

PACS: 05.70.Ln, 61.72.Bb, 61.72.Cc, 62.20.Fe

Л.С. Метлов, В.Н. Варюхин

МОДЕЛИРОВАНИЕ ЗАКОНОВ УПРОЧНЕНИЯ ПРИ ИПД ОБЪЕМНЫХ ТВЕРДЫХ ТЕЛ МЕТОДАМИ НЕРАВНОВЕСНОЙ ЭВОЛЮЦИОННОЙ ТЕРМОДИНАМИКИ.

I. ЗАВИСИМОСТИ ОТ ПАРАМЕТРОВ ЗАДАЧИ

Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина НАН Украины
ул. Р. Люксембург, 72, г. Донецк, 83114, Украина

Статья поступила в редакцию 20 марта 2012 года

В рамках неравновесной эволюционной термодинамики рассмотрена взаимная кинетика таких дефектов, как дислокации и границы зерен в металлах при обработке их методами интенсивной пластической деформации (ИПД), и рассмотрено влияние этой кинетики на законы упрочнения. Задача исследована при различных вариациях параметров модели. Установленные закономерности позволяют лучше понять роль влияния гидростатического давления (противодавления) на производство изученных типов дефектов. Показано, что в пренебрежении квадратичными вкладами по гидростатическому давлению рост последнего приводит к подавлению генерации всех типов дефектов. Наоборот, негидростатические компоненты напряжений (упругих деформаций) являются главной причиной генерации дефектов. Установлено, что между производством одного типа дефектов (например, дислокаций) и другого (например, границ зерен) существует положительная обратная связь, способствующая взаимному усилению их производства.

Ключевые слова: интенсивная пластическая деформация, неравновесная термодинамика, кинетика, законы упрочнения, дефекты, дислокации, границы зерен, давление

Обработка металлов методами ИПД является одним из наиболее перспективных методов получения материалов с высокими физическими и механическими свойствами [1,2]. При такой обработке особое внимание уделяется вопросам формирования прочностных свойств, изучению механизмов пластической деформации, приводящих к таким свойствам, и влияния на эти процессы различных факторов, в том числе размера зерна [3–8]. В Донецком физико-техническом институте для описания таких процессов развивается новый теоретический подход – неравновесная эволюционная термодинамика (НЭТ) [9–18]. Его основу составляют 1-й и 2-й законы термодинамики в сочетании с эволюционными уравнениями Ландау. Основная задача подхода заключается в исследовании кинетики дефектообразо-

вания в многоуровневых системах с несколькими типами дефектов с учетом их взаимовлияния, что позволяет моделировать законы упрочнения объемных твердых тел при ИПД.

Статья состоит из двух частей. В первой кинетика дефектообразования и законы упрочнения исследуются при различных значениях параметров модели, во второй – дополнительно учитывается зависимость их от температуры и вида напряженного состояния. Во второй части будет также обсуждена идея, основанная на понимании в рамках НЭТ роли гидростатического давления (противодавления), которая может быть положена в основу разработки новых методов обработки металлов или, по крайней мере, использована для оптимизации режимов обработки уже существующих методов ИПД.

В качестве базового термодинамического потенциала в НЭТ используется внутренняя энергия [9–18] или эффективная внутренняя энергия [16,18]. Задавая аналитическую зависимость их от плотностей дефектов, мы определяем конкретную модель материала. Наиболее простая модель соответствует полиномиальному представлению эффективной внутренней энергии в виде

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

где u_0 , φ_{km} , φ_{gD} – некоторые коэффициенты, зависящие от переменных s (равновесной части энтропии) и ε_{ij}^e (упругой деформации) как от управляющих параметров:

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

$$\varphi_{0m} = \varphi_{0m}^* + g_m \varepsilon_{ii}^e + \left(\frac{1}{2} \bar{\lambda}_m (\varepsilon_{ii}^e)^2 + \bar{\mu}_m (\varepsilon_{ij}^e)^2 \right) - \beta_m s + \beta_{gm} s \varepsilon_{ij}^e, \quad (3)$$

$$\varphi_{1m} = \varphi_{1m}^* - 2e_m \varepsilon_{ii}^e, \quad (4)$$

где ε_{ii}^e – первый инвариант тензора упругих деформаций, $(\varepsilon_{ij}^e)^2 = \varepsilon_{ij}^e \varepsilon_{ji}^e$.

Слагаемые в круглых скобках в (1) описывают вклады от каждой отдельной дефектной подсистемы – дислокаций (индекс D) и границ зерен (индекс g), последнее слагаемое описывает взаимодействие дефектных подсистем.

Несмотря на простоту, модель, задаваемая соотношениями (1)–(4), является достаточно общей. Примем, что модель является одно- или двухуровневой, если она описывает соответственно один или два вида структурных дефектов. Примем также, что модель является одно- или двухмодовой, если максимальная степень полинома n равна двум или четырем. Может быть

также полумодовое приближение. Количество мод определяется количеством устойчивых стационарных решений или максимумов эффективной внутренней энергии: одна – в приближении квадратичного полинома, и две – в приближении полинома четвертой степени.

Полином четвертой степени в круглых скобках (1) при положительных значениях коэффициентов φ_{km} может иметь два максимума (две моды). В случае дислокаций мода, которая отвечает меньшему значению дефектности, может описывать случайное распределение дислокаций. Мода, которая отвечает большему значению дефектности, может описывать дислокации, организованные в ячеистую структуру. Мы будем ограничиваться случаем однородного распределения дислокаций, и поэтому будем пренебрегать старшими степенями при описании эволюции дислокаций $\varphi_{3D} = 0$ и $\varphi_{4D} = 0$.

Эволюционные уравнения в этом конкретном случае можно записать в явном виде

$$\frac{\partial h_D}{\partial t} = \gamma_{h_D} (\varphi_{0D} - \varphi_{1D} h_D + \varphi_{gD} h_g). \quad (5)$$

$$\frac{\partial h_g}{\partial t} = \gamma_{h_g} (\varphi_{0g} - \varphi_{1g} h_g + \varphi_{2g} h_g^2 - \varphi_{3g} h_g^3 + \varphi_{gD} h_g). \quad (6)$$

Рассмотрим следующий набор параметров модели и коэффициентов для расчетов:

$$\begin{aligned} \lambda = \mu = 2.08 \cdot 10^{10} \text{ Па}, \quad \varphi_{0D}^* = 5 \cdot 10^{-9} \text{ Дж} \cdot \text{м}^{-1}, \quad \varphi_{1D}^* = 10^{-24} \text{ Дж} \cdot \text{м}, \quad g_D = 2 \cdot 10^{-8} \text{ Дж} \cdot \text{м}^{-1}, \\ \bar{\mu}_D = 3.3 \cdot 10^{-4} \text{ Дж} \cdot \text{м}^{-1}, \quad e_D = 6 \cdot 10^{-23} \text{ Дж} \cdot \text{м}, \quad \varphi_{0g}^* = 0.4 \text{ Дж} \cdot \text{м}^{-2}, \quad \varphi_{1g}^* = 3 \cdot 10^{-6} \text{ Дж} \cdot \text{м}^{-1}, \\ \varphi_{2g} = 5.6 \cdot 10^{-13} \text{ Дж}, \quad \varphi_{3g} = 3 \cdot 10^{-20} \text{ Дж} \cdot \text{м}, \quad g_g = 12 \text{ Дж} \cdot \text{м}^{-2}, \quad \bar{\lambda}_g = 2.5 \cdot 10^5 \text{ Дж} \cdot \text{м}^{-2}, \\ \bar{\mu}_g = 6 \cdot 10^5 \text{ Дж} \cdot \text{м}^{-2}, \quad e_g = 3.6 \cdot 10^{-4} \text{ Дж} \cdot \text{м}^{-1}, \quad \varphi_{gD} = 10^{-16} \text{ Дж}. \end{aligned}$$

Расчет кинетики системы при этих параметрах и коэффициентах приведен на рис. 1, I. Из рисунка видно, что в процессе структурно-фазового перехода кинетика границ зерен и кинетика дислокаций тесно связаны между собой. Сначала рост количества дислокаций инициирует рост границ зерен и провоцирует начало структурно-фазового перехода, а потом рост плотности границ зерен именно в процессе такого перехода провоцирует рост плотности дислокаций. Вследствие этого кинетическая кривая для дислокаций в какой-то степени повторяет форму кинетической кривой для границ зерен.

Известно, что на дислокационном уровне закон упрочнения описывается соотношением Тейлора [19,20]:

$$\tau = \alpha \mu b \sqrt{h_D} \quad (7)$$

(где τ – напряжение сдвига; α – коэффициент, который меньше единицы; μ – модуль сдвига; b – вектор Бюргерса; h_D – плотность дислокаций) или в терминах НЭТ

$$\varepsilon^e = \alpha b \sqrt{h_D}, \quad (8)$$

где $\varepsilon^e = \tau/\mu$.

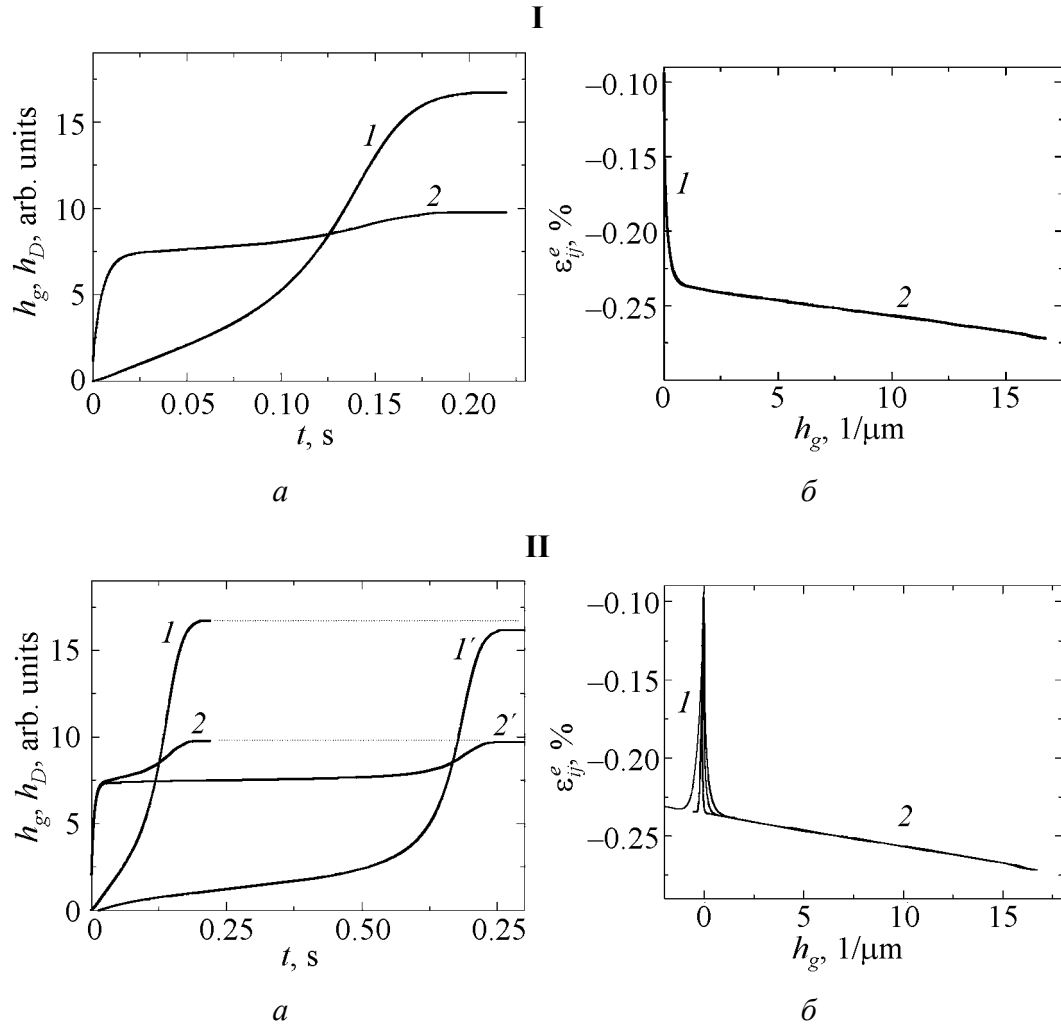
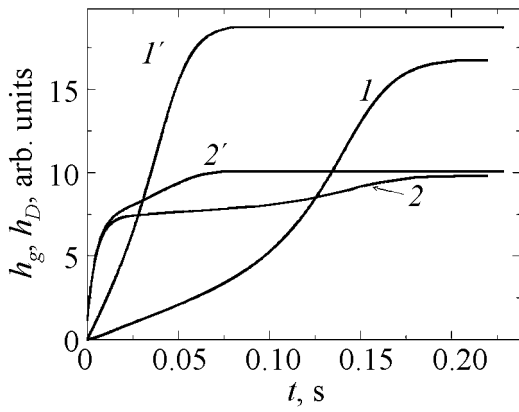
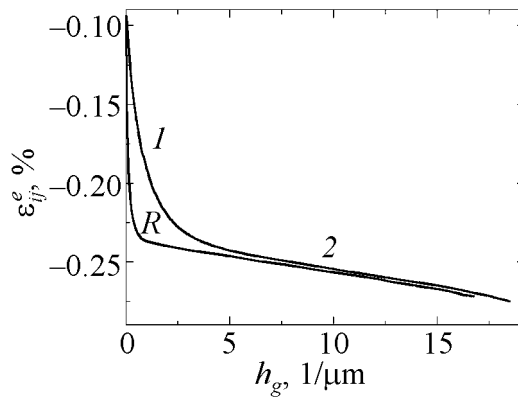


Рис. 1. Закономерности дефектообразования в процессе фрагментации: *a* – кинетика дефектов: *I* – плотность границ зерен; *2* – плотность дислокаций (без штриха относится к референтному случаю, со штрихом – текущие значения параметров); *б* – закон упрочнения: *I* – участок закона Холла–Петча; *2* – участок линейного закона упрочнения, символом *R* помечен референтный случай. I – референтный случай; II – при вариации параметра $g_g = 2000$; III – при $g_g = 10^4$; IV – при вариации параметра $g_D = -2 \cdot 10^{-6}$; V – для отрицательных параметров $g_g = 10^4$ и $g_D = 2 \cdot 10^{-6}$ (далее – новая референтная модель); VI – при вариации параметра $\bar{\mu}_g$; VII – параметра $\bar{\mu}_D$; VIII – параметра $\bar{\lambda}_g$; IX – параметра $\bar{\lambda}_D$; X – параметра e_g ; XI – параметра e_D ; XII – параметра φ_{2g} ; XIII – параметра φ_{3g} ; XIV – параметра φ_{gD}

III

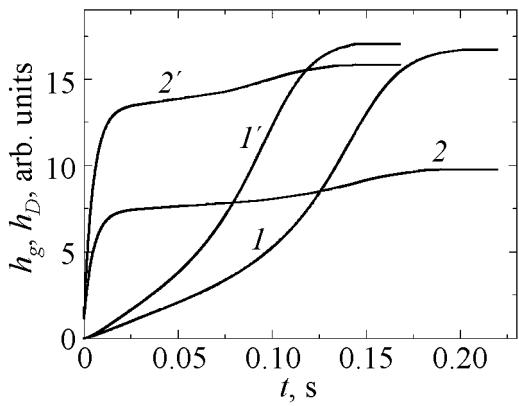


a

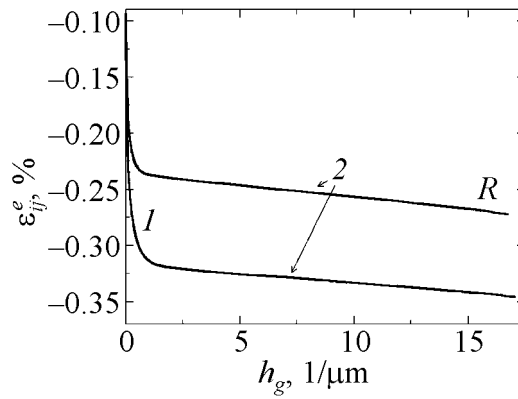


б

IV

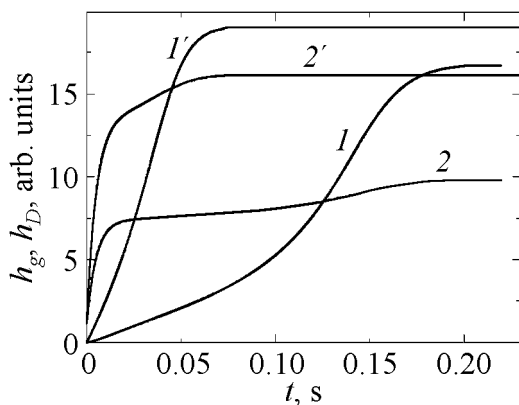


a

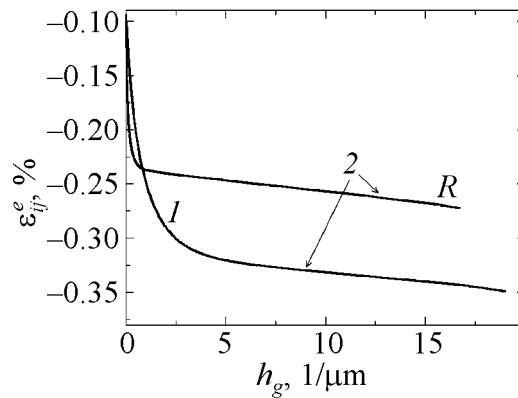


б

V



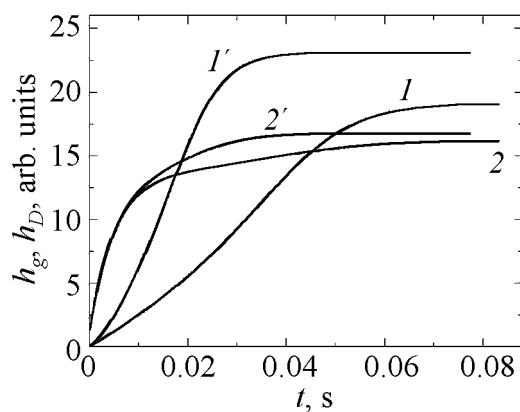
a



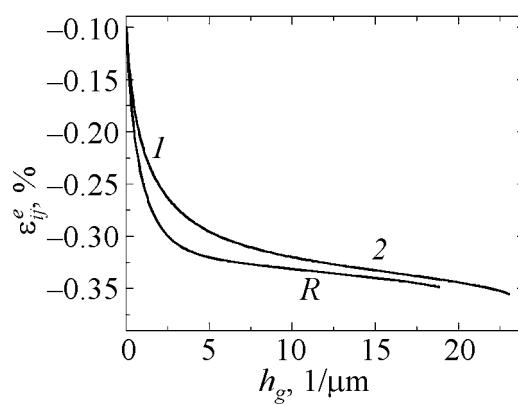
б

Продолжение рис. 1

VI

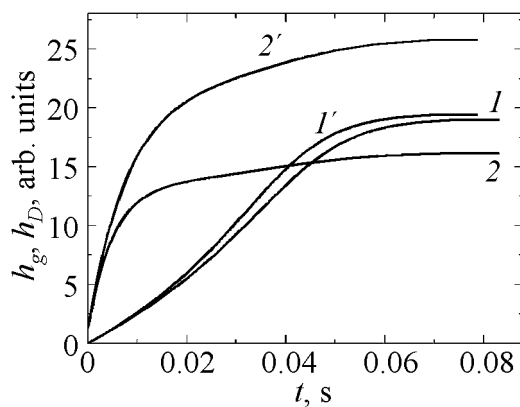


a

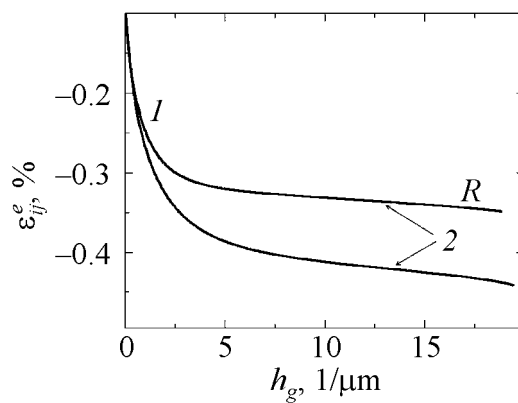


б

VII

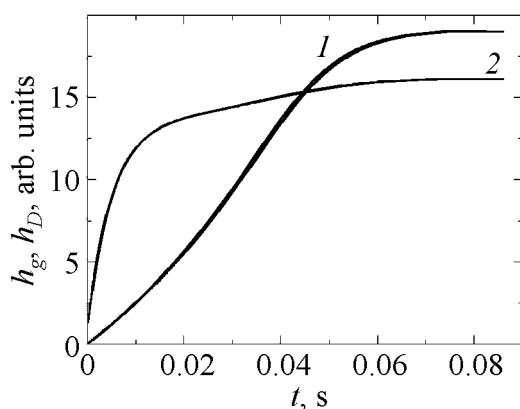


a

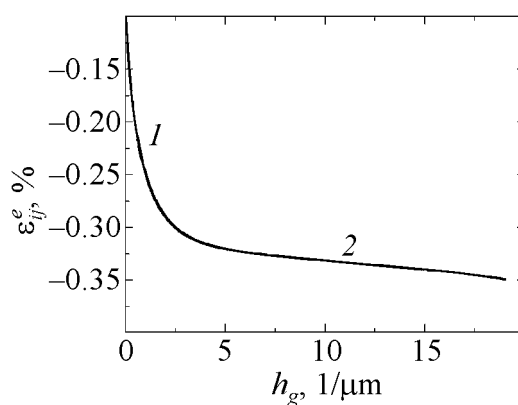


б

VIII



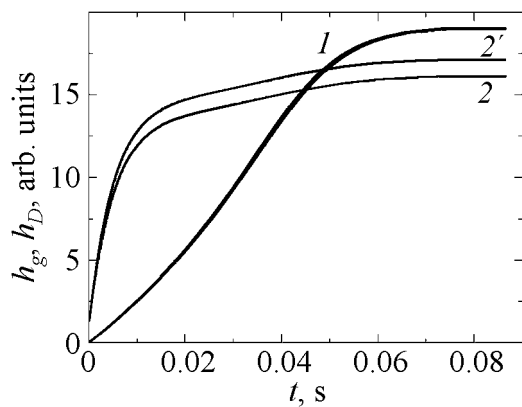
a



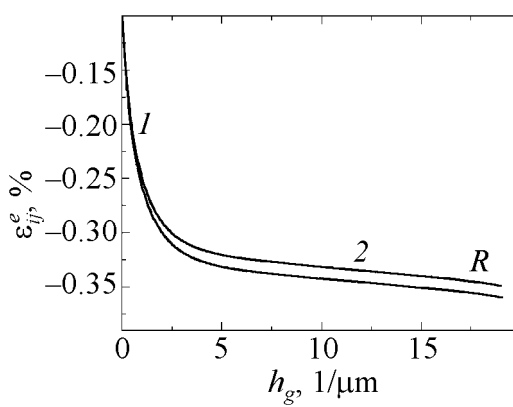
б

Продолжение рис. 1

IX

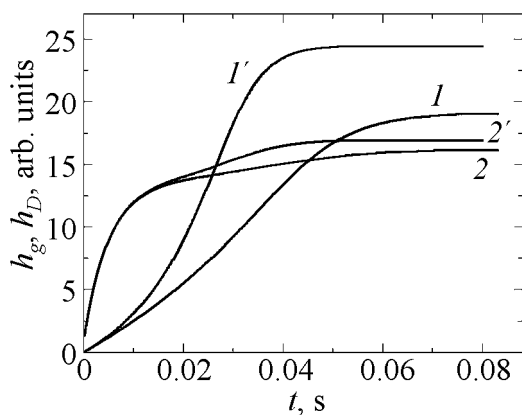


a

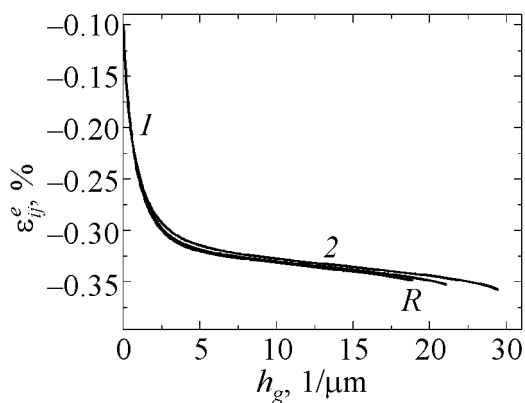


б

X

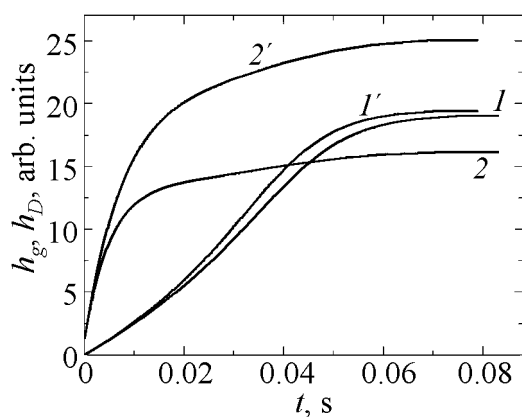


a

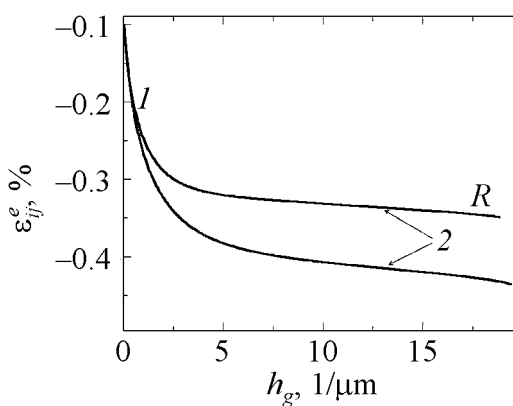


б

XI



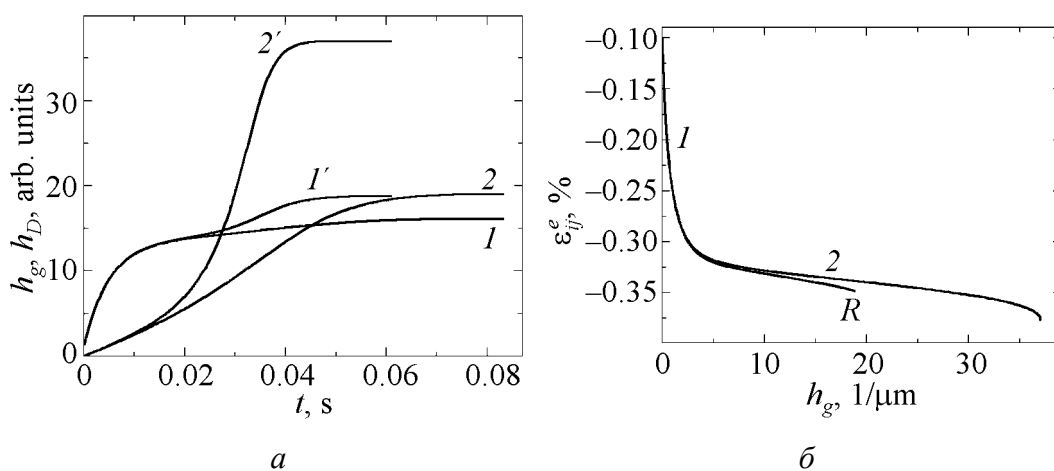
a



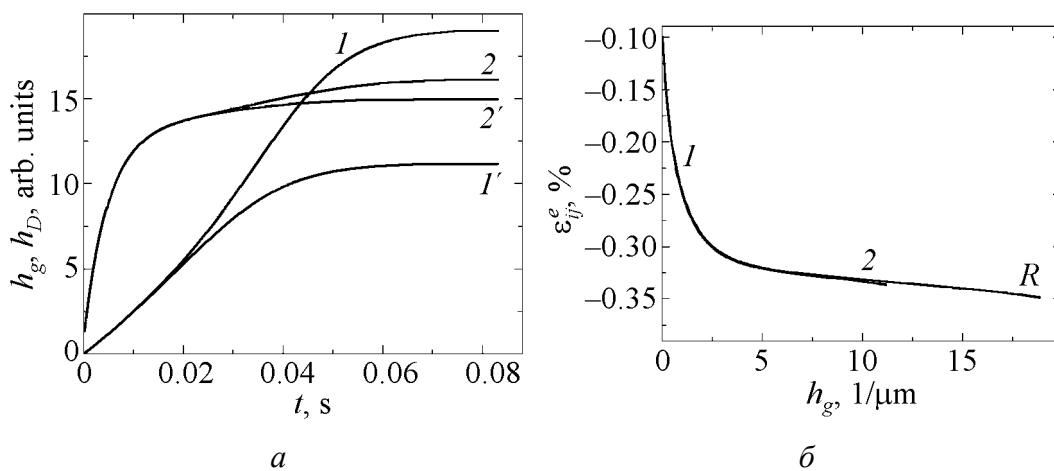
б

Продолжение рис. 1

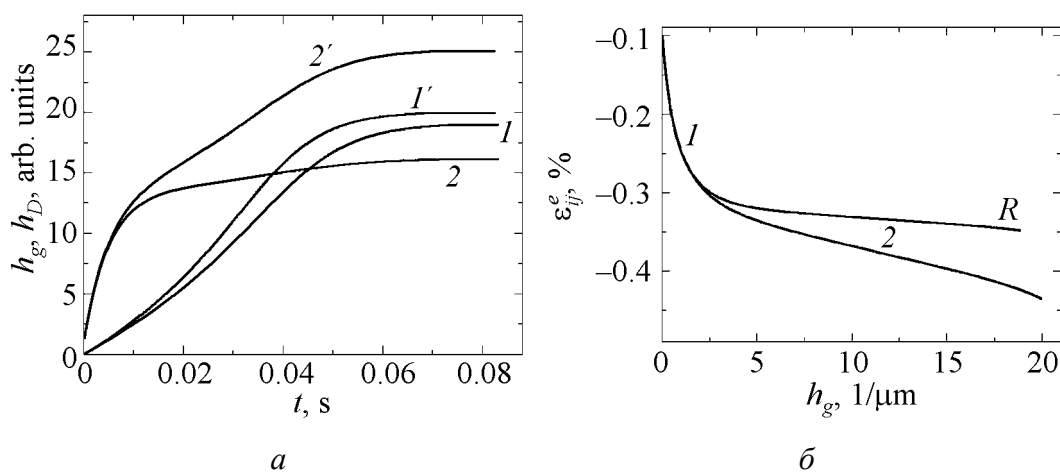
XII



XIII



XIV



Окончание рис. 1

На уровне зерен на начальной стадии (участок 1 на рис. 1, I, б) кривая упрочнения может быть аппроксимирована корнемкватратичной зависимостью типа Холла–Петча:

$$\varepsilon_{ij}^e = \varepsilon_{ij}^{e0} - A\sqrt{h_g}, \quad (9)$$

а на стадии ИПД (участок 2 на рис. 1, I, б, который соответствует наиболее быстрому изменению плотностей дефектов на рис. 1, I, а) – линейной зависимостью

$$\varepsilon_{ij}^e = \varepsilon_{ij}^{e1} - Bh_g. \quad (10)$$

Именно такой характер зависимости отмечался в работе [19].

Теперь рассмотрим характер изменения кинетических кривых (рис. 1, I, а) и кривых упрочнения (рис. 1, I, б) в зависимости от значений параметров модели, т.е. коэффициентов разложения внутренней энергии (1). Первое слагаемое u_0 представляет собой внутреннюю энергию идеального упругого тела без дефектов. В него входят упругая энергия деформированного тела с упругими модулями и тепловая энергия за счет теплопереноса без учета внутренних источников тепла (2). Эта энергия не влияет на кинетические процессы напрямую, и поэтому она отдельно рассматриваться не будет. Коэффициенты φ_{0g} и φ_{0D} при наименьшей степени в разложении внутренней энергии по плотности дефектов h_g и h_D оказывают наиболее существенное влияние на кинетику системы. Эти коэффициенты, в свою очередь, имеют сложное строение в зависимости от управляющих параметров s и ε_{ij}^e .

Прежде всего исследуем влияние на кинетику системы параметра g_g , отвечающего за влияние на кинетику дефектов гидростатического давления (через упругую деформацию). С ростом параметра на интервале 12, 1000, 2000, 3000, 5000 (кривые на рис. 1, II, б справа налево) эволюция системы замедляется. При значениях 3000 и выше кривая упрочнения загибается даже в противоположную сторону и выходит в отрицательную область значений плотности границ зерен, которые не имеют физического смысла. Существование точки, где кривые упрочнения загибаются в противоположную сторону, свидетельствует об эффекте насыщения, когда давление больше некоторого критического значения полностью подавляет дефектообразование и даже приводит к росту среднего размера зерна, т.е. к рекристаллизации.

Замедление эволюции можно наблюдать непосредственно по кинетическим кривым (рис. 1, II, а) для случая $g_g = 2000$ (стадии быстрого производства дефектов смещаются в область больших времен). Этот результат вполне ожидаемый, ибо при сдавливающих напряжениях условия для формирования дефектов ухудшаются, а рост параметра g_g усиливает влияние гидростатического давления. Некоторой неожиданностью является то, что конечный уровень плотности и границ зерен, и дислокаций

почти такой же, как для референтного случая, хотя и достигается с некоторой задержкой.

При положительных значениях g_g и при растяжении ($\varepsilon_{ij}^e > 0$) коэффициент φ_{0g} растет при увеличении как g_g , так и ε_{ij}^e . Совершенно ясно, что растяжение должно облегчать формирование границ зерен, поскольку способствует формированию избыточного объема, связанного с существованием границы, и таким способом повышает энергию границы. Теперь можно поставить вопрос, можно ли всестороннее растяжение использовать для формирования более мелкозеренной структуры. Рассмотрим кинетику дефектообразования при положительном значении упругой деформации $\varepsilon_{ij}^e = 2 \cdot 10^{-3}$ (рис. 1,III).

С ростом параметра g_g по абсолютной величине на интервале $12-10^4$ (кривые на рис. 1,III,б слева направо) эволюция системы ускоряется. Кроме того, предельные значения плотности границ зерен и дислокаций принимают большие значения (рис. 1,III,а), что и ожидалось. Если мы будем прикладывать гидростатическое давление ($\varepsilon_{ij}^e < 0$), то это будет замедлять эволюцию системы и уменьшать предельные значения плотности дефектов (будет труднее достигнуть меньшего размера зерна). Однако это является необходимым условием для того, чтобы не допустить перехода дефектообразования на более высокий уровень – на уровень генерации трещин, и избежать макроскопического разрушения вещества. Чтобы более обоснованно определить оптимальный критерий выбора необходимого уровня гидростатического давления, рассмотренной двухуровневой модели недостаточно, и необходимо рассматривать трехуровневую модель, куда следует включить еще такой дефект, как микротрещины.

Теперь исследуем влияние на кинетику системы параметра g_D при положительных упругих деформациях $\varepsilon_{ij}^e = 2 \cdot 10^{-3}$. Следует ожидать, что характер влияния будет таким же, как и в случае с границами зерен. На рис. 1,IV,б приведены кривые, которые отвечают изменению параметра g_D при значениях $2 \cdot 10^{-8}$ и $2 \cdot 10^{-6}$ (в порядке следования на рисунке сверху вниз). Мы видим, что, как и в случае с границами зерен, их эволюция осуществляется быстрее при большем значении параметра g_D . Особенностью является то, что предельные значения плотности дислокаций существенно выше, чем в референтной модели. Кроме того, существенно ниже расположена кривая упрочнения, т.е. материал упрочняется сильнее. При этом более высокая плотность дислокаций напрямую в соответствии с соотношением Тейлора повышает предел пластического течения.

Представляет некоторый интерес привести графики для положительных упругих деформаций для больших значений параметров $g_g = 10^4$ и $g_D = 2 \cdot 10^{-6}$ (рис. 1,V). Далее именно эту модель мы будем рассматривать как референтную.

Рассмотрим теперь влияние на кинетику системы параметра $\bar{\mu}_g$ (рис. 1,VI). Параметр $\bar{\mu}_g$, также как и параметр $\bar{\mu}_D$, который будет рассмотрен позже (рис. 1,VII), играет двоякую роль. С одной стороны, он таким же образом указывает на зависимость внутренней энергии от сдвиговой упругой деформации, как и сдвиговый модуль μ (2), с другой стороны, указывает на зависимость внутренней энергии от плотности дефектов соответствующего типа. Параметры $\bar{\mu}_g$ и $\bar{\mu}_D$ можно рассматривать как зависимость сдвигового модуля μ от дефектного структурного строения твердого тела или как зависимость энергии соответствующего типа дефекта от второго инварианта тензора упругой деформации.

Увеличение сдвигового параметра $\bar{\mu}_g$ в 10 раз активизирует в первую очередь генерацию границ зерен и через перекрестные влияния увеличивает также генерацию дислокаций, однако в меньшей степени (рис. 1,VI,a). В то же время материал упрочняется слабее (кривая упрочнения расположена выше референтной кривой, рис. 1,VI,b). Подобные кривые в случае вариации параметра $\bar{\mu}_D$ приведены на рис. 1,VII. В этом случае, наоборот, по сравнению с предыдущим случаем более активизируются дислокации, а именно плотность дислокаций растет быстрее в сравнении с новым референтным случаем, в то время как границы зерен активизируются едва заметно по сравнению с тем же референтным случаем (рис. 1,VII,a). Существенно большее размножение дислокаций приводит к большему упрочнению материала (нижняя кривая на рис. 1,VII,b), что объясняется торможением на лесе дислокаций при их более высокой плотности.

Рассмотрим теперь влияние на кинетику системы параметра $\bar{\lambda}_g$ (рис. 1,VIII). Этот параметр, как и параметр $\bar{\lambda}_D$ (рис. 1,IX), не является основным по сравнению с параметрами $\bar{\mu}_g$ и $\bar{\mu}_D$, ибо в соответствии с принципами НЭТ эволюция структурных дефектов осуществляется именно благодаря сдвиговым деформациям и напряжениям. Это подтверждается при вариации данных параметров. Увеличение параметра $\bar{\lambda}_g$ вдвое почти не влияет ни на кинетические кривые (рис. 1,VIII,a), ни на кривую упрочнения (рис. 1,VIII,b), они практически сливаются с референтными кривыми. То же самое можно сказать и относительно вариации параметра $\bar{\lambda}_D$ на интервале $0.166 \cdot 10^{-3}$, $0.333 \cdot 10^{-3}$ (рис. 1,IX). В последнем случае вариация кинетических кривых и кривых упрочнения немного больше, однако остается достаточно малой.

Далее наступает очередь изучить влияние параметров, которые характеризуют релаксационные вклады через коэффициенты ϕ_{1m} , а именно параметров e_m (4).

Увеличение параметра e_g в четыре раза по сравнению с его референтным значением показывает заметное ускорение процесса фрагментации и увели-

чение предельного значения плотности границ зерен, а также некоторое увеличение предельного значения плотности дислокаций (рис. 1, X, *a*). Упрочнение материала достигает несколько меньшего уровня (кривые смещаются немного выше референтной кривой, рис. 1, X, *б*). Иными словами, в этом случае материал упрочняется слабее, несмотря на то, что плотность дислокаций увеличивается, но этот достаточно слабый эффект возможно как-то связан со сложными взаимосвязями между дефектными подсистемами.

Увеличение коэффициента e_D вдвое также ускоряет процесс дефектообразования и увеличивает предельные значения плотности обоих типов дефектов (рис. 1, XI, *a*). Однако в отличие от предыдущего случая, более существенный рост в предельном состоянии имеют дислокации, в то время как границы зерен растут незначительно. Упрочнение материала в этом случае также существенное (кривая лежит намного ниже референтной кривой, рис. 1, XI, *б*) в соответствии с более высоким значением плотности дислокаций.

Далее рассмотрим влияние на взаимную кинетику производства дислокаций и границ зерен коэффициентов разложения внутренней энергии (1) при более высоких степенях плотности дефектов, т.е. учтем двухмодовый характер распределения границ зерен. Увеличение параметра φ_{2g} вдвое приводит к более существенному (почти вдвое) повышению производства границ зерен. Предельная плотность дислокаций также растет, однако не так существенно, как для границ зерен. Здесь наблюдается такой же эффект, как и в случае вариации параметра φ_{2g} , а именно, несмотря на некоторый рост плотности дислокаций, прочность материала несколько падает (кривая лежит немного выше референтной кривой, рис. 1, XII, *б*). Выяснить детально причину такого поведения пока еще не удалось. Необходимо отметить, что поскольку коэффициент φ_{2g} имеет положительный знак, то его рост будет приводить к повышению генерации дефектов. Однако расчеты дают возможность увидеть, насколько на этот процесс влияют другие факторы, которые могут существенно изменить детальную кинетику генерации дефектов, особенно за счет перекрестных эффектов между разными типами дефектов.

Как и ожидалось, увеличение параметра φ_{3g} вдвое привело к снижению дефектообразования по обоим типам дефектов (кинетические кривые расположены ниже соответствующих референтных кривых, рис. 1, XIII, *a*), что вполне естественно для отрицательных вкладов в разложении внутренней энергии (1) и соответствующих кинетических уравнений (5), (6). При этом кривая упрочнения почти не меняется (рис. 1, XIII, *б*), что свидетельствует о том, что на характер упрочнения больше влияют другие факторы.

Наконец, наиболее интересный параметр, который задает взаимодействие дефектов разных типов или описывает перекрестные эффекты данного взаимодействия, это φ_{gD} (рис. 1, XIV). Такие эффекты достаточно хорошо уже отразились на предыдущих графиках. Там было отмечено, что изменение параметра, который описывает один вид дефекта, в той или иной степени влияет на кинетику и предельные значения другого типа дефекта

(рис. 1, XIII). В то же время имеет смысл исследовать эти закономерности при непосредственном изменении данного параметра по сравнению с референтным случаем.

Увеличение параметра взаимодействия ϕ_{gD} на интервале 10^{-16} , $2 \cdot 10^{-16}$, $4 \cdot 10^{-16}$ вызывает эффект усиления производства обоих типов дефектов (рис. 1, XIV, a). Иными словами, между производством одного типа дефекта и другого существует положительная обратная связь, когда наличие большего количества дислокаций приводит к усилению роста количества границ зерен, и, наоборот, наличие большего количества границ зерен приводит к усилению роста количества дислокаций. Это несколько отличается от упрощенных представлений о формировании границ зерен за счет только дислокаций, в соответствии с которыми увеличение плотности границ зерен должно привести к уменьшению плотности дислокаций, которые пошли на формирование границ зерен. Не отбрасывая такой механизм как побочный (он может проявиться при учете более высоких степеней в разложении внутренней энергии по взаимодействию), необходимо отметить, что главным источником генерации обоих типов дефектов является работа внешних сил, которая перекрывает некоторые кинетические обратные процессы. Следствием такого характера обратной связи есть рост упрочнения материала с увеличением параметра ϕ_{gD} .

Выводы

Таким образом, проанализирована зависимость кинетики и характера закона упрочнения при больших деформациях от основных параметров модели, т.е. от основных коэффициентов в разложении внутренней энергии. Все найденные закономерности совпадают качественно с поведением реальных систем, а именно на примере таких дефектов, как границы зерен и дислокаций, показано, что рост гидростатического давления приводит к подавлению генерации всех типов дефектов. Наоборот, негидростатические компоненты напряжений (упругих деформаций) являются главной причиной генерации дефектов. Установлено, что между производством одного типа дефектов (например, дислокаций) и другого (например, границ зерен) существует положительная обратная связь, когда наличие большего количества дислокаций приводит к интенсификации роста количества границ зерен, и, наоборот, наличие большего количества границ зерен приводит к интенсификации роста количества дислокаций.

Автор выражает благодарность д.т.н. Е.Г. Пашинской за полезные обсуждения, которые способствовали существенному улучшению изложения материала.

1. Я.Е. Бейгельзимер, В.Н. Варюхин, Д.В. Орлов, С.Г. Сынков, Винтовая экструзия – процесс накопления деформации, ТЕАН, Донецк (2003).
2. R.Z. Valiev, R.K. Islamgaliev, I.V. Alexandrov, Prog. Mater. Sci. **45**, 103 (2000).
3. С.А. Фирстов, Ю.Н. Подрезов, Н.И. Даниленко, Е.М. Борисовская, Н.В. Минаков, ФТВД **13**, № 3, 36 (2003).
4. В.Н. Варюхин, Н.Н. Белоусов, ФТВД **14**, № 2, 7 (2004).
5. Ю.Н. Подрезов, ФТВД **14**, № 4, 42 (2004).
6. Yu.N. Podrezov, ФТВД **15**, № 1, 11 (2005).
7. Ю.Н. Подрезов, ФТВД **19**, № 1, 31 (2009).
8. Ю.Н. Подрезов, ФТВД **20**, № 4, 21 (2010).
9. Л.С. Метлов, Вісник Донецького університету. Сер. А: Природничі науки **В1**, 269 (2006).
10. Л.С. Метлов, Металлофиз. новейшие технол. **29**, 335 (2007).
11. Л.С. Метлов, Изв. РАН. Сер. физ. **72**, 1353 (2008).
12. Л.С. Метлов, ФТВД **18**, № 3, 53 (2008).
13. Л.С. Метлов, Вісник Донецького університету. Сер. А: Природничі науки **В2**, 209 (2008).
14. Л.С. Метлов, М.М. Мышляев, ФТВД **19**, № 4, 57 (2009).
15. Л.С. Метлов, Вісник Донецького університету. Сер. А: Природничі науки **В2**, 114 (2009).
16. L.S. Metlov, Phys. Rev. **E81**, 051121 (2010).
17. Л.С. Метлов, А.М. Глезер, ФТТ **52**, 1090 (2010).
18. L.S. Metlov, Phys. Rev. Lett. **106**, 165506 (2011).
19. Ю.Н. Подрезов, С.А. Фирстов, ФТВД **16**, № 4, 37 (2006).
20. В.Ф. Мусеев, Металлофиз. новейшие технол. **23**, 387 (2001).

Л.С. Метлов, В.М. Варюхин

МОДЕЛЮВАННЯ ЗАКОНІВ ЗМІЦНЕННЯ ПІД ЧАС ІПД ОБ'ЄМНИХ ТВЕРДИХ ТІЛ МЕТОДАМИ НЕРІВНОВАЖНОЇ ЕВОЛЮЦІЙНОЇ ТЕРМОДИНАМІКИ.

І. ЗАЛЕЖНОСТІ ВІД ПАРАМЕТРІВ ЗАДАЧІ

У рамках нерівноважної еволюційної термодинаміки розглянуто взаємну кінетику таких дефектів, як дислокації і границі зерен у металах при обробці їх методами інтенсивної пластичної деформації (ІПД), і розглянуто вплив цієї кінетики на закони зміцнення. Завдання досліджено за різних варіацій параметрів моделі. Встановлені закономірності дозволяють краще зрозуміти роль впливу гідростатичного тиску (протитиску) на виробництво вивчених типів дефектів. Показано, що при нехтуванні квадратичними внесками з гідростатичного тиску зростання останнього призведе до пригнічення генерації усіх типів дефектів. Навпаки, негідростатичні компоненти напружень (пружних деформацій) є головною причиною генерації дефектів. Встановлено, що між виробництвом одного типу дефектів (наприклад, дислокацій) та іншого (наприклад, границь зерен) існує позитивний зворотний зв'язок, який сприяє взаємному підсиленню їх виробництва.

Ключові слова: інтенсивна пластична деформація, нерівноважна деформація, кінетика, закони зміцнення, дефекти, дислокації, границі зерен, тиск

L.S. Metlov, V.N. Varyukhin

MODELLING OF STRENGTHENING LAWS IN THE COURSE OF SPD OF SOLIDS BY NON-EQUILIBRIUM EVOLUTION THERMODYNAMICS. I. PARAMETER DEPENDENCES

In the framework of nonequilibrium evolution thermodynamics, the mutual kinetics of such defects as dislocations and grain boundaries in metals during severe plastic deformation treatment (SPD) is considered, and influence of that kinetics on strengthening laws is considered too. The problem is investigated at varied model parameters. The established regularities permit better understanding of the role of hydrostatic pressure (anti-pressure) in producing of studied defect types. It is shown that with neglecting quadratic contribution on hydrostatic pressure, the growth of the pressure results in suppressing of all types of defects. To the contrary, non-hydrostatic component of stresses (elastic deformations) is the main cause of defect generation. The existence of the positive feedback between production of one type of defects (dislocations, for example) and another one (grain boundaries, for example) was established which aids to mutual intensification of them production.

Keywords: severe plastic deformation, nonequilibrium thermodynamics, kinetics, strengthening laws, defects, dislocations, grain boundaries, pressure

Fig. 1. Regularities of defect generation in the course of fragmentation: *a* – defect kinetics: 1 – grain boundary density; 2 – dislocation density (the numbers without the stroke are associated with the reference case, the numbers with the stroke mark the current parameter values); δ – strengthening law: 1 – Hall–Petch law area; 2 – the area of linear strengthening law, *R* symbol marks the reference case. I – the reference case; II – at varied parameter $g_g = 2000$; III – at $g_g = 10^4$; IV – at varied parameter $g_D = -2 \cdot 10^{-6}$; V – at negative parameters $g_g = 10^4$ and $g_D = 2 \cdot 10^{-6}$ (new reference model is presented below); VI – at varied parameter $\bar{\mu}_g$; VII – $\bar{\mu}_D$; VIII – $\bar{\lambda}_g$; XI – $\bar{\lambda}_D$; X – e_g ; XI – e_D ; XII – φ_{2g} ; XIII – φ_{3g} ; XIV – φ_{gD}