

PACS numbers: 05.65.+b, 05.70.Ln, 61.72.Cc, 61.72.Lk, 61.72.Mm, 62.20.F-, 64.30.Ef

## **Особенности фазовой кинетики фрагментации металлов при интенсивной пластической деформации**

А. В. Хоменко<sup>1</sup>, Д. С. Трощенко<sup>1</sup>, Л. С. Метлов<sup>2</sup>, П. Е. Трофименко<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Сумский государственный университет,  
ул. Римского-Корсакова, 2,  
40007 Сумы, Украина*

<sup>2</sup>*Донецкий физико-технический институт им. А. А. Галкина НАН Украины,  
просп. Науки, 46,  
03028 Киев, Украина*

В рамках неравновесной эволюционной термодинамики описан процесс фрагментации металлов при интенсивной пластической деформации (ИПД), который изучается в приближении двухдефектной модели с учётом плотностей границ зёрен и дислокаций. Построены фазовые портреты кинетики неравновесных переменных в процессе формирования стационарных субмикроструктурных или нанокристаллических структур. Изучено влияние времён релаксации на фазовую динамику неравновесных переменных системы. Показано, что с приближением как к прямому, так и к обратному адиабатическому приближению система демонстрирует универсальное кинетическое поведение. Выявлено формирование особых участков, которые имеют притягивающий характер и определяются как «русло большой реки». Обнаружено, что процесс фрагментации металла или сплава во время ИПД осуществляется в два этапа, представляющие быструю релаксацию к особым участкам и медленное движение по ним.

В рамках нерівноважної еволюційної термодинаміки описано процес фрагментації металів за інтенсивної пластичної деформації (ІПД), який вивчається в наближенні дводефектного моделю з урахуванням густин меж зерен і дислокацій. Побудовано фазові портрети кінетики нерівноважних змінних у процесі формування стаціонарних субмікроструктурних або нанокристалічних структур. Вивчено вплив часів релаксації на фазову динаміку нерівноважних змінних системи. Показано, що з наближенням як до прямого, так і до зворотнього адіабатичного наближення система демонструє універсальну кінетичну поведінку. Виявлено формування особливих ділянок, які мають притягальний характер і визначаються як «русло великої річки». Виявлено, що процес фрагментації металу або сплаву під час ІПД здійснюється у два етапи,

що представляють швидку релаксацію до особливих ділянок і повільний рух по них.

The process of metals' fragmentation during severe plastic deformation (SPD) is described within the scope of the nonequilibrium evolutionary thermodynamics. It is investigated using two-defect' approach, which takes into account the densities of both grain boundaries and dislocations. The phase portraits, which represent the kinetics of nonequilibrium variables in the process of formation of stationary submicrocrystalline or nanocrystalline structures, are constructed. The influence of relaxation times on phase dynamics of system nonequilibrium variables is studied. As shown, with approaching the direct or inverse adiabatic approximation, the system demonstrates universal kinetic behaviour. The formation of singular sections called as 'mainstreams' is revealed. As found out, the process of metals' fragmentation or alloys' one during SPD is carried out in two stages, which represent the fast relaxation to singular sections and the slow movement over them.

**Ключевые слова:** граница зерна, дислокация, фазовый переход, предельная структура, внутренняя энергия.

**Ключові слова:** межа зерна, дислокація, фазовий перехід, гранична структура, внутрішня енергія.

**Key words:** grain boundary, dislocation, phase transition, limiting structure, internal energy.

*(Получено 4 января 2017 г.)*

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Интенсивная пластическая деформация весьма перспективный метод получения материалов с высокими прочностными и пластическими свойствами [1–5]. В процессе механического внешнего воздействия на начальной стадии происходит интенсивное размножение структурных дефектов, на завершающей стадии этот процесс динамически уравнивается их аннигиляцией, и система выходит на стационарный режим. При дальнейшем деформировании материала могут проявиться структурные дефекты мезоуровня, микропоры и микротрещины, что приведёт уже к деградации свойств. Сформировавшаяся организация структурных дефектов, количество типов дефектов, их количественное соотношение и статистические характеристики отвечают за формирование свойств материала.

Если структурные дефекты рассматривать как обобщённую надкристаллическую структуру твёрдого тела, то переходы между различными структурными состояниями можно ассоциировать

с фазовыми переходами, и попытаться применить для теоретического описания идеи, и, возможно, аппарат теории фазовых переходов Ландау.

Фазовые переходы могут протекать по двум основным сценариям, при присоединении изучаемой системы к внешним термостатам с более высокой или с более низкой температурой (спонтанные фазовые переходы). Второй сценарий, это воздействие на систему различных внешних полей (вынужденные фазовые переходы), в том числе и механическое воздействие. В обоих случаях система является открытой, и поэтому процессы, протекающие при этом, являются необратимыми.

Естественно, для описания этих явлений должны учитываться первый и второй законы термодинамики. Генерация структурных дефектов при ИПД — это реакция системы на внешнее воздействие и она является одним из каналов диссипации энергии. Явный учёт каналов диссипации позволяет модернизировать основное соотношение термодинамики, соотношение Гиббса для сильнонеравновесных процессов в форме равенства или более слабого неравенства [6]. В этом случае для описания эволюции независимых неравновесных переменных (внутренние переменные состояния или аналоги параметра порядка) уместно использовать эволюционные уравнения типа Ландау–Халатникова. При этом, поскольку при ИПД процесс протекает достаточно быстро, большие флуктуации произойти не успеют, и для описания поведения системы можно вполне применить самый простой вариант теории в приближении среднего поля.

В рамках такого концептуального подхода был рассмотрен ряд задач кинетики дефектов при ИПД, в том числе построена единая кривая упрочнения в координатах предел пластического течения — средний размер зерна [6].

В настоящей статье исследуется фазовая кинетика неравновесных переменных в процессе образования стационарных субмикроструктур (СМК) или нанокристаллических (НК) структур, а также изучается влияние времён релаксации на фазовую динамику системы, что позволяет рассмотреть разные сценарии формирования предельных (стационарных) структур.

## 2. ПОДХОД НЕРАВНОВЕСНОЙ ЭВОЛЮЦИОННОЙ ТЕРМОДИНАМИКИ

На основе базового энергетического потенциала для плотности внутренней энергии (см. явный вид его в работах [6–9]), который позволяет описать течение сильнонеравновесных процессов при фрагментации металлов или сплавов во время ИПД, эволюционные уравнения определяются следующим соотношением:

$$\tau_{h_m} \frac{\partial h_m}{\partial t} = \frac{\partial \bar{u}}{\partial h_m}, \quad (1)$$

где  $\tau_{h_m}$  — времена релаксации соответствующих дефектных подструктур, которые задают инерционные свойства системы;  $h_m$  — плотность дефектов  $m$ -го типа;  $\bar{u}$  — эффективная внутренняя энергия [6, 10], которая в данном случае определяется соотношением

$$\bar{u} = u - \sum_{m=g,D} \varphi_m^{st} h_m, \quad (2)$$

где  $\varphi_m^{st}$  — энергия дефекта  $m$ -типа в стационарном состоянии. В такой формулировке стационарные состояния будут определяться максимумами эффективной внутренней энергии. Уравнение (1) описывает передемпфированную и детерминистическую динамику для несохраняющихся и однородных параметров порядка [6]. Преобразование (2) можно понимать, как аналог преобразования Лежандра в равновесной термодинамике. Слагаемые под знаком суммы представляют собой в таком случае связанную дефектами энергию, а эффективная внутренняя энергия  $\bar{u}$  является аналогом свободной энергии, которая также обладает экстремальными свойствами.

В приближении двухдефектной модели с учётом плотности границ зёрен (ГЗ) и дислокаций, которые напрямую определяют степень фрагментации твёрдых тел и формирование высоких физико-механических свойств [11–13], уравнения (1) принимают явный вид [10]:

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

$$\tau_{h_g} \frac{\partial h_g}{\partial t} = \varphi_{0g} - \varphi_{1g} h_g + \varphi_{2g} h_g^2 - \varphi_{3g} h_g^3 + \varphi_{gD} h_D. \quad (4)$$

Поскольку стационарные значения  $\varphi_m^{st}$  входят в комбинации с линейным по плотности дефектов вкладом (см. вид соотношения для плотности внутренней энергии в работах [6–10]), то без ущерба для общности его можно объединить с соответствующим коэффициентом  $\varphi_{0m} = \varphi_{0m} - \varphi_m^{st}$ .

При этом параметры  $\varphi_{km}$  ( $k = 0, 1$ ) задаются выражениями:

$$\varphi_{0m} = \varphi_{0m}^* + \mathbf{g}_m \varepsilon_{ii}^e + \left( \frac{1}{2} \bar{M}_m (\varepsilon_{ii}^e)^2 + 2\bar{\mu}_m I_2 \right), \quad (5)$$

$$\varphi_{1m} = \varphi_{1m}^* + 2e_m \varepsilon_{ii}^e, \quad (6)$$

где  $M = \lambda + 2\mu$  — модуль одностороннего сжатия материала;  $\varepsilon_{ii}^e$ ,  $I_2 \equiv (-\varepsilon_{ii}^e \varepsilon_{jj}^e + \varepsilon_{ij}^e \varepsilon_{ji}^e) / 2$  — первый и второй инварианты тензора упругих деформаций; положительная константа  $g_m$  отвечает за генерацию дефектов при растяжении  $\varepsilon_{ii}^e > 0$  или за их аннигиляцию при сжатии  $\varepsilon_{ii}^e < 0$ ;  $\bar{M}_m$ ,  $\bar{\mu}_m$  — упругие постоянные, обусловленные существованием дефектов;  $e_m$  выражает процесс аннигиляции дефектов при положительном значении  $\varepsilon_{ii}^e > 0$ , а при отрицательном  $\varepsilon_{ii}^e < 0$  подразумевается генерация. Значения индексов  $m = g$  относятся к границам зёрен, а  $m = D$  — к дислокациям.

Здесь полная деформация представлена в виде суммы

$$\varepsilon_{ij} = \varepsilon_{ij}^e + \varepsilon_{ij}^p, \quad (7)$$

обратимой  $\varepsilon_{ij}^e$  (упругой) и необратимой  $\varepsilon_{ij}^p$  (пластической или остаточной) составляющих [14].

Поскольку энергия системы не должна зависеть от выбора системы координат, то она выражается через инварианты тензора деформаций. В рамках рассматриваемой теории значения пластических (накопленных) деформаций  $\varepsilon_{ij}^p$  не представлены в явном виде. Известно, что при постоянной скорости деформирования накопленная пластическая деформация пропорциональна времени, а при переменной скорости деформирования монотонно зависит от него. Поэтому в механике принято вместо времени использовать накопленную деформацию (мёртвое время). В представленной же здесь теории время используется в явной форме, а пластическая деформация присутствует неявно, в форме плотности дефектов [6].

Тепловой канал диссипации на данной стадии изучения проблемы не учитывается.

Для численного анализа принят следующий феноменологический набор коэффициентов [6, 10, 15, 16]:

$$\begin{aligned} \Phi_{0g}^* &= 0,4 \text{ Дж} \cdot \text{м}^{-2}, \quad g_g = 12 \text{ Дж} \cdot \text{м}^{-2}, \\ \bar{M}_g &= 2,5 \cdot 10^5 \text{ Дж} \cdot \text{м}^{-2}, \quad \bar{\mu}_g = 3 \cdot 10^5 \text{ Дж} \cdot \text{м}^{-2}, \\ \Phi_{1g}^* &= 3 \cdot 10^{-6} \text{ Дж} \cdot \text{м}^{-1}, \quad e_g = 3,6 \cdot 10^{-4} \text{ Дж} \cdot \text{м}^{-1}, \\ \Phi_{2g} &= 5,6 \cdot 10^{-13} \text{ Дж}, \quad \Phi_{3g} = 3 \cdot 10^{-20} \text{ Дж} \cdot \text{м}, \\ \Phi_{0D}^* &= 5 \cdot 10^{-9} \text{ Дж} \cdot \text{м}^{-1}, \quad g_D = 2 \cdot 10^{-8} \text{ Дж} \cdot \text{м}^{-1}, \\ \bar{M}_D &= 0 \text{ Дж} \cdot \text{м}^{-1}, \quad \bar{\mu}_D = 1,65 \cdot 10^{-4} \text{ Дж} \cdot \text{м}^{-1}, \\ \Phi_{1D}^* &= 10^{-24} \text{ Дж} \cdot \text{м}, \quad e_D = 6 \cdot 10^{-23} \text{ Дж} \cdot \text{м}, \\ \Phi_{2D} &= 0 \text{ Дж} \cdot \text{м}^3, \quad \Phi_{3D} = 0 \text{ Дж} \cdot \text{м}^5, \quad \Phi_{gD} = 10^{-16} \text{ Дж}, \\ \tau_{h_D} &= 1 / \gamma_D = 3^{-1} \cdot 10^{-25} \text{ Дж} \cdot \text{м} \cdot \text{с}, \quad \tau_{h_g} = 1 / \gamma_g = 10^{-6} \text{ Дж} \cdot \text{м}^{-1} \cdot \text{с}. \end{aligned}$$

Выбор феноменологических постоянных осуществляется согласно наблюдаемым во время ИПД закономерностям [11, 12, 17], в результате которых в материале формируются стационарные СМК или НК структуры. Техника подбора основных значений для параметров теории представлена в работах [6, 10, 16].

### 3. ФАЗОВАЯ КИНЕТИКА ДВУХДЕФЕКТНОЙ СИСТЕМЫ

#### 3.1. Фазовая диаграмма

Применяя адиабатическое приближение  $\tau_{h_g} \gg \tau_{h_D}$  [7–9], определяющее характер эволюции основных переменных  $h_m$  ( $m = g, D$ ) в рамках принципа соподчинения, получаем уравнение Ландау–Халатникова:

$$\tau_{h_g} \frac{\partial h_g}{\partial t} = \frac{\partial V}{\partial h_g}, \quad (8)$$

явный вид которого представляется соотношением

$$\tau_{h_g} \dot{h}_g = \varphi_{0g} + \varphi_{gD} \frac{\varphi_{0D}}{\varphi_{1D}} - \left( \varphi_{1g} - \frac{\varphi_{gD}^2}{\varphi_{1D}} \right) h_g + \varphi_{2g} h_g^2 - \varphi_{3g} h_g^3. \quad (9)$$

При этом система характеризуется термодинамическим потенциалом

$$V(h_g) = \int_0^{h_g} F(h'_g) dh'_g. \quad (10)$$

В стационарном состоянии при  $\dot{h}_g = 0$  уравнение (8) может иметь два устойчивых состояния, которые соответствуют максимумам термодинамического потенциала  $V(h_g)$ , и одно неустойчивое (т.е. формируется минимум  $V(h_g)$ ). Однако, согласно основной теореме алгебры всегда будет реализоваться хотя бы одно стационарное решение (или предельная структура).

Отметим, что возможность установления различных устойчивых состояний для одного типа дефектов определяется самим процессом деформации, в результате которого осуществляются взаимодействия на микроскопическом уровне. Увеличение протяжённости ГЗ на начальной стадии является продуктивным механизмом диссипации энергии. Но, после достижения ультрадисперсной структуры со средними размерами зёрен порядка 100 нм, активизируются процессы рекристаллизации или коалесценции зёрен [17], которые направлены в противоположную сторону

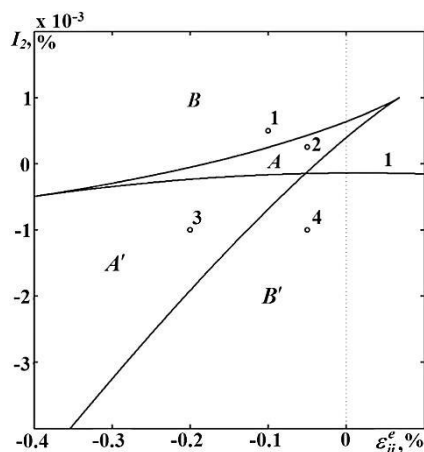


Рис. 1. Фазовая диаграмма режимов фрагментации [9].<sup>1</sup>

уменьшения плотности дефектов. В стационарном состоянии оба эти процесса динамически уравниваются, эффективно перерабатывая энергию, полученную от работы внешних сил, в тепло.

Проведя исследование потери устойчивости стационарных состояний термодинамического потенциала  $V(h_g)$ , определены области формирования различных предельных структур в зависимости от значений первого и второго инвариантов  $\varepsilon_{ii}^e$ ,  $I_2$ , которые представлены на рис. 1 (см. технику построения в работах [7–9]).

Согласно рис. 1, фазовая диаграмма образует четыре области фрагментации металлических образцов. В области  $A$  имеется два ненулевых максимума термодинамического потенциала  $V(h_g)$  (см. поведение  $V(h_g)$  в работе [9]), и возможно сосуществование двух предельных структур с крупными зёрнами (первый максимум потенциала) и более мелкой СМК или НК структуры (второй максимум). Область  $A'$ , существенно отличается от области  $A$  тем, что первый максимум термодинамического потенциала вообще имеет нулевую плотность дефектов, при этом образец — почти монокристалл. Единственное нулевое стационарное состояние (нулевой максимум)  $V(h_g)$ , которое отвечает реализации монокристалла или крупнозернистого поликристалла, формируется в области малых деформаций  $B'$ . При больших деформациях в области  $B$  формируются одна предельная структура. Однако важно помнить, что полученные размеры кристаллитов являются предельными лишь для определённых условий обработки, таких как скорость деформирования, температура и приложенное давление, а также зависят от состояния материала до обработки (фаз вещества, химического состава, а также количества структурных дефектов  $h_m$ , где  $m = g, D$ ).

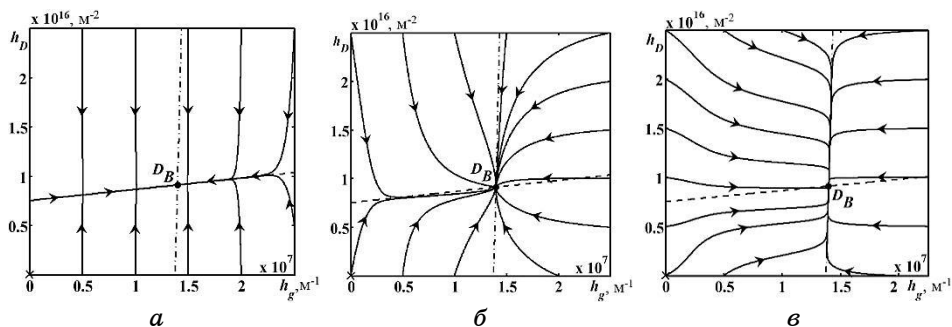
Переход между предельными структурами может реализоваться непосредственно во время ИПД [11, 13, 17, 18]. После остановки обработки структура дальше не эволюционирует, и остаётся в том состоянии, в каком она находилась на момент прекращения обработки, так как для дальнейшей эволюции в любую сторону, как минимум необходимо пластическое течение. При этом может происходить некоторая тепловая релаксация, однако она практически не затрагивает дефектную структуру, а только может лишь немного перераспределить компонентный состав в случае сплавов или перераспределить точечные дефекты. Система в этом случае придёт к тепловому равновесию, но в ряде случаев может оставаться в неуравновешенном структурном состоянии.

Таким образом, фазовая диаграмма на рис. 1 позволяет в общем виде изобразить возможные сценарии и режимы поведения системы эволюционных уравнений и может сыграть важную роль с точки зрения технических применений предлагаемой модели.

### 3.2. Влияние времён релаксации на кинетику двухдефектной системы

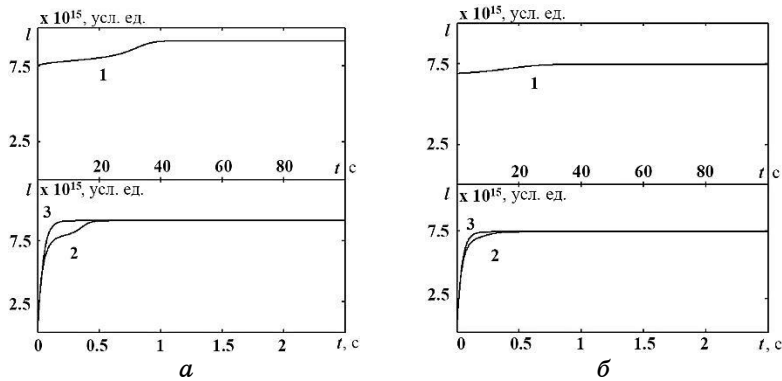
Исследуем влияние времён релаксации основных неравновесных переменных  $\tau_{h_m}$  ( $m = g, D$ ) на кинетику двухдефектной системы [19]. Согласно исследованию устойчивых стационарных состояний, очевидно, что в целом различные соотношения времён релаксации не приведут к качественным (бифуркационным) изменениям в фазовой кинетике, а лишь способствуют проявлению универсальности кинетического поведения [20].

На рисунках 2 и 4 представлены фазовые портреты системы, которые целостно описывают поведение структурных дефектов во



**Рис. 2.** Фазовые портреты двухдефектной системы (3), (4) при упругих деформациях  $\varepsilon_{ii}^e = -0,1\%$ ,  $I_2 = 5 \cdot 10^{-4}\%$  (точка 1 на рис. 1) и значениях времён релаксации: (а)  $\tau_{h_g} > 10^{-1}\tau_{h_D}$ ; (б)  $10^{-1}\tau_{h_g} > \tau_{h_D}$ ; (в)  $10^{-2}\tau_{h_g} > \tau_{h_D}$ .<sup>2</sup>



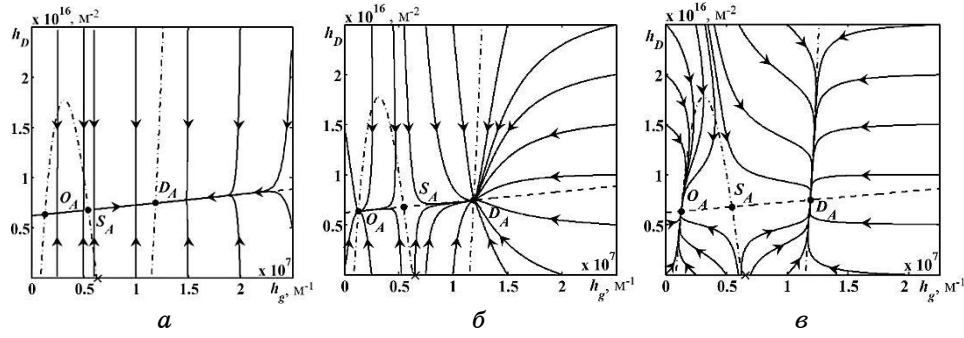


**Рис. 3.** Временная зависимость пройденного конфигуративной точкой пути  $l$  по фазовой траектории: (а) кривая 1 отвечает фазовому портрету на рис. 2, а, кривая 2 — рис. 2, б и кривая 3 — рис. 2, в; (б) кривая 1 отвечает случаю, представленному на рис. 4, а, кривая 2 — рис. 4, б и кривая 3 — рис. 4, в. Начало пути  $l$  отмечено крестиком на соответствующих рисунках.<sup>3</sup>

время ИПД при разных значениях времён релаксации. Рассмотренные случаи, согласно фазовой диаграмме на рис. 1, отвечают двум режимам фрагментации. Соответственно, рис. 2 построен для больших деформаций из области  $B$  при нормальном  $\sigma_{ii}^e \approx -10^{-3} \mu \cdot \text{Па}$  и сдвиговом  $\sigma_{ij}^e \approx 2,2 \cdot 10^{-3} \mu \cdot \text{Па}$  упругих напряжениях (точка 1 на рис. 1)<sup>1</sup>, а рис. 4 отображает реакцию системы на упругие напряжения  $\sigma_{ii}^e \approx -5 \cdot 10^{-4} \mu \cdot \text{Па}$  и  $\sigma_{ij}^e \approx 1,6 \cdot 10^{-3} \mu \cdot \text{Па}$  из области  $A$  (точка 2 на рис. 1). Штриховые и штрихпунктирные линии на рисунках 2 и 4 определяют точки изоклин, фазовые траектории в которых имеют горизонтальные и, соответственно, вертикальные касательные. При этом в точках пересечения этих линий формируются стационарные состояния системы, количество и устойчивость которых, как отмечалось раньше, определяется характером механической обработки материала, и устанавливается согласно представленной на рис. 1 фазовой диаграмме [9, 20]. Так, на рис. 2 формируется только одна стационарная точка  $D_B$  (существует одна предельная структура), которая в фазовом пространстве определяется как устойчивый «узел». В свою очередь, на рис. 4 реализуются три неподвижных точки, две из которых  $O_A$  и  $D_A$  соответствуют устойчивым «узлам» (формируются две предельные структуры), а третья  $S_A$  является «седлом».

Из рисунков видно, что фазовые траектории системы, независимо от начальных условий, сходятся со временем в этих устой-

<sup>1</sup> Предполагается, что сдвиговые деформации определяются значениями  $I_2$ ,  $\mu$  — это модуль сдвига для соответствующего материала.



**Рис. 4.** Фазовые портреты двухдефектной системы (3), (4) при упругих деформациях  $\varepsilon_{ii}^e = -0,05\%$ ,  $I_2 = 2,5 \cdot 10^{-4}\%$  (точка 2 на рис. 1) и значениях времён релаксации: (а)  $\tau_{h_g} > 10^{-1}\tau_{h_D}$ ; (б)  $10^{-1}\tau_{h_g} > \tau_{h_D}$ ; (в)  $10^{-2}\tau_{h_g} > \tau_{h_D}$ .<sup>4</sup>

чивых стационарных состояниях.

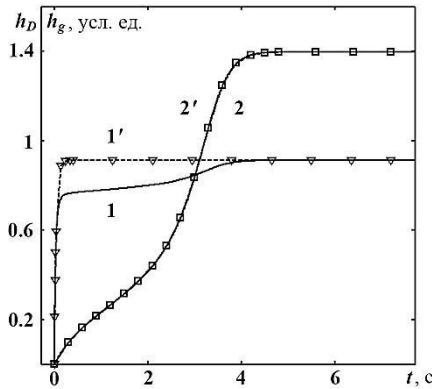
Инерционные свойства двухдефектной системы изучаются в рамках следующих случаев, для которых соответствующие времена релаксации принимают значения  $10^{-1}\tau_{h_D}$ ,  $10^{-1}\tau_{h_g}$  и  $10^{-2}\tau_{h_g}$ . В первом случае рассматривается фазовая кинетика системы при ускорении эволюции плотностей дислокаций  $h_D$ , в двух последующих — ускорении процесса фрагментации ГЗ  $h_g$ . Отметим, что все полученные ранее зависимости [9] реализуются при значениях  $\tau_{h_D} = \gamma_D^{-1} = 3^{-1} \cdot 10^{-25}$  Дж·м<sup>-1</sup>·с,  $\tau_{h_g} = \gamma_g^{-1} = 10^{-6}$  Дж·м<sup>-1</sup>·с, которые, согласно экспериментальным данным, отображают естественный ход эволюции структуры материала [6, 10, 15, 16, 21–23]. На начальных стадиях обработки обычно происходит быстрое накопление плотности дислокаций, которые в дальнейшем рекомбинируют и перераспределяются по атомарным плоскостям, что в результате приводит к формированию ячеистой структуры и измельчению кристаллитов за счёт реализации пластического течения. Однако нельзя исключать другие сценарии в эволюции структурных дефектов, поэтому исследуем поведение системы (3), (4) при отклонении от этих величин.

Таким образом, фазовый портрет, представленный на рис. 2, а, отвечает случаю  $\tau_{h_g} > 10^{-1}\tau_{h_D}$ . Как видно, все фазовые траектории со временем эволюционируют к линейному участку. На первом этапе плотность ГЗ  $h_g$  практически не изменяется, а плотность дислокаций  $h_D$ , наоборот, быстро уменьшается выше линейного участка или увеличивается, рассматривая начальные приближения ниже от особой линии [24–27]. На втором этапе система пребывает длительное время, поскольку особый участок расположен

очень близко к линии изоклин (штриховая кривая). Очевидно, что при дальнейшем уменьшении параметра  $\tau_{h_D}$  особая область будет удлиняться вдоль штриховой линии, что в пределе можно рассматривать как адиабатическое приближение  $\tau_{h_g} \gg \tau_{h_D}$ . При этом время релаксации системы к устойчивому состоянию (особой точке  $D_B$ ) полностью определяется эволюцией плотности ГЗ  $h_g$ .

Согласно временной зависимости, представленной кривой 1 на рис. 3, а, видно, что конфигуративная точка осуществляет быстрое движение по траектории, которая расположена за пределами линейного участка. При попадании в особую область движение существенно замедляется; при этом, как отмечалось ранее, эффект замедления проявляется тем сильнее, чем больше уменьшать  $\tau_{h_D}$ . В то же время, сопоставляя временную зависимость пройденного пути кинетике плотностей структурных дефектов (кривые 1 и 2 на рис. 5), видно, что процесс установления стационарного режима при  $10^{-1}\tau_{h_D}$  замедляется приблизительно в 10 раз.

Рисунок 2, б построен для случая, когда время релаксации плотностей дефектов задаётся выражением  $10^{-1}\tau_{h_g} > \tau_{h_D}$ , которое, по сравнению с предыдущим случаем, представляет замедление кинетики неравновесного параметра  $h_D$  ( $\tau_{h_g} > 10\tau_{h_D}$ ) или ускоре-



**Рис. 5.** Кинетика фрагментации металлов во время ИПД при значениях инвариантов  $\varepsilon_{ii}^e = -0,1\%$ ,  $I_2 = 5 \cdot 10^{-4}\%$ . Кривая 1 демонстрирует эволюцию плотности дислокаций  $h_D(t)$  согласно (3), а кривая 2 — изменения  $h_g(t)$  для (4) при  $\tau_{h_D} = \gamma_D^{-1} = 3^{-1} \cdot 10^{-25}$  Дж·м·с,  $\tau_{h_g} = \gamma_g^{-1} = 10^{-6}$  Дж·м<sup>-1</sup>·с. Кривые 1' и 2' отображают временные зависимости в рамках адиабатических приближений  $\tau_{h_D} \gg \tau_{h_g}$  и, соответственно,  $\tau_{h_g} \gg \tau_{h_D}$ .<sup>5</sup>

ние  $h_g$ , что равнозначно. Как видно, в данном случае особые участки практически не формируются. Процесс фрагментации протекает интенсивно, и система быстро эволюционирует к устойчивым стационарным состояниям.

Рассматривая движение конфигуративной точки, путь которой представлен кривой 2 на рис. 3, а, очевидно, что вначале осуществляется более быстрое движение по фазовой траектории, в результате которого система испытывает интенсивное энергетическое «насыщение» за счёт роста внутренней энергии. После достижения некоторого значения дефектности, процесс существенно замедляется, и в кристаллической структуре материала осуществляется относительно медленное упорядочение. Но при этом, для установления стационарного режима потребуется в несколько раз меньше времени по сравнению с кривыми 1 и 2 на рис. 5.

Фазовый портрет на рис. 2, в отвечает случаю  $10^{-2}\tau_{h_g} > \tau_{h_D}$ .

Здесь, аналогично рис. 2, а, выделено два этапа: относительно быстрая релаксация к почти вертикальному линейному участку, который близкий к штрихпунктирной линии изоклин, и последующее медленное движение вдоль него, что также наблюдается в динамике кривой 3 на рис. 3, а. Однако, особый участок достигается уже в результате относительно малых изменений  $h_D$  и быстрой релаксации  $h_g$ , если начальные приближения расположены правее от штрихпунктирной кривой, или за счёт интенсивного возрастания плотности ГЗ при расположении  $h_{g0}(t=0)$  слева. При этом время, затраченное на формирование стационарного состояния, оказывается меньше по сравнению с протекающим процессом согласно кривой 2 на рис. 3, а и эволюцией системы при  $\tau_{h_g} > \tau_{h_D}$  (кривые 1 и 2 на рис. 5). Очевидно, что уменьшение параметра  $\tau_{h_g} \rightarrow 0$  приведёт к перманентности  $h_D$  на первой стадии реализации процесса фрагментации и, впоследствии, к более выраженному почти вертикальному линейному участку, который в пределе полностью совпадёт с линией изоклин, что можно рассматривать как обратное адиабатическое приближение  $\tau_{h_D} \gg \tau_{h_g}$ .

Наблюдаемым особым участками можно придать значение притягивающего множества, обозначенного в работе [24] как «русло большой реки», которое характерно для различных физических систем [25–27]. При этом универсальность кинетической картины фазового перехода состоит в том, что, независимо от начальных условий, с приближением к адиабатическому пределу  $\tau_{h_D} \rightarrow 0$  (рис. 2, а) или  $\tau_{h_g} \rightarrow 0$  (рис. 2, в) система быстро эволюционирует к соответствующему особому участку, положение которого зависит только от способа механической обработки и соб-

ственно значений  $\varepsilon_{ii}^e$ ,  $I_2$ , и в дальнейшем медленно развивается вдоль этих траекторий.

На рисунке 4 отображены фазовые портреты для таких же соотношений времён релаксации, что и рис. 2, однако при упругой деформаций, определяющей возможность одновременного существования двух предельных структур. Заметим, что в данном случае, фазовые портреты на рис. 4 отображают изменения, характерные для фазовых переходов первого рода [25, 28]. Следовательно, в зависимости от варьирования величины  $\tau_{h_m}$  ( $m = g, D$ ), формируются одновременно два линейных участка (определённые как «русло большой реки»), к которым со временем стремятся все фазовые траектории. Одновременное существование этих участков объясняется природой штрихпунктирной кривой и характерными условиями для упругой деформации (значениями  $\varepsilon_{ii}^e$  и  $I_2$ ), при которых стационарное кубическое уравнение имеет три решения. Таким образом, очевидно, что на фазовых портретах появляется дополнительный «репеллерный» участок, который проходит через седловую точку  $S_A$  (см. штрихпунктирную кривую) и отображает переход системы через энергетическую яму (см. вид термодинамического потенциала  $V(h_g)$  в [7–9]), разделяющую линейные области. При этом фазовые траектории, при определённых условиях, огибают этот участок, удаляясь со временем от линии его расположения.

При  $\tau_{h_g} > 10^{-1} \tau_{h_D}$  наблюдается поведение системы, представленное на рис. 4, а. Здесь, как и на рис. 2, а, фазовые траектории быстро эволюционируют к линейным участкам, близким к штриховой линии изоклин, при сохранении значений переменной  $h_g$ . Рассматривая начальные приближения слева от особой точки  $S_A$ , формируется первый линейный участок, вдоль которого система медленно релаксирует к стационарному состоянию  $O_A$ . Вторым участком, демонстрирующим протяжённую эволюцию системы к упорядоченной фазе в точке  $D_A$ , реализуется при начальных условиях, расположенных справа от  $S_A$ . Однако, в зависимости от расположения начальных условий относительно особых участков, процесс их достижения на первом этапе обработки материала сопровождается как мгновенной генерацией, так и аннигиляцией плотностей дислокаций  $h_D$ . С приближением к адиабатической границе  $\tau_{h_D} \rightarrow 0$ , как и для случая на рис. 2, а, наблюдается замедление в реализации стационарных режимов, что также можно обнаружить, изучая временную зависимость пройденного пути по фазовой траектории (кривая 1 на рис. 3, б).

Исследуя приближения к обратной адиабатике  $\tau_{h_D} \gg \tau_{h_g}$ , которой отвечают случаи на рис. 4, б, в, видно, что с уменьшением параметра  $\tau_{h_g}$  в универсальном поведении системы наблюдается плавный переход от почти горизонтальных линейных участков к более вертикальным. При этом, общее время эволюции к устойчивым стационарным состояниям, в отличие от предыдущего случая на рис. 4, а, с приближением к границе  $\tau_{h_g} \rightarrow 0$  уменьшается, что также проявляется в эволюции кривых 2, 3 на рис. 3, б. Изучая особенности фазовой динамики неравновесных переменных на рис. 4, в, отчётливо наблюдается формирование трёх особых участков, два из которых имеют притягивающий характер и определяются как «русло большой реки», а третий, который разделяет квазивертикальные участки, имеет противоположную природу, более известную как «репеллер». Как видно, фазовые траектории системы стремятся избежать пересечения с областью «репеллера». Очевидно, что с дальнейшим уменьшением времени релаксации плотности ГЗ  $\tau_{h_g}$ , почти вертикальные участки будут удлиняться вдоль штрихпунктирной зависимости, а в пределе полностью совпадут со стационарной кривой.

Таким образом, универсальность кинетического поведения двухдефектной системы проявляется как при приближении к прямой  $\tau_{h_g} \gg \tau_{h_D}$ , так и к обратной  $\tau_{h_D} \gg \tau_{h_g}$  адиабатике для любого режима фрагментации. При этом, изучая поведение системы (3), (4) в рамках представленных адиабатических приближений, получаем идентичные выражения для основных зависимостей. Что также видно на рис. 5, поскольку система, независимо от адиабатического приближения (кривые 1' и 2') эволюционирует к единым с реальными временными зависимостями (кривые 1 и 2) стационарным состояниям, которые, в отличие от наблюдаемых на рис. 3 закономерностей, формируются в одинаковом временном интервале. Но поведение неравновесных переменных во время достижения этих значений определяется более резкими переходами.

Безусловно, с точки зрения описания наблюдаемых процессов и природы фрагментации металлов или сплавов во время ИПД более информативно исследовать точную кинетику двухдефектной системы (3), (4). Но рассмотрение предельных адиабатических подходов играет не менее важную роль, поскольку позволяет получить дополнительные зависимости, определяющие условия существования нескольких предельных структур и позволяющие подобрать оптимальные значения для упругих деформаций, которые способствуют наиболее эффективному формирова-

нию упорядоченной СМК или НК структуры с высокими концентрациями дефектов и стабильными физико-механическими свойствами.

#### 4. ВЫВОДЫ

В рамках неравновесной эволюционной термодинамики, на основе двухдефектного приближения, изучен процесс фрагментации кристаллической структуры при ИПД. В качестве основных структурных дефектов выбраны границы зёрен и дислокации. Рассматривая адиабатическое приближение, согласно которому состояние системы определяется эволюцией плотности ГЗ, построена фазовая диаграмма, позволяющая определить формирование стационарных СМК или НК структур.

Изучено влияние времён релаксации на фазовую динамику неравновесных переменных системы. Показано, что с приближением как к прямой  $\tau_{h_g} \gg \tau_{h_D}$ , так и к обратной адиабатике  $\tau_{h_D} \gg \tau_{h_g}$  система демонстрирует универсальное кинетическое поведение. Особенность такого поведения проявляется в формировании на фазовых портретах соответствующих почти линейных участков, более известных как «русло большой реки», к которым, независимо от начальных условий, быстро эволюционируют все фазовые траектории. Исследуя приближения к обратной адиабатике  $\tau_{h_D} \gg \tau_{h_g}$ , выявлено, что с уменьшением параметра  $\tau_{h_g}$  в универсальном поведении системы наблюдается плавный переход от почти горизонтальных линейных участков к более вертикальным, что также проявляется в ускорении эволюции к устойчивым стационарным состояниям. Изучая особенности фазовой динамики неравновесных переменных, для случая, который демонстрирует одновременное существование двух предельных структур, выявлено формирование трёх особых участков, два из которых имеют притягивающий характер и определяются как «русло большой реки», а третий, который разделяет вертикальные участки, имеет противоположную природу, более известную как «репеллер».

Работа выполнена при поддержке Министерства образования и науки Украины (проект «Неравновесная термодинамика фрагментации металлов и трения пространственно-неоднородных граничных смазок между поверхностями с наноразмерными неровностями», № 0115U000692).

## ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. В. М. Сегал, В. И. Резников, В. И. Копылов, Д. А. Павлик, В. Ф. Малышев, *Процессы пластического структурообразования металлов* (Минск: Новые технологии: 1994).
2. A. P. Zhilyaev and T. G. Langdon, *Prog. Mater. Sci.*, **53**: 893 (2008).
3. H. Nakauma, K. K. Tsuchiya, and M. Umemoto, *Scr. Mater.*, **44**, Nos. 8–9: 1781 (2001).
4. J. Y. Huang, Y. T. Zhu, X. Z. Liao, and R. Z. Valiev, *Philos. Mag. Lett.*, **84**, No. 3: 183 (2004).
5. F. X. Zhang and W. K. Wang, *J. Alloy Comp.*, **240**, Nos. 1–2: 256 (1996).
6. L. S. Metlov, *Phys. Rev. E*, **90**, No. 2: 022124 (2014).
7. A. V. Khomenko, D. S. Troshchenko, and L. S. Metlov, *Condens. Matter Phys.*, **18**, No. 3: 33004 (2015).
8. А. В. Хоменко, Д. С. Трощенко, Д. В. Бойко, М. В. Захаров, *Ж. нано-электрон. физ.*, **7**, № 1: 01039 (2015).
9. A. V. Khomenko, D. S. Troshchenko, K. P. Khomenko, and I. O. Solonar, *Proceedings of the International Conference 'Nanomaterials: Applications and Properties'*, **5**, No. 1: 01PCSI07 (2016).
10. Л. С. Метлов, *Неравновесная эволюционная термодинамика и ее приложения* (Донецк: Ноулидж: 2014).
11. Г. А. Малыгин, *ФТТ*, **44**, № 11: 1979 (2002).
12. А. А. Мазилкин, Б. Б. Страумал, С. Г. Протасова, О. А. Когтенкова, Р. З. Валиев, *ФТТ*, **49**, № 5: 824 (2007).
13. А. Д. Погребняк, А. А. Багдасарян, И. В. Якущенко, В. М. Береснев, *Успехи химии*, **83**, № 11: 1027 (2014).
14. И. А. Биргер, Р. Р. Мавлютов, *Сопротивление материалов* (Москва: Наука: 1986).
15. Л. С. Метлов, В. Н. Варюхин, *Физика и техника высоких давлений*, **22**, № 2: 7 (2012).
16. Л. С. Метлов, *Вестник ДонГУ, Сер. А: Естественные науки*, **2**: 144 (2009).
17. Р. К. Исламгалиев, К. М. Нестеров, Р. З. Валиев, *Вестник УГАТУ*, **17**, № 4: 81 (2013).
18. И. Г. Бродова, *Журнал СФУ. Техника и технологии*, **8**, № 4: 519 (2015).
19. А. В. Хоменко, Я. А. Ляшенко, *ЖТФ*, **80**, № 1: 27 (2010).
20. D. S. Troshchenko and A. V. Khomenko, *Abstr. Int. Conf. 'Nanotechnologies' (Oct. 24–27, 2016)* (Tbilisi: GTU: 2016), p. 208.
21. О. В. Хоменко, Я. О. Ляшенко, *Журнал фізичних досліджень*, **11**, № 3: 268 (2007).
22. A. Yamashita, D. Yamaguchi, Z. Horita, and T. G. Langdon, *Mater. Sci. Eng.: A*, **287**, No. 1: 100 (2000).
23. В. И. Соколенко, А. В. Мац, В. А. Мац, *Физика и техника высоких давлений*, **23**, № 2: 96 (2013).
24. А. С. Зельцер, Т. К. Соболева, А. Э. Филиппов, *ЖЭТФ*, **108**, № 1: 356 (1995).
25. А. И. Олемской, А. В. Хоменко, *ЖЭТФ*, **110**, № 6: 2144 (1996).
26. A. I. Olemskoi, A. V. Khomenko, and D. O. Kharchenko, *Physica A: Statistical Mechanics and Its Applications*, **323**: 263 (2003).
27. A. I. Olemskoi and A. V. Khomenko, *Phys. Rev. E*, **63**: 036116 (2001).
28. L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Course of Theoretical Physics: Statistical*



*Physics* (London: Butterworth: 1999), vol. 5.

## REFERENCES

1. V. M. Segal, V. I. Reznikov, V. I. Kopylov, D. A. Pavlik, and V. F. Malyshev, *Protsessy Plasticheskogo Strukturoobrazovaniya Metallov* (Minsk: Novyye Tekhnologii: 1994) (in Russian).
2. A. P. Zhilyaev and T. G. Langdon, *Prog. Mater. Sci.*, **53**: 893 (2008).
3. H. Nakayma, K. K. Tsuchiya, and M. Umemoto, *Scr. Mater.*, **44**, Nos. 8–9: 1781 (2001).
4. J. Y. Huang, Y. T. Zhu, X. Z. Liao, and R. Z. Valiev, *Philos. Mag. Lett.*, **84**, No. 3: 183 (2004).
5. F. X. Zhang and W. K. Wang, *J. Alloy Comp.*, **240**, Nos. 1–2: 256 (1996).
6. L. S. Metlov, *Phys. Rev. E*, **90**, No. 2: 022124 (2014).
7. A. V. Khomenko, D. S. Troshchenko, and L. S. Metlov, *Condens. Matter Phys.*, **18**, No. 3: 33004 (2015).
8. A. V. Khomenko, D. S. Troshchenko, D. V. Boyko, and M. V. Zaharov, *Zh. Nano- Elektron. Fiz.* [J. Nano- Electron. Phys.], **7**, No. 1: 01039 (2015) (in Russian).
9. A. V. Khomenko, D. S. Troshchenko, K. P. Khomenko, and I. O. Solonar, *Proceedings of the International Conference 'Nanomaterials: Applications and Properties'*, **5**, No. 1: 01PCSI07 (2016).
10. L. S. Metlov, *Neravnovesnaya Evolyutsionnaya Termodinamika i Eyo Prilozheniya* [Nonequilibrium Evolution Thermodynamics and Its Applications] (Donetsk: Noulidge: 2014) (in Russian).
11. G. A. Malygin, *Phys. Solid State*, **44**, No. 11: 2072 (2002).
12. A. A. Mazilkin, B. B. Straumal, S. G. Protasova, O. A. Kogtenkova, R. Z. Valiev, *Phys. Solid State*, **49**, No. 5: 868 (2007).
13. A. D. Pogrebnjak, A. A. Bagdasaryan, I. V. Yakushchenko, V. M. Beresnev, *Russ. Chem. Rev.*, **83**, No. 11: 1027 (2014).
14. I. A. Birger and R. R. Mavlyutov, *Soprotivlenie Materialov* (Moscow: Nauka: 1986) (in Russian).
15. L. S. Metlov and V. N. Varyukhin, *Fiz. Tekhn. Vysokikh Davleniy*, **22**, No. 2: 7 (2012) (in Russian).
16. L. S. Metlov, *Vestnik DonGU, Ser. A: Estestvennyye Nauki* [Bulletin of the DonNU. Ser A: Natural Sciences], **2**: 144 (2009) (in Russian).
17. R. K. Islamgaliev, K. M. Nesterov, and R. Z. Valiev, *Vestnik UGATU*, **17**, No. 4: 81 (2013) (in Russian).
18. I. G. Brodova, *Zhurnal SFU. Tekhnika i Tekhnologii* [Journal of SibFU. Engineering and Technologies], **8**, No. 4: 519 (2015) (in Russian).
19. A. V. Khomenko and I. A. Lyashenko, *Tech. Phys.*, **55**, No. 1: 26 (2010).
20. D. S. Troshchenko and A. V. Khomenko, *Abstr. Int. Conf. 'Nanotechnologies' (Oct. 24–27, 2016)* (Tbilisi: GTU: 2016), p. 208.
21. A. V. Khomenko and I. A. Lyashenko, *Zhurnal Fizychnykh Doslidzhen'* [Journal of Physical Studies], **11**, No. 3: 268 (2007) (in Ukrainian).
22. A. Yamashita, D. Yamaguchi, Z. Horita, and T. G. Langdon, *Mater. Sci. Eng.: A*, **287**, No. 1: 100 (2000).
23. V. I. Sokolenko, A. V. Mats, and V. A. Mats, *Fiz. Tekhn. Vysokikh Davleniy*,

- 23, No. 2: 96 (2013) (in Russian).
24. A. S. Zel'tser, T. K. Soboleva, and A. E. Filippov, *JETP*, **81**, No. 1: 193 (1995).
25. A. I. Olemskoi and A. V. Khomenko, *JETP*, **83**, No. 6: 1180 (1996).
26. A. I. Olemskoi, A. V. Khomenko, and D. O. Kharchenko, *Physica A: Statistical Mechanics and Its Applications*, **323**: 263 (2003).
27. A. I. Olemskoi and A. V. Khomenko, *Phys. Rev. E*, **63**: 036116 (2001).
28. L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Course of Theoretical Physics, Statistical Physics* (London: Butterworth: 1999), vol. 5.

---

<sup>1</sup>*Sumy State University,  
2, Rimsky-Korsakov Str.,  
40007 Sumy, Ukraine*

<sup>2</sup>*Donetsk Institute for Physics and Engineering Named After A. A. Galkin, N.A.S. of Ukraine,  
46, Nauky Ave.,  
03028 Kyiv, Ukraine*

<sup>1</sup> Fig. 1. Phase diagram of fragmentation regimes [9].

<sup>2</sup> Fig. 2. The phase portraits of two-defects' system (3), (4) at elastic strains  $\varepsilon_{ii}^e = -0.1\%$ ,  $I_2 = 5 \cdot 10^{-4}\%$  (point 1 in Fig. 1) and the values of relaxation time: (a)  $\tau_{h_g} > 10^{-1}\tau_{h_D}$ ; (b)  $10^{-1}\tau_{h_g} > \tau_{h_D}$ ; (c)  $10^{-2}\tau_{h_g} > \tau_{h_D}$ .

<sup>3</sup> Fig. 3. The time dependence of way  $l$  passed by configuration point on phase trajectory: (a) curve 1 corresponds to phase portrait in Fig. 2, a, curve 2 to Fig. 2, b and curve 3 to Fig. 2, c; (b) curve 1 determines the case presented in Fig. 4, a, curve 2 in Fig. 4, b and curve 3 in Fig. 4, c. The beginning of way  $l$  was tagged by criss-cross in corresponding figures.

<sup>4</sup> Fig. 4. The phase portraits of two-defect system (3), (4) at elastic strain  $\varepsilon_{ii}^e = -0.05\%$ ,  $I_2 = 2.5 \cdot 10^{-4}\%$  (point 2 in Fig. 1) and the values of relaxation time: (a)  $\tau_{h_g} > 10^{-1}\tau_{h_D}$ ; (b)  $10^{-1}\tau_{h_g} > \tau_{h_D}$ ; (c)  $10^{-2}\tau_{h_g} > \tau_{h_D}$ .

<sup>5</sup> Fig. 5. The kinetics of metals' fragmentation during SPD at invariants' values  $\varepsilon_{ii}^e = -0.1\%$ ,  $I_2 = 5 \cdot 10^{-4}\%$ . The curve 1 shows the evolution of dislocation density  $h_D(t)$  according to Eq. (3), while the curve 2 demonstrates changes of  $h_g(t)$  for Eq. (4) at  $\tau_{h_D} = 1/\gamma_D = 3^{-1} \cdot 10^{-25}$  J·m·s,  $\tau_{h_g} = 1/\gamma_g = 10^{-6}$  J·m<sup>-1</sup>·s. Curves 1' and 2' reflect the time dependences within the adiabatic approximations  $\tau_{h_D} \gg \tau_{h_g}$  and, respectively,  $\tau_{h_g} \gg \tau_{h_D}$ .