині нерівноважних процесів. Водночас проблема нерівноважної перебудови структури твердого тіла має, окрім флуктуаційного, ще й силовий аспект. Флуктуації важливі для повільних процесів, коли є досить часу, аби виникла флуктуація відповідного масштабу. В разі швидких (інтенсивних) процесів відповідного масштабу теплові флуктуації не встигають виникнути, і розглядати такі процеси в першому наближенні можна в межах теорії середнього поля.

Внутрішні процеси, що протікають у твердому тілі, є складною картиною взаємних переходів і перетворень енергії, хоча їхня природа не завжди конкретизується [80]. Дисипація енергії за участю дефектів має динамічний характер і супроводжується перехідними явищами типу акустичної емісії. Кінетична енергія, що виникла в момент утворення дефекту, спочатку випромінюється у формі низькочастотних хвиль, які можна розглядати як частину загального релаксаційного процесу [81]. Розсіяння цих хвиль на рівноважних теплових коливаннях завершує релаксацію за участю дефектів. Отже, енергія переходить у хаотичну теплову форму після ряду проміжних стадій. Серед робіт, методологічно близьких НЕТ, звертають на себе увагу дослідження [82–87]. Кінетична картина переходів у цьому підході ґрунтується на принципах самоорганізації та використанні трьохпараметричної системи рівнянь Лоренца, які спершу призначалися для зображення інших фізичних явищ. Зокрема, загальну теорію застосовували для моделювання ультратонкої плівки мастила — явища близького за своєю природою до ШД [88–90].

Згідно з [32] під час використання канонічної форми еволюційних рівнянь Ландау виникає низка принципівих запитань, зокрема, наскільки виправдане застосування цього типу рівнянь для опису всіх типів нерівноважних параметрів. Відомо, що Ландау запропонував їх для опису еволюції лише одного типу нерівноважного параметра, а саме: ПП. Параметр порядку є мірою ступеня наближеності стану системи до симетрії тієї або іншої фази. Отже, симетрія фазового стану має вирішальну роль у визначенні ПП. Проте зазначимо, що симетрія не є фундаментальним базовим принципом для спрощення будь-якої задачі, як це часто прийнято вважати. Вона наслідок принципу мінімуму енергії системи. Не система прямує до мінімуму, щоб досягти максимально можливої симетрії, а симетрія формується внаслідок досягнення системою мінімуму своєї енергії, що можливо за найбільш оптимальної упаковки частинок, що її складають. Власне останнє приводить до деякої симетрії в їх розташуванні. Для розв'язання нашої проблеми це означає, що термодинамічний процес не обов'язково повинен супроводжуватися явними ознаками симетрії і характеризуватися параметром порядку, він може бути описаний за допомогою інших енергетичних співвідно-

шень і величин (наприклад, тими, що наведено нижче). Водночас цілком очевидно, що за наявності явної симетрії рівень нерівноважності збільшуватиметься.

IV. МОДЕЛЬ НЕРІВНОВАЖНОЇ ЕВОЛЮЦІЙНОЇ ТЕРМОДИНАМІКИ ФРАГМЕНТАЦІЇ ТВЕРДИХ ТІЛ Л. С. МЕТЛОВА

A. Феноменологічні основи нерівноважної еволюційної термодинаміки

Як відомо, звичайна термодинаміка втрачає свою силу під час розгляду дуже малих систем та об'ємів. Намагаючись установити детальну термодинамічну рівновагу між двома нанозернами, класична термодинаміка працює все гірше з поступовим зменшенням розміру зерен. Тоді як НЕТ, навпаки, не прагне встановити детальної рівноваги між кожним нанозерном, а тому працює набагато краще з переходом до дрібніших зерен за рахунок того, що кількість елементів середовища в об'ємі зростає. Отже, перейдемо до розгляду основних положень НЕТ [32–34].

Непорушність закону збереження енергії для системи, яка складається з великої кількості частинок, математично виражається першим законом термодинаміки

$$dU = \delta A + \delta Q, \quad (25)$$

де dU — приріст внутрішньої енергії деякої фізичної системи, δA — величина роботи зовнішніх сил, δQ — потік теплоти. Це співвідношення звучить так: внутрішня енергія деякої фізичної системи змінюється за рахунок виконаної над системою роботи і передачі деякої теплоти [80]. Отже, 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 (25) відповідає визначенню простих систем, оскільки є лише два види обміну енергією, що враховуються, із зовнішніми системами, — це механічний і тепловий обміни.

Укажемо важливу особливість у співвідношенні (25): тільки приріст внутрішньої енергії записаний через повний диференціал, на відміну від приростів роботи й 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

$$dU = -pdV + TdS. \quad (26)$$

Ясно, що тут V — об'єм системи, S — ентропія, $\delta A = -pdV$ і $\delta Q = TdS$, і за визначенням повного диференціала dU

$$p = -\frac{\partial U}{\partial V}, \quad T = \frac{\partial U}{\partial S}, \quad (27)$$

тобто змінні p (тиск) і T (температура) знаходимо простим диференціюванням внутрішньої енергії за умови явної аналітичної форми. Співвідношення (25) справедливе, власне кажучи, лише для нескінченно повільних зовнішніх процесів, настільки повільних, що внутрішні процеси встигають у кожен момент часу прийти до рівноважного стану. Якщо ж зовнішні процеси протікають помітно швидше, то внутрішні не встигають урівноважитися, що, очевидно, необхідно враховувати в енергетичному представленні.

Поведінка твердих тіл різної природи за сильних зовнішніх механічних дій супроводжується руйнуванням та фрагментацією. З погляду термодинаміки ці процеси розрізняються між собою лише каналами дисипації енергії, отриманої від роботи зовнішніх сил. Наприклад, у квазікрихких тілах енергія від зовнішнього механічного напруження йде на генерацію мікротріщин, їхній розвиток і злиття [91], у випадку ПД металів — утворення нових висококутових меж і, як наслідок, подрібнення (фрагментації) зерен [3, 5, 45, 92]. Зазначимо, що всі ці явища сильно нерівноважні, тому для їх опису потрібно розвивати спеціальний підхід.

Згідно з підходом Л. С. Метлова процес фрагментації є стаціонарним, нерівноважні потоки, що виникають, збалансовані й слабо впливають на протікання квазірівноважних процесів [32]. Система розбивається на дві відносно слабо взаємозв'язані підсистеми, в одній з яких по межах фрагментів відбуваються сильно нерівноважні процеси, а в другій в об'ємі частинок процеси деформації мають квазірівноважний характер. Унаслідок цього частинки формально можна описувати в наближенні розрідженого газу. У такому разі під сильною взаємодією частинок потрібно вважати взаємодію, що супроводжується подрібненням зерен, а під слабкою — взаємодію, за якої подрібнення зерен відсутнє або істотно сповільнюється. З досягненням режиму ПД, за якого розміри частинок стабілізуються і перестають змінюватися, активізується зона слабкої взаємодії. Отже, саме для опису ефекту досягнення граничного розміру зерна та близької до неї ділянки будуть справедливі принципи квазірівноважної термодинаміки, що наведено в розглянутому нижче підході [32].

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

$$du = \delta A + \delta Q = \sigma_{ij} \delta \varepsilon_{ij} + T \delta s', \quad (28)$$

де u — густина внутрішньої енергії; δA , δQ — прирости роботи зовнішніх сил та теплоти; σ_{ij} , ε_{ij} — тензори напружень і деформацій; T , s' — температура та густина ентропії (отримана за рахунок зовнішніх джерел тепла) [32, 33]. Перша частина рівності (28) відображає закон збереження енергії та справедлива як для рівноважних (оборотних), так і для нерівноважних (необоротних) процесів. Друга частина рівняння (28) виконується лише для рівноважних процесів, оскільки для її запису використовуємо специфічно визначену величину — ентропію. Тут приріст ентропії від зовнішніх джерел цілком збігається з приростом

$\delta s = \delta s'$ (власні джерела ентропії відсутні). При цьому змінні ε_{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 записати як суму оборотної та необоротної частин [32, 33]:

$$du = \sigma_{ij} d\varepsilon_{ij}^e + \sigma_{ij} \delta \varepsilon_{ij}^n + T \delta s'. \quad (29)$$

Очевидно, що пружні деформації ε_{ij}^e в одержаному співвідношенні за своєю природою є оборотними, тому їхній приріст записаний через повний диференціал. Необоротна частина роботи зовнішнього напруження (другий доданок у (29)) йде на утворення об'єктів з надлишковою потенціальною енергією — теплових фононів, мікротріщин, МЗ тощо, які й визначають канали дисипації енергії. Якщо є лише тепловий канал дисипації, то вся необоротна частина роботи перетворюється на тепло, і потрібно покласти

$$\sigma_{ij} \delta \varepsilon_{ij}^n = \delta Q^{in} \equiv T \delta s'', \quad (30)$$

де s'' — додаткове утворення ентропії за рахунок внутрішніх процесів [32, 33].

У роботах [32, 33] зазначено, що δQ — це частина приросту теплової енергії за рахунок зовнішніх джерел у формі теплових потоків від термостатів, тоді як δQ^{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 ототожені з процесами, що протікають на структурних дефектах. Оскільки ця частина ентропії генерується у формі квазімонохроматичних фононів (акустична емісія) в момент зародження і руху дефектів, вона перебуває в нерівноважній формі. Отже, 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 в нерівноважній формі та якій належить релаксувати в наступні моменти часу. Об'єднавши обидві частини рівноважної теплової енергії від зовнішніх і внутрішніх джерел ($\delta Q + \delta Q^{in} \equiv T \delta s$), одержуємо термодинамічну тотожність, що об'єднує перший і другий закони термодинаміки для простих тіл [32, 33]:

$$du = \sigma_{ij} d\varepsilon_{ij}^e + T \delta s' + T \delta s'' = \sigma_{ij} d\varepsilon_{ij}^e + T \delta s. \quad (31)$$

Вважається, що кожна окрема частина ентропії від зовнішніх і внутрішніх джерел не може визначати стан середовища, тому їхні прирости записані через δ -символи.

Оскільки не вся теплота, що виникла за рахунок внутрішніх джерел, здатна повернутися до рівноважного стану (наприклад, тепловий рух у формі нерівноважних фононів), то використовувати рівноважну температуру, що забезпечує виконання закону збереження енергії по всій системі, ми не маємо змоги. Не-

обхідно у співвідношенні (31) ввести додатковий доданок для нерівноважної частини теплового руху [32]

$$du = \sigma_{ij} d\varepsilon_{ij}^e + T \delta s + \tilde{T} \delta \tilde{s}, \quad (32)$$

де введено нерівноважні температуру \tilde{T} та ентропію \tilde{s} . Останній доданок враховує загальний енергетичний баланс, оскільки внутрішню енергію визначають усі види внутрішнього руху незалежно від того, у якій формі (рівноважній чи нерівноважній) вони перебувають. При цьому нерівноважна теплота може бути в системі у вигляді теплових флуктуацій чи за рахунок генерації нерівноважних фононів, що виникають унаслідок утворення та руху структурних дефектів.

Якщо необоротна частина роботи йде не лише на розігрівання, але й на створення високоенергетичних об'єктів типу різного роду дефектів, і зокрема, додаткових меж при ПД, то тотожність (30) потрібно переписати згідно з видом у [32]:

$$\sigma_{ij} \delta \varepsilon_{ij}^n \equiv T \delta s'' + \varphi \delta h, \quad (33)$$

де φ і h — зв'язана пара термодинамічних змінних, яка характеризує дефектність матеріалу (поки вважається наявністю дефектів лише одного типу, змінні φ та h — статичні температура та ентропія). Згідно з аналізом фазового переходу другого роду (ФП2) (див. підрозділ IV Б) ця інтерпретація має фізичний сенс. Отже, термодинамічна тотожність для тіла з одним видом дефектів матиме вигляд

$$du = \sigma_{ij} d\varepsilon_{ij}^e + T \delta s + \tilde{T} \delta \tilde{s} + \varphi \delta h. \quad (34)$$

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.

Усі параметри, що входять до виразу (34), належать до вимірюваних, крім ентропії. Через повні диференціали записано природи тих величин, що є функціями стану системи. Ці параметри, за визначенням, рівноважні. Інші величини нерівноважні, і взагалі не належать до функцій стану системи. За аналогією з ПП еволюцію нерівноважних параметрів можна описати за допомогою системи еволюційних рівнянь типу Ландау–Халатнікова, що, на відміну від співвідношення (34), враховує N типів дефектів, проте в термінах ефективної внутрішньої енергії [32]

$$\frac{\partial \tilde{s}_l}{\partial t} = \gamma_{sl} \left(\frac{\partial u}{\partial \tilde{s}_l} - \tilde{T}_{ls} \right) = \gamma_{sl} (T_{ls} - \tilde{T}_{ls}), \quad (35)$$

$$\frac{\partial h_l}{\partial t} = \gamma_{hl} \left(\frac{\partial u}{\partial h_l} - \varphi_{ls} \right) = \gamma_{hl} (\varphi_l - \varphi_{ls}). \quad (36)$$

Похідні від внутрішньої енергії за нерівноважними змінними є узагальненими термодинамічними силами, а \tilde{T}_{ls} і φ_{ls} задають значення нерівноважних параметрів l -ї дефектної підсистеми у стаціонарному стані. При цьому, термодинамічні сили збігаються з поточними значеннями дуальних термодинамічних

змінних, які входять до термодинамічної “тотожності” (34). Змінна \tilde{T} на відміну від рівноважної температури може набувати як додатних, так і від’ємних значень. Змінну φ можна інтерпретувати як нерівноважну енергію дефекту, яка також може набувати як додатних, так і від’ємних значень, проте в стаціонарних станах повинна бути тільки додатною величиною (що спостерігається).

Статична температура φ буде тим вищою, що вища енергія кожного атома межі й що “товща” сама межа, тобто що вищий рівень її нерівноважності. Рівень нерівноважності меж підвищується зі зростанням рівня фрагментації матеріалу. Тому між статичною температурою і зворотною величиною розміру зерна в разі ПД наявна деяка монотонна залежність. Малі значення φ відповідають крупнішим зернам у межі монокристала, великі значення цього параметра відповідають дрібнішому зерну, а нескінченно великі значення — аморфному стану в разі ПД.

Отже, Л. С. Метлов установив, що ефективна внутрішня енергія визначається однозначною функцією всіх своїх аргументів [32]

$$u = u(\varepsilon_{ij}^e, s, \tilde{s}, h). \quad (37)$$

Формально всі змінні, що визначають термодинамічний стан системи, є рівноправними. Це дає нам змогу замінити у співвідношенні (34) природи нерівноважних змінних їхніми повними диференціалами:

$$du = \sigma_{ij} d\varepsilon_{ij}^e + T ds + \tilde{T} d\tilde{s} + \varphi dh. \quad (38)$$

Співвідношення (38) визначає узагальнене співвідношення Гіббса у разі сильно нерівноважних процесів генерації структурних дефектів у твердих тілах. Причому в класичній термодинаміці таке співвідношення має форму нерівності [80], проте явне врахування основних каналів дисипації енергії дозволило знизити ступінь нерівності й записати це співвідношення як рівність.

Б. Зв’язок нерівноважної еволюційної термодинаміки та теорії фазових переходів Ландау

Теорію Л. Д. Ландау ФП2 запропоновано в середині ХХ ст. [74], але зацікавлення нею не слабшає дотепер, наприклад, у теорії фазових полів [76, 77]. Пізніше О. З. Паташинський та В. Л. Покровський у роботі [93] встановили дуже важливий однозначний зв’язок між ПП і конфігураційною ентропією. Такий зв’язок дозволяє вибрати як незалежну термодинамічну змінну одну з цих величин. А отже дає змогу викласти теорію ФП2, наприклад, не в термінах ПП, а в термінах конфігураційної ентропії. Отже, можливе використання аналогічного підходу для широкого діапазону явищ, зокрема і 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 як термодинамічний потенціал фігурує ефективна внутрішня енергія. Водночас показано, що обидва підходи є еквівалентними. Згідно з підходом НЕТ, ефективну внутрішню енергію зображено розвиненням у ряд за ПП та його похідними. За допомогою перетворення Лежандра можна здійснювати перехід відповідно до виразу

$$F = U - TS \quad (39)$$

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

Отже, відповідно до зв’язку між конфігураційною ентропією і ПП, автор роботи [32] встановив перетворення між вільною та внутрішньою енергією та подав (запропонував) альтернативну форму еволюційних рівнянь у термінах ефективної внутрішньої енергії. Крім того, вважається, що конфігураційна ентропія, концентрація дефектів і параметр порядку в різній формі характеризують ту саму структурну реальність твердого тіла — його дефектність [94]. У разі фазових переходів дефектність може бути пов’язана зі спонтанним виникненням зародків нової фази [33].

В. Двомодова дворівнева модель інтенсивної пластичної деформації

Новий підхід Л. С. Метлова, феноменологічні основи якого викладено в попередніх підрозділах, дозволяє одночасно описати процеси енергетичного накопичування, що відбуваються за рахунок виконання роботи, і дії зовнішніх теплових джерел та процеси релаксації під час ПД металів [32–34, 60–68]. Згідно з теорією, релаксація системи здійснюється двома шляхами: зростанням кількості структурних дефектів і утворенням теплоти (через продукування ентропії). Енергетичне накопичування розпочинається з першого процесу, що приводить до загального зростання внутрішньої енергії за рахунок дефектності. Це зростання безпосередньо викликано збільшенням густини дефектів h і середньої енергії дефекту φ , що пропорційно внеску φh . Із часом утворення дефектів перестає бути ефективним механізмом дисипації енергії й рівноважний (стаціонарний) стан системи буде сформований поблизу максимального значення ефективної внутрішньої енергії за дефектністю матеріалу.

Для опису ПД металів Л. С. Метлов запропонував такі моделі: одномодову дворівневу модель [95], двомодову однорівневу модель [96, 97] та двомодову дворівневу модель [33, 34, 60–68]. Кількість мод визначається кількістю стійких стаціонарних розв’язків або максимумів внутрішньої енергії — одна в наближенні квадратичного полінома і дві в наближенні полінома четвертого степеня. Кількість рівнів визначається кількістю типів врахованих дефектів.

Вважається, що основним структурним дефектом під час ПД є МЗ. Водночас дислокації відіграють не менш важливу роль у фрагментації, оскільки вони є “будівельним матеріалом” і через зміцнення матеріалу

створюють силові умови для формування МЗ. Отже, у термінах дводефектної моделі, що враховує внески

густини дефектів до четвертого степеня, густина ефективної внутрішньої енергії має вигляд [32, 33, 61–67]:

$$u(h_g, h_D) = u_0 + \sum_{l=g, D} \left(\varphi_{0l} h_l - \frac{1}{2} \varphi_{1l} h_l^2 + \frac{1}{3} \varphi_{2l} h_l^3 - \frac{1}{4} \varphi_{3l} h_l^4 \right) + \varphi_{gD} h_g h_D, \quad (40)$$

де u_0 , φ_{kl} ($k = 0, 1, 2, 3$, $l = g, D$), φ_{gD} — коефіцієнти, які залежать від рівноважних змінних s і ε_{ij}^e , як від керувальних параметрів; h_g , h_D — густини МЗ та дислокацій¹; значення індексів $m = g$ відносяться до МЗ, а $m = D$ — до дислокацій:

$$u_0 = \frac{1}{2} \lambda (\varepsilon_{ii}^e)^2 + \mu (\varepsilon_{ij}^e)^2 + \beta s^2, \quad (41)$$

$$\varphi_{0l} = \varphi_{0l}^* + g_l \varepsilon_{ii}^e + \left(\frac{1}{2} \bar{\lambda}_l (\varepsilon_{ii}^e)^2 + \bar{\mu}_l (\varepsilon_{ij}^e)^2 \right) - \beta_l s + \beta_{gl} s \varepsilon_{ij}^e, \quad (42)$$

$$\varphi_{1l} = \varphi_{1l}^* - 2e_l \varepsilon_{ii}^e. \quad (43)$$

Тут λ , μ — сталі Ламе; ε_{ii}^e , $(\varepsilon_{ij}^e)^2$ — перший та другий інваріанти тензора пружних деформацій; φ_{0l}^* , g_l , φ_{1l}^* , β , β_l , β_{gl} , e_l — феноменологічні параметри моделі; $\bar{\lambda}_l$, $\bar{\mu}_l$ — пружні сталі, які відображають зменшення відповідних пружних модулів, що зумовлено існуванням структурних дефектів.

Фізичний зміст і приблизний діапазон зміни параметрів теорії, тобто коефіцієнтів полінома, яким апроксимується внутрішня енергія, встановлюємо для кожного випадку окремо: так, як це описано в роботі [33]. Водночас точних експериментальних методів визначення параметрів теорії на сьогодні нема, як і нефеноменологічних теорій, які могли б обчислити їх із перших принципів чи з моделей глибшого мікроскопічного рівня.

Система еволюційних рівнянь (35), (36) для цієї задачі набирає вигляду

$$\begin{aligned} \frac{\partial h_D}{\partial t} &= -\gamma_{h_D} [\varphi_{1D}(h_D - h_{Ds}) + \varphi_{gD}(h_g - h_{gs})], \\ \frac{\partial h_g}{\partial t} &= -\gamma_{h_g} [\varphi_{gD}(h_D - h_{Ds}) + \Phi(h_g - h_{gs})], \end{aligned} \quad (44)$$

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

Відомо, що закон зміцнення є наслідком зменшення рухливості дислокацій за рахунок гальмування різними дефектами. У межах теорії НЕТ закон зміцнення описуємо співвідношенням Тейлора

$$\sigma = \alpha \mu b \sqrt{h_D}, \quad (45)$$

де α — коефіцієнт, який набуває значення з інтервалу 0.2 – 1; μ — модуль зсуву; b — вектор Бюргерса

[33, 60]. Ця залежність використовується як додаткова до енергетичних і кінетичних співвідношень, що записані вище, та дозволяє встановити самоузгоджений зворотний зв'язок між процесом утворення граничної структури та умовою її формування у вигляді діючих напружень σ .

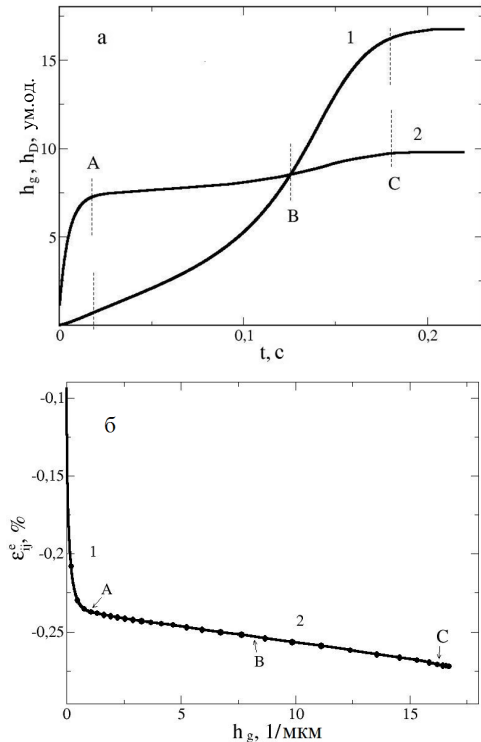


Рис. 7. Закономірності дефектоутворення під час СПД: а — кінетика дефектів: 1 — густина МЗ; 2 — густина дислокацій; б — закон зміцнення (45): 1 — ділянка закону Голла-Петча; 2 — ділянка лінійного закону зміцнення. Точки А, В, С вказують моменти формування найбільш характерних ділянок кінетичних кривих і кривої зміцнення. Маркери на кривій зміцнення нанесені через однакові проміжки часу [33].

¹ Припускається, що розмір зерна набуває приблизне значення обернено пропорційне h_g (тобто $d \sim 1/h_g$).

Із рис. 7,а видно [33], що під час структурно-фазового переходу (СФП) кінетика МЗ і дислокацій тісно зв'язані між собою. Спершу 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. Отже, дислокації услід за межами зерен повторюють у цій ділянці (зоні) форму кривої СФП, але в більш ослабленій мірі. Стадійність деформації під час ПД виявляється також і в зміні характеру закону зміцнення (45) на різних стадіях процесу. На першій стадії (ділянка 1, рис. 7,б) закон зміцнення може бути апроксимований законом Голла–Петча. На пізнішій стадії закон має витриманий на великій ділянці лінійний характер (ділянка 2, рис. 7,б).

V. ВИСНОВКИ

Аналіз літературних джерел дозволяє зробити такі висновки. Є багато експериментальних досліджень фрагментації металів чи сплавів під час обробки методами інтенсивної пластичної деформації. Проте питання визначення оптимальних температурно-силових умов обробки, що дадуть змогу забезпечити найсприятливіші умови для формування рівноважних субмікро- чи нанокристалічних структур з високими фізико-механічними властивостями, залишається нерозв'язаним. Переважну кількість робіт присвячено вивченню стаціонарних (сформованих після завершення обробки) структур і відповідних властивостей матеріалів, тоді як фізичні процеси, що протікають під час інтенсивної пластичної деформації, залишаються “за бортом” уваги. У зв'язку з цим розроблення теоретичних підходів для опису структурних переходів під час обробки інтенсивною пластичною деформацією є актуальним. Розглянуті базові теорії розкривають певні закономірності у процесах деформації та руйнування твердих тіл, а також загалом складають повнішу та об'єктивішну картину про предмет дослідження.

Низку питань, що стосуються інтенсивної пластичної деформації, на сьогодні не розв'язано, а методи дослідження головно зводяться до узагальнення

експериментальних результатів. Зокрема, нема теоретичного опису формування “граничної” структури металів (мінімального середнього розміру зерен) та утворення декількох граничних структур. Крім того, не пояснено низку явищ, які спостерігаються під час експериментів: реалізація фазових перетворень, наявність різних режимів фрагментації, утворення фрактальних структур, виникнення нестабільних конфігурацій, температурні ефекти, вплив флуктуацій основних параметрів тощо. Отже, у запропонованому огляді наведено узагальнену термодинамічну модель фрагментації матеріалів, що описує подрібнення полікристалічної структури та формування стаціонарних субмікро- чи нанокристалічних структур.

Новий підхід нерівноважної еволюційної термодинаміки, який ґрунтується на поєднанні техніки фазових перетворень Ландау в наближенні середнього поля й положень класичної нерівноважної термодинаміки, дозволяє удосконалити опис систем під час інтенсивної пластичної деформації. У межах цієї методології вже розглянуто низку задач із кінетики дефектів, зокрема й з використанням законів зміцнення. Водночас потребують подальшого дослідження такі аспекти: формування граничних субмікро- чи нанокристалічних структур декількох типів; фазова динаміка нерівноважних змінних під час їх утворення; вплив часів релаксації на кінетику системи, що дає змогу розглянути різні сценарії формування граничних (стаціонарних) структур; стійкість цих станів; роль флуктуацій основних параметрів, що можуть істотно впливати на еволюцію системи та привести до якісно нових режимів фрагментації. Особливо цікавим видається опис зміцнення металів під час інтенсивної пластичної деформації з метою встановлення зворотного зв'язку між формуванням нанокристалічної структури та причиною її утворення — напруженням. Саме ці моменти потрібно розглядати в майбутніх експериментальних та теоретичних роботах.

Подяка. Автор вдячний МОН України за фінансову підтримку роботи в межах проекту № 0118U003584 “Атомістичне та статистичне представлення формування та тертя нанорозмірних систем”. Дякую Леонідові Семеновичу Метлову та Ользі Юценко за плідні дискусії та допомогу.

-
- [1] А. М. Глезер, И. Е. Пермякова, *Нанокристаллы, закаленные из расплава* (Физматлит, Москва, 2012).
- [2] S. Rusz *et al.*, Arch. Metall. Mater. **60**, 3011 (2015); <https://doi.org/10.1515/amm-2015-0481>.
- [3] Р. З. Валиев, И. В. Александров, *Объемные наноструктурные металлические материалы: получение, структура и свойства* (ИКЦ “Академкнига”, Москва, 2007).
- [4] Y. Estrin, A. Vinogradov, Acta Mater. **61**, 782 (2013); <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2012.10.038>.
- [5] Я. Е. Бейгельзимер, В. Н. Варюхин, Д. В. Орлов, С. Г. Сынков, *Винтовая экструзия — процесс накопления деформации* (Фирма ТЕАН, Донецк, 2003).
- [6] H. Ueno, K. Kakihata, Y. Kaneko, S. Hashimoto, A. Vinogradov, Acta Mater. **59**, 7060 (2011); <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2011.07.061>.
- [7] O. V. Prokof'eva, Y. Y. Beygelzimer, R. Y. Kulagin, Y. Z. Estrin, V. N. Varyukhin, Russ. Metall. **2017**, 226 (2017); <https://doi.org/10.1134/S0036029517030090>.
- [8] M. I. Latypov, I. V. Alexandrov, Y. E. Beygelzimer, S. Lee, H. S. Kim, Comp. Mater. Sci. **60(C)**, 194 (2012); <https://doi.org/10.1016/j.commat.2012.03.035>.
- [9] A. Vinogradov, Y. Estrin, Prog. Mater. Sci. **95**,

- 172 (2018); <https://doi.org/10.1016/j.pmatsci.2018.02.001>.
- [10] I. A. Ovid'ko, R. Z. Valiev, Y. T. Zhu, *Prog. Mater. Sci.* **94**, 462 (2018); <https://doi.org/10.1016/j.pmatsci.2018.02.002>.
- [11] O. Renk, R. Pippan, *Mater. Trans.* **60**, 1270 (2019); <https://doi.org/10.2320/matertrans.MF201918>.
- [12] Y. Beygelzimer *et al.*, *Adv. Eng. Mater.* **19**, 1600873 (2017); <https://doi.org/10.1002/adem.201600873>.
- [13] В. И. Сергеев, *Влияние химического состава, фазового и структурного состояния на свойства материалов. Учебное пособие* (УГАТУ, Уфа, 2007).
- [14] R. K. Islamgaliev, K. M. Nesterov, R. Z. Valiev, *Vestn. UGATU* **17**, 81 (2013).
- [15] I. G. Brodova, *J. Siberian Federal Univ. Eng. Technol.* **8**, 519 (2015).
- [16] S. N. Sergeev *et al.*, *Lett. Mater.* **2**, 117 (2012).
- [17] A. A. Mazilkina, B. B. Straumal, S. G. Protasova, O. A. Kogtenkova, R. Z. Valiev, *Phys. Solid State* **49**, 824 (2007); <https://doi.org/10.1134/S1063783407050113>.
- [18] A. D. Pogrebnjak *et al.*, *J. Alloys Compd.* **679**, 155 (2016); <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2016.04.064>.
- [19] A. M. Glezer, *Bull. Russ. Acad. Sci. Phys.* **71**, 1722 (2007); <https://doi.org/10.3103/S106287380712012X>.
- [20] А. М. Глезер, Э. В. Козлов, Н. А. Конева, Н. А. Попова, И. А. Курзина, *Основы пластической деформации наноструктурных материалов* (Физматлит, Москва, 2016).
- [21] L. A. Maltseva *et al.*, *Fiz. Tekhn. Vysokikh Davleniy* **19**, 83 (2009).
- [22] V. I. Sokolenko, A. V. Mats, V. A. Mats, *Fiz. Tekhn. Vysokikh Davleniy* **23**, 96 (2013).
- [23] E. H. Pashinskaya *et al.*, *Fiz. Tekhn. Vysokikh Davleniy* **25(1-2)**, 107 (2015).
- [24] P. P. Pal-Val *et al.*, *Mater. Sci. Eng. A: Struct.* **618**, 9 (2014); <https://doi.org/10.1016/j.msea.2014.08.069>.
- [25] I. S. Golovin, P. P. Pal-Val, L. N. Pal-Val, E. N. Vatazhuk, Y. Estrin, *Solid State Phenom.* **184**, 289 (2012); <https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/SSP.184.289>.
- [26] G. A. Malygin, *Phys. Solid State* **44**, 1305 (2002); <https://doi.org/10.1134/1.1494626>.
- [27] G. A. Malygin, *Phys. Solid State* **44**, 2072 (2002); <https://doi.org/10.1134/1.1521458>.
- [28] G. A. Malygin, *Phys. Solid State* **57**, 967 (2015); <https://doi.org/10.1134/S1063783415050212>.
- [29] V. M. Segal, I. J. Beyerlein, C. N. Tome, V. N. Chuvil'deev, V. I. Kopylov, *Fundamentals and Engineering of Severe Plastic Deformation* (Nova Science Publishers, New York, 2010).
- [30] V. N. Chuvil'deev, A. V. Semenycheva, *Phys. Solid State* **59**, 1 (2017); <https://doi.org/10.1134/S1063783417010048>.
- [31] Y. Beygelzimer, *Mech. Mater.* **37**, 753 (2005); <https://doi.org/10.1016/j.mechmat.2004.07.006>.
- [32] Л. С. Метлов, *Неравновесная эволюционная термодинамика и ее приложения* (Ноулидж, Донецк, 2014).
- [33] L. S. Metlov, *Phys. Rev. E* **90**, 022124 (2014); <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.90.022124>.
- [34] L. S. Metlov, A. M. Glezer, V. N. Varyukhin, *Russ. Metall.* **2015**, 269 (2015); <https://doi.org/10.1134/S0036029515040084>.
- [35] K. S. Kormout, R. Pippan, A. Bachmaier, *Adv. Eng. Mater.* **19**, 1600675 (2017); <https://doi.org/10.1002/adem.201600675>.
- [36] A. Bachmaier, R. Pippan, *Int. Mater. Rev.* **58**, 41 (2013); <https://doi.org/10.1179/1743280412Y.0000000003>.
- [37] Y. Beygelzimer, Y. Estrin, R. Kulagin, *Adv. Eng. Mater.* **17**, 1853 (2015); <https://doi.org/10.1002/adem.201500083>.
- [38] R. Kulagin *et al.*, *Mater. Lett.* **222**, 172 (2018); <https://doi.org/10.1016/j.matlet.2018.03.200>.
- [39] R. Kulagin, Y. Beygelzimer, A. Bachmaier, R. Pippan, Y. Estrin, *Appl. Mater. Today* **15**, 236 (2019); <https://doi.org/10.1016/j.apmt.2019.02.007>.
- [40] B. Baretzky *et al.*, *Rev. Adv. Mater. Sci.* **9**, 45 (2005).
- [41] B. B. Straumal *et al.*, *Mater. Lett.* **98**, 217 (2013); <https://doi.org/10.1016/j.matlet.2013.02.058>.
- [42] B. B. Straumal *et al.*, *Mater. Lett.* **145**, 63 (2015); <https://doi.org/10.1016/j.matlet.2015.01.041>.
- [43] Yu. V. Khlebnikova, L. Yu. Egorova, V. P. Pilyugin, T. R. Suaridze, A. M. Patselov, *Tech. Phys.* **60**, 1005 (2015); <https://doi.org/10.1134/S1063784215070142>.
- [44] I. Y. Litovchenko, A. N. Tyumentsev, A. V. Korznikov, S. A. Akkuzin, *Bull. Tambov State Univ.* **18**, 1970 (2013).
- [45] П. В. Бриджмен, *Исследование больших пластических деформаций и разрыва* (Изд-во иностранной литературы, Москва, 1955).
- [46] В. И. Копылов, Д. А. Павлик, В. Ф. Малышев, В. М. Сегал, В. И. Резников, *Процессы пластического структурообразования металлов* (Наука и техника, Минск, 1994).
- [47] V. Segal, in *Severe Plastic Deformation*, edited by A. Burhanettin (Nova Science Publishers, New York, 2006), Chap. 1.1, pp. 1–22.
- [48] Zhibo Zhang *et al.*, *Mater. Sci. Eng. A: Struct.* **594**, 321 (2014); <https://doi.org/10.1016/j.msea.2013.11.085>.
- [49] D. Orlov *et al.*, *Mater. Sci. Eng. A: Struct.* **519**, 105 (2009); <https://doi.org/10.1016/j.msea.2009.06.005>.
- [50] A. A. Goncharov, V. V. Petukhov, D. N. Terpii, P. I. Ignatenko, V. A. Stupak, *Inorg. Mater.* **41**, 696 (2005); <https://doi.org/10.1007/s10789-005-0193-y>.
- [51] A. A. Goncharov, S. N. Dub, A. V. Agulov, V. V. Petukhov, *J. Superhard Mater.* **37**, 422 (2015); <https://doi.org/10.3103/S1063457615060076>.
- [52] A. D. Pogrebnjak, A. A. Goncharov, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.* **38**, 1145 (2016); <https://doi.org/10.15407/mfint.38.09.1145>.
- [53] G. A. Malygin, *Usp. Fiz. Nauk* **181**, 1129 (2011); <https://doi.org/10.3367/UFNr.0181.201111a.1129>.
- [54] G. A. Malygin, *Usp. Fiz. Nauk* **169**, 979 (1999); <https://doi.org/10.3367/UFNr.0169.199909c.0979>.
- [55] G. A. Malygin, *Phys. Solid State* **49**, 1013 (2007); <https://doi.org/10.1134/S1063783407060017>.
- [56] В. Н. Чувильдеев, *Неравновесные границы зерен в металлах. Теория и приложения* (Физматлит, Москва, 2004).
- [57] G. V. Afonin, S. V. Khonik, A. A. Kaloyan, V. A. Khonik, *Phys. Solid State* **54**, 2150 (2012); <https://doi.org/10.1134/S1063783412110029>.
- [58] Jianjun Zhu *et al.*, *Powder Technol.* **331**, 129 (2018); <https://doi.org/10.1016/j.powtec.2018.01.084>.
- [59] G. Pál, Z. Jánosi, F. Kun, I. G. Main, *Phys. Rev. E* **94**,

- 053003 (2016); <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.94.053003>.
- [60] L. S. Metlov, V. N. Varyukhin, *Fiz. Tekhn. Vysokikh Davleniy* **22**, 7 (2012).
- [61] Д. С. Трошенко, дис. канд. фіз.-мат. наук (СумДУ, Суми, 2018).
- [62] A. V. Khomenko, D. S. Troshchenko, in *Advances in Materials Science Research. Vol. 33*, edited by M. C. Wythers (Nova Science Publishers, New York, 2018), Chap. 9, pp. 231–273.
- [63] A. V. Khomenko, D. S. Troshchenko, L. S. Metlov, *Condens. Matter Phys.* **18**, 33004 (2015); <https://doi.org/10.5488/CMP.18.33004>.
- [64] O. V. Khomenko, D. S. Troshchenko, L. S. Metlov, *Metallofiz. Noveishiye Tekhnol.* **39**, 265 (2017); <https://doi.org/10.15407/mfint.39.02.265>.
- [65] A. V. Khomenko, D. S. Troshchenko, L. S. Metlov, *Russ. Metall.* **2018**, 295 (2018); <https://doi.org/10.1134/S0036029518040079>.
- [66] A. V. Khomenko, D. S. Troshchenko, L. S. Metlov, P. E. Trofimenko, *Nanosist. Nanomater. Nanotekhnol.* **15**, 203 (2017).
- [67] A. Khomenko, D. Troshchenko, L. Metlov, *Phys. Rev. E* **100**, 022110 (2019); <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.100.022110>.
- [68] A. M. Glezer, L. S. Metlov, *Phys. Solid State* **52**, 1162 (2010); <https://doi.org/10.1134/S1063783410060089>.
- [69] J. M. Rubi, A. Gadomski, *Physica A* **326(3-4)**, 333 (2003).
- [70] A. Gadomski, J. Siódmiak, I. Santamaria-Holek, J. M. Rubí, M. Ausloos, *Acta Phys. Pol. B* **36**, 1537 (2005).
- [71] И. Дьярмати, *Неравновесная термодинамика. Теория поля и вариационные принципы* (Мир, Москва, 1974).
- [72] A. G. Knyazeva, *Math. Modeling Syst. Process.* **13**, 45 (2005).
- [73] B. B. Straumal *et al.*, *Mater. Lett.* **159(C)**, 432 (2015); <https://doi.org/10.1016/j.matlet.2015.07.038>.
- [74] L. D. Landau, E. M. Lifshitz, *Course of Theoretical Physics, Vol. 5: Statistical Physics* (Butterworth, London, 1999).
- [75] E. M. Lifshits, L. P. Pitaevskii, *Course of Theoretical Physics, Vol. 10: Physical Kinetics, 1 ed.* (Pergamon Press, Oxford, 1981).
- [76] A. Choudhury, B. Nestler, *Phys. Rev. E* **85**, 021602 (2012); <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.85.021602>.
- [77] J. Rosam, P. K. Jimack, A. M. Mullis, *Phys. Rev. E* **79**, 030601 (2009); <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.79.030601>.
- [78] Дж. Хирт, И. Лоте, *Термодинамическая теория структур, устойчивости и флуктуаций* (Атомиздат, Москва, 1972).
- [79] V. V. Malashenko, *Phys. Solid State* **56**, 1579 (2014); <https://doi.org/10.1134/S1063783414080186>.
- [80] И. П. Базаров, *Термодинамика* (Высшая школа, Москва, 1991).
- [81] F.-J. Pérez-Reche, L. Truskinovsky, G. Zanzotto, *Phys. Rev. Lett.* **99**, 075501 (2007); <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.99.075501>.
- [82] A. V. Khomenko, O. V. Yushchenko, *Phys. Rev. E* **68**, 036110 (2003); <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.68.036110>.
- [83] A. V. Khomenko, I. A. Lyashenko, *Phys. Solid State* **49**, 936 (2007); <https://doi.org/10.1134/S1063783407050228>.
- [84] A. V. Khomenko, I. A. Lyashenko, *Condens. Matter Phys.* **9**, 695 (2006); <https://doi.org/10.5488/CMP.9.4.695>.
- [85] A. I. Olemskoi, O. V. Yushchenko, A. Yu. Badalyan, *Theor. Math. Phys.* **174**, 386 (2013); <https://doi.org/10.1007/s11232-013-0033-1>.
- [86] O. Yu. Mazur, L. I. Stefanovich, *Phys. Solid State* **61**, 1420 (2019); <https://doi.org/10.1134/S1063783419080183>.
- [87] L. I. Stefanovich, O. Yu. Mazur, V. V. Sobolev, *Nanosci. Nanotech. – Asia* **9**, 344 (2019); <https://doi.org/10.2174/2210681208666180626124705>.
- [88] I. A. Lyashenko, A. V. Khomenko, L. S. Metlov, *Tribol. Int.* **44**, 476 (2011); <https://doi.org/10.1016/j.triboint.2010.12.005>.
- [89] A. V. Khomenko, N. V. Prodanov, *J. Phys. Chem. C* **114**, 19958 (2010); <https://doi.org/10.1021/jp108981e>.
- [90] A. V. Khomenko, I. A. Lyashenko, *J. Frict. Wear* **31**, 308 (2010); <https://doi.org/10.3103/S1068366610040100>.
- [91] М. М. Протодяконов и др., *Распределение и корреляция показателей физических свойств горных пород: Справочное пособие* (Недра, Москва, 1981).
- [92] Л. М. Качанов, *Основы теории пластичности* (Наука, Москва, 1969).
- [93] В. Л. Покровский, А. З. Паташинский, *Флуктуационная теория фазовых переходов* (Наука, Москва, 1982).
- [94] L. S. Metlov, *Phys. Rev. Lett.* **106**, 165506 (2011); <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.106.165506>.
- [95] L. S. Metlov, *Fiz. Tekhn. Vysokikh Davleniy* **18**, 53 (2008).
- [96] L. S. Metlov, *Bull. Donetsk Nat. Univ. Ser A* **2**, 108 (2007).
- [97] A. V. Khomenko, I. A. Lyashenko, L. S. Metlov, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.* **30**, 859 (2008).

**SEVERE PLASTIC DEFORMATION: METHODS AND MATHEMATICAL MODELS
OF NANOMATERIALS FORMATION**

A. V. Khomenko
Sumy State University,
2, Rymtskyi-Korsakov St., Sumy, UA-40007, Ukraine

The paper explores methods of obtaining ultrafine-grained and nanostructural materials and corresponding theoretical models. The focus is on the methods of severe plastic deformation: examples of schemes and features of the treatment process are given. Experimental studies of obtaining nanocrystalline structures in various metals or alloys in the process of severe plastic deformation are described. These studies can be used for the synthesis of metals of different classes for the manufacture of constructions for a suitable purpose. In particular, the reasons for the formation of unstable configurations or manifestations of abnormal effects in the material properties, which are common in practice and can lead to premature destruction during operation, have been identified. Theoretical approaches to the description of the process of solids fragmentation during severe plastic deformation are reviewed. The method of nonequilibrium evolution thermodynamics is considered, which makes it possible to unambiguously establish the behavior of nonequilibrium variables during the processing of solids. The phenomenological foundations of the approach that unite the first and the second laws of thermodynamics are presented, and a model is proposed that allows describing the specifics of the process of the fragmentation and formation of a limiting (stationary) structure during the severe plastic deformation. Taking into account the two-defect approximation, the main relationships are determined in terms of effective internal energy, and the stages of the fragmentation process are described. The study shows that the Taylor relation provides a self-consistent feedback between the process of the formation of a stationary structure and the condition of its formation in the form of acting stresses. The conclusion is that there are a number of questions regarding severe plastic deformation that have not yet been fully investigated. It is these questions that should be in the main focus of future studies.

Key words: grain boundary, dislocation, severe plastic deformation, phase transition, internal energy, fragmentation.