

Систематизация термодинамической модели изменения структуры металлов и сплавов при механическом воздействии

Патимат Султановна Батаева

Доцент кафедры бизнес информатики
Чеченский государственный университет имени А.Х. Кадырова
Грозный, Россия
mguspaeva@mail.ru
ORCID 0000-0000-0000-0000

Ахмед Магомедович Гачаев

Заведующий кафедрой высшей и прикладной математики
Чеченский государственный университет имени А.Х. Кадырова
Грозный, Россия
gachaev-chr@mail.ru
ORCID 0000-0000-0000-0000

Хусейн Геланиевич Чаплаев

Доцент кафедры экономики и управления образования
Чеченский государственный педагогический университет
Грозный, Россия
mguspaeva@mail.ru
ORCID 0000-0000-0000-0000

Поступила в редакцию 03.09.2023

Принята 14.10.2023

Опубликована 15.12.2023

УДК 656.1/.5:330.341.1

EDN FKLPSM

ВАК 4.3.3. Пищевые системы (технические науки)

OECD 02.11.JY FOOD SCIENCE & TECHNOLOGY

Аннотация

В последнее время разработка теоретических подходов для описания процессов изменения структуры материалов под действием механических воздействий становится всё более актуальной. Предложена термодинамическая модель, которая позволяет однозначно определить ход высоконезквивалированных процессов и охарактеризовать особенности формирования равновесной дисперсной структуры материала во время механической обработки. В качестве независимых параметров модели рассматриваются характеристики дефектов, энтропия и компоненты тензора деформации. В дальнейшем полученные результаты использованы для решения конкретных задач. Цель данной работы – систематизировать имеющиеся представления о термодинамической модели, описывающей изменение структуры металлов и сплавов при механическом воздействии, и изучить особенности и условия формирования равновесных структур различного типа. Таким образом, в рамках двухфакторной модели с учётом плотностей дислокаций и границ зерен построено подробное описание процессов, определяющих условия формирования равновесных структур. Более того, в работе детально рассмотрена эволюция основных типов дефектов и их взаимодействие при достижении стационарного режима, а также установлена зависимость типа равновесной структуры от величины деформации и исходного состояния материала. Выявлено, что изменение состояния системы имеет характер скачкообразных переходов. Из представленных описаний следует, что равновесная структура не

является неизменной, а представляет собой динамическое равновесие процессов генерации и аннигиляции дефектов.

Ключевые слова

архитектура, металл, стойкость, развитие, структура.

Введение

В последнее время большое количество научно-исследовательских работ в промышленно развитых странах посвящено исследованию и технологиям получения ультрамелкозернистых и наноструктурных материалов (Zeng, 2020). Это обусловлено развитием современного технологического процесса: увеличением силовых и термических нагрузок на оборудование, выполненное из металлов, наличием разнообразных и агрессивных сред их эксплуатации, высокой себестоимостью его изготовления. Таким образом, возникла потребность в улучшении физико-химических свойств материалов, из которых производят машины и устройства, в частности, – в увеличении срока эксплуатации новейших конструкций и их деталей (Ishitsuka, 2015).

Можно выделить два известных механизма формирования наноструктурных материалов, которые отличаются использованием технологий сборки (изготовления) или получением с применением различных методик обработки. С помощью первого метода при разложении, осаждении или синтезе вещества получают разнообразные наночастицы (твёрдотельные нанокластеры, нанопроволоки, нанотрубки), плёнки и покрытия, наноразмерные порошки и комплекующиеся из них материалы, в том числе нанокомпозиты, образованные путём введения наночастиц в различные матрицы (Odermatt, 2020). Второй метод заключается в том, что процесс наноструктурирования происходит в результате сильного влияния на полученные другими методами микроструктурные материалы – отжиг аморфных сплавов, IPD исходной металлической структуры, механохимический синтез. В этом случае имеет место формирование композиционных материалов, содержащих различные аморфные и кристаллические нанофазы (Feng, 2017).

Известно, что в процессе создания наноструктурных материалов путём консолидации частиц и внедрения добавок возникают трудности, связанные с неравномерностью структуры на микро- и наноуровне (Nata, 2015). Кроме того, ограничен размер получаемых образцов и степень практической реализации разрабатываемых технологий. Эти проблемы обусловлены невозможностью обеспечить стабильность структуры в процессе спекания порошков и концентрации добавок, а также внедрить методы в полномасштабное производство.

Эти проблемы в значительной степени удается минимизировать благодаря применению методов импульсно-поточной обработки (IPD). Так, методами IPD получены объёмные образцы из различных металлов и сплавов, включая промышленно востребованные, с наноструктурой (Burkart, 2020). При этом путем варьирования параметров импульсов и потоков удалось обеспечить однородность структуры на микро- и наноуровне. Методы также нашли применение для композиционных материалов и полупроводников, для которых ранее создание объёмных образцов представляло трудности.

Множество экспериментальных исследований посвящено изучению влияния IPD на структуру металлов и сплавов на микро- и наноуровне (Martino, 2020). Однако вопрос определения оптимальных параметров процесса IPD, таких как значения импульсных нагрузок, температур и скоростей потока, для получения структур с заданными свойствами все ещё открыт. Большинство предыдущих работ не уделяли достаточного внимания детальному изучению физических процессов, протекающих на стадии IPD (Jeong, 2016).

В связи с этим развитие теоретических методов для описания структурных преобразований при обработке IPD приобретает весомое значение. Рассмотренные базовые теоретические подходы позволяют раскрыть определённые стороны разнообразного проявления закономерностей в процессах деформации и разрушения твёрдых тел, а также в целом позволяют составить более полное и объективное представление о предмете исследования (Li, 2018).

Ряд вопросов, касающихся интенсивной пластической деформации, сегодня нерешён, а методы исследования в основном сводятся к обобщению экспериментальных данных (Khayatzaheh, 2016). В частности, теоретически не удалось описать формирование «предельной» структуры металлов – минимального среднего размера зерен, а также не была предусмотрена возможность образования нескольких предельных структур (TAKAKI, 2020). Кроме того, не описан ряд явлений, которые часто наблюдаются во время экспериментальных исследований: реализация фазовых превращений, наличие разных режимов процесса фрагментации, формирование фрактальных структур, возникновение нестабильных конфигураций, температурные аспекты проблемы, влияние флуктуаций основных параметров (Winey, 2015). Таким образом феноменологическая модель процесса фрагментации металлов или сплавов при IPD позволяет описать процесс измельчения поликристаллической структуры и формирования предельной SMK или НК-структурой (Yashiro, 2020).

В этой связи предлагается новый подход – TUE, который базируется на комбинации технофазовых преобразований Ландау в приближении среднего поля и положений классической неравновесной термодинамики, что позволяет получить более полную информацию о поведении систем при IPD. В рамках этого концептуального подхода уже рассмотрен ряд задач кинетики дефектов при IPD, в том числе получены законы упрочнения металлов. В то же время недостаточно изученными пока остались: условия формирования предельных SMK или НК-структур нескольких типов; фазовая динамика неравновесных переменных в процессе формирования стационарных SMK или НК-структур; влияние времен релаксации на кинетику системы, что позволяет рассмотреть различные сценарии формирования предельных (стационарных) структур (Mandal, 2017); устойчивость предложенной модели; а также влияние флуктуаций основных параметров, что может существенно изменить характер эволюции системы и привести к образованию качественно новых режимов функционирования и состояний (Banlusan, 2017).

Материалы и методы исследования

На основе фундаментального неравенства, объединяющего первый и второй законы термодинамики, и учитывая основные каналы диссипации энергии в работах, получено обобщённое соотношение Гиббса, что позволяет описать поведение неравновесных систем и определить ход сильно неравновесных процессов: нагрева и генерации структурных дефектов. Кроме того, предложенная теория позволяет правильно отразить эволюцию структурных дефектов в процессе IPD и формирование предельной (стационарной) структуры. Расширение системы независимых термодинамических переменных позволило ввести понятие состояния сильно неравновесной системы.

Механическая работа, продуцируемая в процессе IPD, приводит к росту внутренней энергии металлов. Поскольку процесс протекает достаточно быстро – в пределах доли секунды (один проход в среднем длится 10^{-2} - 10^{-1} с), выделенная при IPD теплота не успевает отводиться и процесс протекает в условиях адиабатичности. При этом температура обрабатываемого материала повышается в процессе обработки незначительно, поэтому влияние тепловых эффектов можно не учитывать. Основная часть затрачиваемой работы направляется на изменение структурных дефектов. Описание реального механизма фрагментации представляется достаточно сложной задачей, поскольку в процесс вовлечены дефекты различных уровней (Nagasako, 2016).

Тем не менее для целей моделирования целесообразно предложить упрощенную модель, учитывающую наиболее значимые для формирования мелкозернистой структуры дефекты, существенно влияющие на свойства. При обработке методами импульсно-поточной деформации основную роль играют границы зёрен и дислокации, определяющие степень фрагментации и прочностные характеристики (Shin, 2017). Вклад остальных дефектов можно учесть косвенно – с помощью феноменологических коэффициентов. Таким образом, на данном этапе исследования процесса целесообразно ограничиться двухфакторной моделью с учётом плотностей границ зёрен и дислокаций. Это позволит описать основные закономерности фрагментации металлов и сплавов под действием импульсно-поточной деформации.

Результаты и обсуждение

Выражение для плотности внутренней энергии в рамках рассматриваемого случая удобно представить в форме полиномиальной зависимости от плотности выбранных двух типов дефектов:

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

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

$$\varphi_{0m} = \varphi_{0m}^* + q_m \varepsilon_{ii}^e + \left(\frac{1}{2} \bar{M}_m (\varepsilon_{ii}^e)^2 + 2\bar{\mu}_m I_2 \right) \quad (3)$$

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

где u_0 – часть внутренней энергии, которая не зависит от дефектности материала (уровень отсчёта); h_g, h_D – плотности GB и дислокаций; $M = \lambda + 2\mu$ – модуль одностороннего сжатия материала; λ, μ – постоянные Ламе; $\varepsilon_{ii}^e, I_2 \equiv (-\varepsilon_{ii}^e \varepsilon_{jj}^e + \varepsilon_{ij}^e \varepsilon_{ji}^e)/2$ – первый и второй инварианты тензора упругих деформаций; φ_{0m}^* – собственная энергия дефекта с учётом его размерности (на единицу длины дислокаций i и поверхностная плотность для МО); φ_{0m} – та же самая энергия с учётом влияния упругих деформаций в линейном (константа q_m) и квадратичном приближении; положительная сталь q_m отвечает за процесс генерации структурных дефектов при растяжении $\varepsilon_{ii}^e > 0$, или по их аннигиляции в случае реализации сжатия $\varepsilon_{ii}^e < 0$, $\bar{\mu}_m$ – упругие стали, которые отражают уменьшение соответствующих упругих модулей, что обусловлено существованием структурных дефектов; $\varphi_{1m}^*, \varphi_{1m}$ – коэффициенты, отвечающие за процессы рекристаллизации (аннигиляции дефектов) без учёта и с учётом влияния упругой деформации в линейном приближении (константа e_m); в соответствии e_m отражает ускорение процесса аннигиляции при положительном значении $\varepsilon_{ii}^e > 0$, в случае отрицательного $\varepsilon_{ii}^e < 0$ понимается возвратно-направленный процесс; значения индексов $m = g$ относятся к GB, а $m = D$ – к дислокациям; φ_{gD} – параметр, отражающий энергию взаимодействия выбранных структурных дефектов. В общем случае положительные вклады в соотношении (1) определяют генерацию структурных дефектов, а отрицательные составляющие отвечают обратным процессам – аннигиляции дефектов (рекристаллизации).

Степенное развитие (1) при условии положительных значений коэффициентов φ_{km} ($k = 0 - 3$) может формировать два максимума. В случае GB максимумы соответствуют образованию двухмодового распределения по размерам зёрен. В случае дислокаций, мода, что соответствует меньшему значению дефектности, описывает случайное (однородное) распределение представленного дефекта, соответственно, большее значение дефектности отражает ансамбль дислокаций, образующих ячеистую структуру.

Отметим, что для описания формирования предельной (стационарной) структуры необходима более высокая степень приближения внутренней энергии (1) по значениям плотности GB, однако в случае дислокаций достаточно ограничиться взносами только до второй степени по плотности дефекта ($\varphi_{2D} = 0$ Джм³, $\varphi_{3D} = 0$ Джм⁵). Такой выбор позволяет достичь лучшего соответствия с поведением реальных систем при больших пластических деформациях. Чередуемость знаков в круглых скобках (1) отражает принцип Ле-Шателье: термодинамический процесс более высокого уровня направлен на компенсацию эффектов от термодинамических процессов более низкого уровня.

Здесь полная деформация представляется в виде суммы оборотной ε_{ij}^e (упругой) и необратимой ε_{ij}^e (пластической или остаточной) составляющих. С проявлением пластической (остаточной) деформации упругая составляющая не исчезает, однако имеет меньший вклад. Согласно теории упругости вид возникающей деформации определяется в основном характером приложенной к телу нагрузки и формированием соответствующих напряжений σ . Так, преобладание тангенциальных составляющих напряжения σ_τ (или σ_{ij}) способствует развитию пластической деформации, а нормальных составляющих σ_n (или σ_{ii}) приводит к разрыву межатомных связей.

Известно, что пластическая деформация начинает развиваться с достижением механическими напряжениями предела текучести (текучести) σ_T . Считается, что процесс фрагментации металла или сплава при обработке IPD может интенсивно протекать тогда, когда упругие деформации ε_{ij}^e и связанные

с ними напряжения σ_{ij}^e превышают эту границу. В случае, когда приложенные напряжения не достигают значения σ_T , процесс фрагментации невозможен, поскольку отсутствует пластическое течение, отвечающее за формирование стационарных состояний.

Поскольку энергия системы не должна зависеть от выбора системы координат, то она выражается через инварианты тензора деформаций. Отметим, что в рамках теории NET значение пластических (накопленных) деформаций ε_{ij}^p не представлено в явном виде. Известно, что пластическая деформация проявляется в результате зарождения и движения дислокаций, а также за счёт взаимодействия дефектных подструктур различных уровней, вследствие чего в материале формируется SMK (образуются зёрна со средними размерами $d = 100 - 10^3$ нм) или NK ($d \leq 100$ нм) структура.

Отметим, что значения первого и второго инвариантов тензора упругих деформаций ε_{ii}^e , I_2 являются управляемыми параметрами и представляют внешнее механическое воздействие (давление) при IPD. В представленном исследовании рассматривается процесс сжатия деформированного образца (противодавление), поэтому первый инвариант тензора упругих деформаций ε_{ii}^e приобретает отрицательные значения. Учитывая это, на начальном этапе обработки, в соответствии с выражением (3), преобладает линейный ε_{ii}^e вклад (см. второе слагаемое) и при условии положительного значения константы g_m сжатия будет приводить к замедлению генерации дефектов. На более поздних стадиях в результате упрочнения будет преобладать квадратичный за ε_{ii}^e вклад, что независимо от его знака будет приводить к ускорению процесса образования дефектов. В целом процесс генерации дефектов, который задан коэффициентом (3), на завершающей стадии будет уравновешен процессом их уничтожения (например, в результате рекристаллизации), что описывается коэффициентом (4).

Стоит отметить, что в рамках предложенной теории формирования стационарных состояний двухдефектной системы связано с образованием максимумов внутренней энергии (1) (или (6)), что сильно отличается от классического подхода в рамках равновесной термодинамики, поскольку согласно последней система всегда стремится достичь минимума энергии. Считается, что процесс измельчения металлической структуры при обработке методами IPD соответствует сильно неравновесным процессам, поскольку в системе постоянно происходит перекачка энергии за счёт внешнего воздействия. Вместе с тем известно, что протекание неравновесных процессов невозможно корректно представить, используя общеизвестные классические методы, поэтому в работе развивается новый феноменологический подход, в основе которого введено понятие некоторой «эффективной» внутренней энергии, когда система приходит в стационарных состояниях, которые отвечают максимумам, и представляет собой комбинацию внутренней энергии и энтропийной составляющей. Под формированием максимума внутренней энергии имеется в виду не абсолютный максимум, а лишь максимум в сечении по одной из переменных. Подобный принцип формирования максимальных значений внутренней энергии довольно часто реализуется на практике. Например, в магнетизме такая максимальная внутренняя энергия по магнитному моменту определяет ферромагнитное упорядочение. В теории аморфных сплавов максимум внутренней энергии по концентрации компонентов при положительном знаке энергии смешивания обуславливает упорядочение сплавов. Это свойство внутренней энергии схоже со свойствами термодинамического потенциала, введенными ранее для сильно неравновесных процессов. Тем не менее с точки зрения общепринятого формализма «эффективный» потенциал (1) (или (6)) является некоторой конструкцией, играющей роль аналога и не имеющей физического содержания оригинальной внутренней энергии. В дальнейшем, во избежание недоразумений, отождествим эти два понятия, таким образом, соотношения (1) и (6) будут рассматриваться в качестве внутренней энергии.

Очевидно, что исследуемая модель (1) – (4) содержит много параметров и коэффициентов, физическая интерпретация и значение которых играют важную роль в определении реального процесса фрагментации металла или сплава в условиях IPD. Основной целью теории NET является построение обобщенной термодинамической модели, что позволит провести качественное моделирование процесса обработки металлического образца методами IPD и получить сопоставимые с экспериментальными исследованиями результаты. Однако в настоящее время задачи физической трактовки и введения интервалов, определяющих границы изменения основных параметров теории, ещё мало изучены.

Большинство параметров являются феноменологическими, поскольку достаточно сложно учесть все возможные взаимодействия, происходящие в структуре материала, и, собственно, определить реальные размерности величин, представляющих эти процессы. Технику выбора основных параметров и определения явного физического смысла некоторых из них описаны в работах. Таким образом, коэффициент φ_{qD} в соотношении (1), как уже отмечалось ранее, отражает энергию взаимодействия между дефектами данной системы. Переменную $\varphi_{om}(m = q, D)$, что определяется соотношением (3), можно интерпретировать как общую поверхностную плотность энергии для соответствующего вида дефекта. Первые слагаемые φ_{om}^* в определении (3) представляют собственную энергию дефектов с учётом размерности при отсутствии других воздействий, их поверхностная энергия минимальна по отношению ко всей энергии рассматриваемой поверхности материала. В работах общая поверхностная энергия регулярной (бесконечной) GB для меди во время холодной обработки приобретает удвоенное значение от энергии свободной границы рассматриваемого образца (примерно $2 \times 2 = 4$ Дж/м²). Вместе с тем значение собственной энергии, что можно рассматривать как энергию хорошо ослабленной GB, составляет 15-20% от энергии свободной поверхности (для меди – примерно $\varphi_{oq}^* = 0,2 \times 2 = 0,4$ Дж/м²) (см. таблицу 1).

В поле сжимающих гидростатических напряжений, что определяется отрицательными значениями первого инварианта тензора упругих деформаций $\varepsilon_{ii}^e < 0$, второе слагаемое в соотношении (3) наряду с коэффициентом g_m , обуславливает негативный вклад в определении общей поверхностной энергии φ_{om} для обоих типов дефектов.

В случае GB, поскольку этот вид двумерного дефекта представляет некоторое распределение вдоль сильно искаженной области кристаллической решетки, именно неравновесность этой области больше всего влияет на определение энергии предела. Под воздействием механического напряжения объём этих разуплотненных областей может уменьшаться. Таким образом, имеет место процесс аннигиляции или подтормаживания генерации дефектов, что, собственно, и приводит к уменьшению поверхностной энергии GB. Рассматривая обработку медного образца, для упругой деформации $\varepsilon_{ij}^e = 0,2\%$, которой соответствует напряжение $\sigma_{ij} \approx 180$ МПа, значение для коэффициента g_g (то есть уменьшение энергии GB) определяется в пределах 10 % от хорошо распределенной GB (то есть $g_g = 12$ Дж/м²) (см. таблицу 1).

Аналогичное рассуждение позволило установить, что переменные \bar{M}_g и $\bar{\mu}_g$ для напряжения порядка 180 МПа не должны превышать значение общей эффективной поверхностной энергии φ_{og} , что в случае меди – двойной свободной энергии границы 4 Дж / м². Таким образом, принимаются значения $\bar{M}_g = 2,5 \cdot 10^5$ Дж/м² и $\bar{\mu}_g = 3 \cdot 10^5$ Дж/м² (см. таблицу 1). Основное различие между значениями представленных коэффициентов заключается в том, что учёт сдвиговых упругих деформаций является более весомым в процессе фрагментации металлической структуры, поскольку именно сдвиговые деформации отвечают за формирование и дальнейшую эволюцию дефектной подструктуры.

Определение основных оценок дислокационной подструктуры проводится аналогичным образом. Так, для медного образца минимальная избыточная энергия для дислокации при отсутствии других воздействий составляет $\varphi_{oD}^* = 5 \cdot 10^{-9}$ Дж / м. Вместе с тем параметр, который отвечает за взаимодействие дислокаций и МО, имеет значение $\varphi_{gD} = 10^{-16}$ Дж (см. таблицу 1).

В целом выбор значений основных постоянных теории осуществляется феноменологически, исходя из необходимости формирования стационарных SMK или NK структур, которые наблюдаются в ряде экспериментальных работ. Например, установка стационарных значений для плотности GB реализуется в пределах $h_g^{st1} = 10^4 \text{ м}^{-1}$ и $h_g^{st2} = 10^7 \text{ м}^{-1}$, для которых характерны средние размеры зёрен 100 мкм и 100 нм. Плотность дислокаций для SMK и NK структур в среднем приобретает равновесных значений при $h_g^{st1} = 10^4 \text{ м}^{-1}$ и $h_g^{st2} = 10^7 \text{ м}^{-1}$.

Исходя из вышеизложенного, в таблице 1 предлагается следующий набор основных параметров и коэффициентов теории, что, в отличие от предыдущего набора параметров, устоявшихся в работах, демонстрирует только количественные соотношения и учитывает реально наблюдаемые закономерности в процессе обработки металла или сплава методами IPD.

Таблица 1. Параметры двухдефективной модели

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

Дифференцируя базовый энергетический потенциал для плотности внутренней энергии (1), получаем эволюционные уравнения для неравновесных переменных:

$$\tau_{h_m} \frac{\partial h_m}{\partial t} = \frac{\partial \bar{u}}{\partial h_m} \quad (5)$$

где τ_{h_m} – обратно пропорциональные величины кинетических коэффициентов, которые имеют смысл времени релаксации соответствующих дефектных подструктур и отражают инерционные свойства системы; h_m – плотности дефектов ($m = g, D$); \bar{u} – эффективная внутренняя энергия, которая в данном случае определяется соотношением:

$$\bar{u} = u - \sum_{m=g,D} \varphi_m^{st} h_m \quad (6)$$

где φ_m^{st} – энергия дефекта m -го типа в стационарном состоянии. В такой формулировке стационарные состояния будут определяться максимумами эффективной внутренней энергии. Уравнение (5) описывает предэмпирированную и детерминистическую динамику для несохранных и однородных параметров порядка. Преобразование (6) можно интерпретировать как аналог преобразования Лежандра в равновесной термодинамике. В таком случае слагаемые под знаком суммы представляют собой связанную дефектами энергию, а эффективная внутренняя энергия \bar{u} является аналогом свободной энергии, что также обладает экстремальными свойствами.

Таким образом, в приближении двухдефектной модели уравнения (5) с учётом определений (1) и (6) приобретают явный вид:

$$\tau_{h_D} \frac{\partial h_D}{\partial t} = \varphi_{0D} - \varphi_{1D} h_D + \varphi_{gD} h_g \quad (7)$$

$$\tau_{h_g} \frac{\partial h_g}{\partial t} = \varphi_{0g} - \varphi_{1g} h_g + \varphi_{2g} h_g^2 - \varphi_{3g} h_g^3 + \varphi_{gD} h_D \quad (8)$$

Поскольку стационарные значения входят в комбинации с линейным по плотностям дефектов взносам, то без ущерба для общности их можно объединить с соответствующими коэффициентами

Аналитическое решение нормальной системы двух ODU первого порядка достаточно сложно получить, поэтому применим адиабатическое приближения $\tau_{h_g} \gg \tau_{h_D}$, что определяет характер эволюции неравновесных переменных h_m ($m = g, D$) в рамках принципа подчинения. Таким образом, на всем временном интервале изменение плотности дислокаций следует исключительно за преобразованиями плотности GB. Положив в уравнении (7) $\tau_{h_D} \approx 0$ и произведя некоторые преобразования, получаем уравнения типа Ландау – Халатникова:

$$\tau_{h_g} \frac{\partial h_g}{\partial t} = \frac{\partial V}{\partial h_g} \quad (9)$$

где производная в правой части задается соотношением:

$$F(h_g) = \varphi_{0g} + \varphi_{gD} \frac{\varphi_{0D}}{\varphi_{1D}} - \left(\varphi_{1g} - \frac{\varphi_{gD}^2}{\varphi_{1D}} \right) h_g + \varphi_{2g} h_g^2 - \varphi_{3g} h_g^3 \quad (10)$$

под влиянием которой переменная h_g направляется к притягательному аттрактору – предельной структуре. Известно, что на начальных этапах обработки методом импульсно-поточной деформации происходит дезинтеграция исходной зернистой структуры образца. Однако при достаточно большом числе циклов деформирования размеры зёрен и параметры дефектной структуры стабилизируются.

В литературе такая структура, формирующаяся в установившемся режиме деформации, получила название «предельной». С точки зрения физического описания процесса более уместно использовать термин «стационарная структура». При этом система характеризуется эффективным потенциалом, определяющим равновесное состояние при данных внешних воздействиях. В частности, потенциал отражает баланс процессов дезинтеграции и рекристаллизации, приводящих систему к стационарному состоянию. Вместе с тем система характеризуется эффективным потенциалом:

$$V(h_g) = \int_0^{h_g} F(h'_g) dh'_g \quad (11)$$

что совпадает с соотношением (1) для представленного типа дефекта.

Принципиальная возможность реализации тех или иных состояний дефектной структуры в первую очередь определяется характером деформации и активизируемыми на микроуровне взаимодействиями. На начальных этапах обработки эффективным механизмом рассеяния энергии выступает увеличение протяженности границ зёрен. Однако при достижении ультрадисперсной структуры с размерами зёрен порядка 100 нм роль других дефектов, таких как тройники, возрастает. Это может привести к формированию состояний с ещё более мелкими кристаллитами. В дальнейшем активизируются процессы рекристаллизации и коалесценции зёрен, направленные на снижение концентрации дефектов. В установившемся режиме обработки эти процессы динамически балансируются, превращая энергию внешних воздействий в тепло. Так формируется стационарное состояние системы.

Используя необходимое условие существования экстремумов ($\partial V / \partial h_g = 0$), определим экстремумы эффективного потенциала $V(h_g)$ (11). Положив в соотношении (9) $\tau_{h_g} \dot{h}_g = 0$, получаем кубическое уравнение:

$$\varphi_{3g} h_g^3 - \varphi_{2g} h_g^2 + \left(\varphi_{1g} - \frac{\varphi_{gD}^2}{\varphi_{1D}} \right) h_g - \varphi_{0g} - \varphi_{gD} \frac{\varphi_{0D}}{\varphi_{1D}} = 0 \quad (12)$$

В общем случае уравнение (12) может иметь три различных решения: два устойчивых состояния (то есть формируются две предельные структуры) и одно неустойчивое. Устойчивые состояния соответствуют максимумам эффективного потенциала (11), неустойчивый – минимуму $V(h_g)$. Как известно по основной теореме алгебры, уравнение (12) будет всегда иметь хотя бы один действительный корень (то есть всегда будет существовать хотя бы одно решение, в данном случае – стационарная структура). Другие два корня могут быть как действительными (в зависимости от знака определителя кубического уравнения – кратными или разными), так и парой комплексно-сопряженных решений.

Очевидно, что положение экстремумов эффективного потенциала $V(h_g)$ напрямую зависят от параметров задачи $\varphi_{0g}, \varphi_{1g}, \varphi_{2g}, \varphi_{3g}, \varphi_{0D}, \varphi_{1D}$, наряду с упругими деформациями ε_{ij}^e , и не зависят от начального значения энергии u_0 (уровня отсчёта энергии в выражении (2)). Вместе с тем сложившиеся экстремальные значения ПП h_g позволяют однозначно определить возможные режимы фрагментации металла или сплава в процессе обработки методами IPD. Следует отметить, что рассмотренное выше адиабатическое приближение ($\tau_{h_g} \gg \tau_{h_D}$) не влияет на уравнение (12): полученное выражение является точным. Что справедливо, поскольку решения системы ODU (7), (8) рассматриваются в длительной асимптотике, когда реализуются стационарные условия для обоих типов дефектов (то есть система функционирует в стационарном состоянии).

Стоит отметить, что реализация первого максимума эффективного потенциала $V(h_g)$ (11) заметно зависит от упругой деформаций ε_{ij}^e (значений первого и второго инвариантов), в то время как второй – нечувствителен к возникающим напряжениям и связанным с ними деформациями. Это обусловлено точностью учёта упругих деформаций ε_{ij}^e в степенном развитии внутренней энергии (1) – (4). Рассматриваемые деформации введены только во 2-ю степень по плотности дефектов h_m в соотношении (1), имеющих наибольшее влияние на формирование первого максимума. Такое приближение осуществлено в силу сохранения примерно одинакового порядка во всем соотношении для внутренней энергии (1). Суммарный порядок первых двух взносов по плотности дефектов h_m и упругим

деформациям ε_{ii}^e , l_2 примерно равен порядку последних двух, не учитывающих значения деформации. Однако, если эксперимент покажет значительную чувствительность второго максимума до упругих деформаций, то, соответственно, такое поведение может быть учтено более высокими степенями приближения по ε_{ii}^e и l_2 в коэффициентах при h_m^3 и h_m^4 , которые представлены в соотношении для внутренней энергии (1).

На рисунке 1 показана зависимость стационарного значения плотности границ зёрен, полученная путём решения уравнения (12), от влияющего параметра l_2 при различных значениях первого инварианта деформации ε_{ii}^e . Следует отметить, что в данном исследовании не рассматривается вопрос о методах достижения значений управляющих параметров. В ряде работ показано, что эти величины могут формироваться самосогласованно на основе соотношений Тейлора. Основной же целью является определение стационарных состояний системы, удовлетворяющих условию минимума свободной энергии при заданных значениях внешних воздействий, описываемых параметрами ε_{ii}^e и l_2 . Это позволяет охарактеризовать установившуюся дефектную структуру.

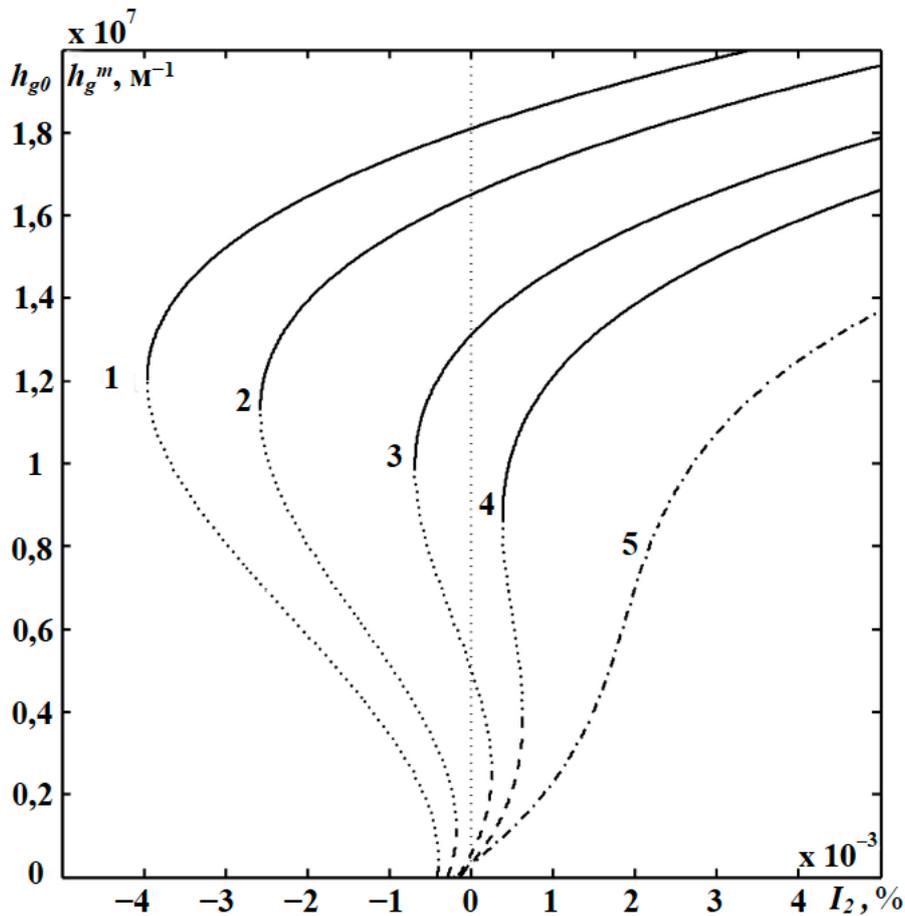


Рисунок 1. Зависимость стационарных значений плотности GB $h_{g0}, h_g^m \text{ м}^{-1}$ от второго инварианта тензора деформаций I_2 %. Кривы 1-5 соответствуют значениям первого инварианта $\varepsilon_{ii}^e = (-0,35; -0,25; -0,1; -0,001; 0,2)\%$

Таким образом, в поле сжимающих упругих деформаций ($\varepsilon_{ii}^e < 0$) при выбранных параметрах теории (см. таблицу 1) уравнение (12) имеет три решения (кривые 1-4 на рис. 1), что соответствует формированию двух устойчивых стационарных состояний (максимумов $V(h_g)$) и одного неустойчивого (минимума $V(h_g)$). Устойчивые состояния представлены штриховыми и сплошными сегментами на кривых 1-4, а неустойчивые – отражены, соответственно, пунктирными участками. Реализация первого максимума эффективного потенциала, в зависимости от значений второго инварианта l_2 , может

осуществляться как при $h_g = 0$, так и при ненулевых значениях плотности GB. Кроме того, ненулевые значения h_g^m начинают формироваться только в том случае, когда упругие деформации ε_{ij}^e достигают определённой критической величины, соответствующей пределу текучести σ_T (текучести). Как отмечалось ранее, это условие необходимо для активации процесса фрагментации кристаллитов в металлической структуре во время IPD.

На рисунке 1 видно, что штриховые участки на кривых 1-4 соответствуют меньшим стационарным значениям h_{g0} и, соответственно, определяют реализацию монокристалла или CZPK. Сплошные участки на кривых отражают большие значения дефектности материала h_g^m и соответствуют формированию мелкозернистых SMK или НК-структур. Указанные устойчивые стационарные конфигурации разделяются неустойчивыми состояниями или фазами h_g^m (см. пунктирные части кривых 1-4 на рис. 1), соответствующими формированию минимумов эффективного потенциала $V(h_g)$.

Считается, что материал до начала процесса разделки является монокристаллом или CZPK. С повышением упругих деформаций сдвига, то есть с повышением значений l_2 , на начальном этапе система некоторое время будет функционировать в устойчивом состоянии с низким уровнем плотности дефектов (реализуется первый максимум $V(h_g)$ при $h_{g0} \approx 0$). На этой стадии процесс фрагментации не может произойти, поскольку величина возникающих напряжений в структуре материала недостаточна для активации внутренней перестройки образца (не возникает пластическое течение) и формирования предельной структуры. Активная стадия процесса измельчения зернистой структуры образца начнёт протекать исключительно при условии возникновения SPT, что заключается в переходе от нулевого значения максимума эффективного потенциала $V(h_g)$ до ненулевого (см. штриховые сегменты кривых 1-4 на рис. 1). Следует отметить, что при наличии двух максимумов эффективного потенциала в зависимости от плотности дефектов непрерывный процесс фрагментации также невозможен. Это обусловлено существованием конечного потенциального барьера, как показано на рисунке пунктирными фрагментами кривых 1-4.

При дальнейшем росте влияющего параметра происходит слияние первого максимума с энергетическим минимумом. Система теряет устойчивость и резко переходит в область более высокой плотности дефектов, что изображено на кривых сплошными отрезками. Такой переход, обозначаемый как FP1, соответствует интенсивной стадии фрагментации с уменьшением размера зёрен и повышением свойств. В данном случае FP1 система может сосуществовать в двух метастабильных состояниях с различными структурами зёрен. Это соответствует реализации двух максимумов энергетического потенциала.

Таким образом, видно, что процесс фрагментации металлической структуры начнёт протекать только при условии реализации перехода от нулевого значения максимума эффективного потенциала $V(h_g)$ до ненулевого, и в случае, когда при определенных условиях (значений управляющих параметров) исчезает потенциальный барьер, что разделяет устойчивые состояния. В целом, рассматривая процесс упругого сжатия металлического образца, что реализуется при $\varepsilon_{ii}^e < 0$, очевидно, что кривые 1-4 на рисунке 1 характеризуются подобным поведением. Однако случай, представленный кривой 4, отличается, поскольку одновременное сосуществование нулевого и ненулевого максимумов эффективного потенциала невозможно. Кроме того, стоит отметить, что уменьшение по абсолютной величине вноса относительной деформации сжатия ε_{ii}^e приводит к уменьшению области неустойчивого существования решения уравнения (12) (см. пунктирные части кривых 1-4 на рис. 1). Следовательно, при малых значениях нормального давления для реализации SPT необходимы большие значения сдвиговых деформаций. Таким образом, с увеличением давления порог перехода к мелкозернистому состоянию уменьшается, что подтверждают экспериментальные исследования.

Однако, как видим, в поле действия сжимающих напряжений $\sigma_{ii}^e < 0$ и связанных с ними деформаций энергетический «барьер» не исчезает. Только в ходе исследования обратного процесса, происходящего при деформации растяжения $\varepsilon_{ii}^e > 0$, уравнение (12) имеет одно решение (см. кривую 5 на рис. 1). В рамках механизма FP2 реализуется постепенный переход от однородной монокристаллической или крупнозернистой структуры к более дисперсной мелко- и нанокристаллической. Следует учесть, что рассмотрение процесса растяжения выходит за рамки

рассматриваемой модели. При деформации на растяжение могут активизироваться и другие дефекты, например, трещины, приводящие к преждевременному разрушению.

Для материала с исходно повышенной концентрацией структурных дефектов формирование равновесного стационарного состояния с более мелкой зернистой структурой возможно уже при небольших положительных значениях параметра деформации. Это связано с наличием большего количества источников для интенсивной фрагментации в ходе импульсно-поточной деформации I_2 (см. кривую 4 на рис. 1): реализуется близкое к ненулевому экстремуму максимальное значение $V(h_g)$. Однако в случае уменьшения положительной величины I_2 или действия гидростатического давления, что сопровождается возникновением отрицательных деформаций сдвига ($I_2 < 0$), наблюдается уменьшение плотности GB за счёт увеличения размеров кристаллитов (см. кривые 1-3 на рис. 1). Такое поведение очень часто случается на практике при обработке материала методами IPD.

Отметим, что знак второго инварианта I_2 демонстрирует направление возникновения упругих напряжений и связанных с ними деформаций в материале. В то же время формирование положительных или отрицательных значений можно объяснить с помощью анализа вносов компонентных составляющих, входящих в определение второго инварианта тензора упругих деформаций. Таким образом, преобладание сдвиговых компонент тензора деформаций, которые согласно теории упругости способствуют развитию пластической деформации, будет приводить к положительному взносу в соотношении (A.3). С этой позиции преобладание нормальных составляющих даёт отрицательный вклад. В работе подобный принцип отображается при условии реверсирования деформации, что приводит к разрядке дислокационных скоплений. В то же время процесс измельчения зёрен при деформациях отрицательного знака начинается только после образования достаточного количества новых дислокационных соединений. Таким образом, утверждается, что реверсирование приводит к «лофту» при деформации, что уменьшает ее эффективность с точки зрения процесса фрагментации. Однако сделать однозначный вывод относительно вносов нормальных и тангенциальных составляющих невозможно, поскольку нужно проводить дополнительные исследования.

С физической точки зрения отрицательные значения I_2 имеют природу гидростатического давления (противодействия), поскольку нормальные деформации препятствуют формированию сдвиговых компонент тензора. Согласно определению, второй инвариант в этом случае отражает формирование отрицательных углов между осями деформирования, что на практике может привести к уплотнению и росту зёрен за счёт реализации механизма рекристаллизации или опалесценции. С уменьшением отрицательных значений I_2 (или с повышением по абсолютной величине гидростатического давления) процессы, протекающие внутри металлической структуры, сопровождающиеся понижением внутренней энергии. Считается, что в поле действия сжимающих нормальных и тангенциальных напряжений, в случае, когда второй инвариант имеет отрицательные значения ($I_2 < 0$), атомарные плоскости сжимаются (то есть кристаллическая структура металла или сплава осуществляет перераспределение), формируя новые высокоэнергетические кластерные соединения. Вместе с тем происходит весомое уменьшение поверхностной энергии GB. Также возможны мартенситные превращения, которые сопровождаются изменением типа кристаллической решетки материала (например, переходом с GSSHU к GCK или ОСК решетки) за счёт избыточной внутренней энергии, получаемой системой от внешнего источника (установки IPD). Однако на данном этапе исследования сделать однозначный вывод в отношении влияния нормальных и тангенциальных составляющих тензора упругой деформации на структуру материала невозможно, поскольку для этого нужно проводить дополнительный анализ.

Согласно рисунку 1, если образец обладает высокой концентрацией MO, то с повышением по абсолютной величине отрицательных значений второго инварианта наблюдается уменьшение плотности GB за счёт роста кристаллитов (штриховые и сплошные части кривых 1-3 на рис. 1). Иными словами, реализуется обратный процесс – изнеможение. В случае увеличения оползневой деформации дефектность в материале возрастает, что, наоборот, сопровождается укреплением структуры и улучшением физико-механических свойств. Эти закономерности обычно встречаются на практике, например, при обработке стали методом всестороннейковки. В основе этого метода лежит многократное

повторение свободнойковки наряду с изменением направления приложения деформации, в результате чего обработка сопровождается динамическими процессами рекристаллизации.

Также в работе, при изучении процесса консолидации меди в условиях IPDK, наблюдаются несколько механизмов роста зерен, которые по-разному проявляются в зависимости от сформированных размеров кристаллитов. Основной причиной роста зёрен, согласно эксперименту, являются процессы рекристаллизации в результате динамической миграции GB и коалесценции соседних зёрен вследствие совпадения их разориентирования во время IPD. Также в работе при исследовании IPD Al-сплавов выявлено, что процесс формирования SMK и NK состояний в зависимости от условий обработки имеет циклический характер и происходит за счёт измельчения зернистой структуры или динамической рекристаллизации. Так, в соответствии с количеством проходов и скоростью обработки $N \leq 2$, $V \leq 300$ м/с формирование SMK структуры происходит путём фрагментации ячеек за счёт изгиба кристаллической решетки и изменения ротационных мод деформации. В результате образованная по такому механизму структура состоит из кристаллитов, разделённых крупноугольными неравновесными границами и содержащих накопление дислокаций. При условии $V \geq 300$ м/с и $N \geq 4$ формирование SMK структуры является результатом протекания обратных процессов и непрерывной динамической рекристаллизации.

Рассматривая общую закономерность процессов IPD, в зависимости от характера приложенных сил, на начальной стадии в материале возникают сильные инерционные силы (сопротивление), поскольку межатомные связи противодействуют приложенным механическим напряжениям. Однако со временем, за счёт работы внешних сил и сопровождающих релаксационных процессов, химические связи ослабевают, что сопровождается уменьшением энергетического «барьера» эффективного потенциала. В результате дальнейшие нагрузки приводят к реорганизации атомной структуры за счёт фрагментации зёрен (постепенно формируется SMK или NK структура).

Поскольку различные напряжения σ_{ij} и связанные с ними упругие деформации ε_{ij}^e приводят к формированию областей с соответствующими плотностями GB h_g , возникает вопрос изучения закономерностей, которые позволили бы однозначно установить связь между упругими деформациями и формированием SMK или NK структур.

Проведём исследование потери устойчивости стационарных состояний h_g^m (решений уравнения (12)), соответствующих экстремумам эффективного потенциала $V(h_g)$, и определим критические значения I_2 , позволяющие осуществить переход между стационарными состояниями уравнения (12). Таким образом, найдём области формирования различных предельных структур в зависимости от значений первого и второго инвариантов ε_{ii}^e, I_2 .

Положив $h_g = 0$ в уравнении (12), запишем условие формирования нулевого максимума эффективного потенциала $V(h_g)$ (11).

$$(\varphi_{0g} + \varphi_{gD} \frac{\varphi_{0D}}{\varphi_{1D}}) \quad (13)$$

Согласно последнему, критическое значение для второго инварианта приобретает вид:

$$I_2^c(\varepsilon_{ii}^e) = -\frac{1}{2(\varphi_{1D}\bar{\mu}_g + \varphi_{gD}\bar{\mu}_D)} \left[\left(\frac{1}{2}\bar{M}_{g\varphi_{1D}} + \frac{1}{2}\bar{M}_{D\varphi_{gD}} \right) (\varepsilon_{ii}^e)^2 + (g_g\varphi_{1D} + g_D\varphi_{gD})\varepsilon_{ii}^e + (\varphi_{0g}^*\varphi_{1D} + \varphi_{0D}^*\varphi_{gD}) \right] \quad (14)$$

Соотношение (14) в координатах $\varepsilon_{ii}^e - I_2$ представлено кривой 1' на рисунке 2. Она отражает критический уровень для реализации первого максимума эффективного потенциала $V(h_g)$ при $h_{g0} = 0$. Для значений I_2 , взятых ниже этой кривой, могут образовываться нулевые стационарные развязки h_{g0} . При превышении этого критического уровня формируются, соответственно, только ненулевые устойчивые состояния системы. Поскольку ε_{ii}^e является аргументом выражения (14), отсюда следует, что все кривые на рисунке 1 начинают формироваться в разных точках. Очевидно, что деформации, которые определяются соотношением (14), играют роль предела текучести, поскольку процесс фрагментации начинает протекать только после достижения упругими сдвиговыми деформациями представленных значений.

Критические значения реализации других решений стационарного уравнения (12) находим с помощью необходимого условия существования экстремумов (производная по h_g от (12))

$$3\varphi_{3g}h_g^2 - 2\varphi_{2g}h_g + \left(\varphi_{1g} - \frac{\varphi_{gD}^2}{\varphi_{1D}}\right) = 0 \quad (15)$$

Очевидно, что решения этого квадратного уравнения (15) позволяют получить предельные стационарные соотношения для плотности GB, разделяющие минимум и ненулевые максимумы эффективного потенциала:

$$h_g^{c1,2} = \frac{2\varphi_{2g} \pm \sqrt{4\varphi_{2g}^2 - 12\varphi_{3g}\left(\varphi_{1g} - \frac{\varphi_{gD}^2}{\varphi_{1D}}\right)}}{6\varphi_{3g}} \quad (16)$$

Для определения критических значений второго инварианта, что отвечают $h_g^{c1,2}$, выразим I_2 из уравнения (12):

$$I_2(\varepsilon_{ii}^e, h_g^c) = -\frac{1}{2(\varphi_{1D}\bar{\mu}_g + \varphi_{gD}\bar{\mu}_D)} \left(\frac{1}{2}\bar{M}_g\varphi_{1D} + \frac{1}{2}\bar{M}_D\varphi_{gD} \right) (\varepsilon_{ii}^e)^2 + (g_g\varphi_{1D} + g_D\varphi_{gD})\varepsilon_{ii}^e + \varphi_{0g}^*\varphi_{1D} + \varphi_{0D}^*\varphi_{gD} - (\varphi_{1g}\varphi_{1D} - \varphi_{gD}^2)h_g^c + \varphi_{1D}\varphi_{2g}(h_g^c)^2 - \varphi_{1D}\varphi_{3g}(h_g^c)^3 \quad (17)$$

Осуществляя подстановку значений (16) к выражению (17), получаем пределы потери устойчивости стационарных состояний системы (решений уравнения (12)) и, соответственно, экстремумов эффективного потенциала $V(h_g)$.

Таким образом, полученные зависимости (14) и (17) при подстановке значений (16) определяют PD режимов фрагментации металла или сплава (рис. 2). Сходящиеся линии соответствуют предельным значениям пунктирных сегментов (см. рис. 1), рассчитываемых для определённого диапазона ε_{ii}^e . Кроме того, точка, в которой сходятся эти кривые, отражает предел исчезновения минимума эффективного потенциала (энергетического «барьера»).

Видно, что PD на рисунке 2 образует четыре области фрагментации металлических образцов. Вместе с тем поведение эффективного потенциала $V(h_g)$ (11) в каждой области представлено соответствующими кривыми на рисунке 3. Следовательно, формирование стационарных состояний или максимумов $V(h_g)$ определяется с помощью управляющих параметров теории значений ε_{ii}^e и I_2 .

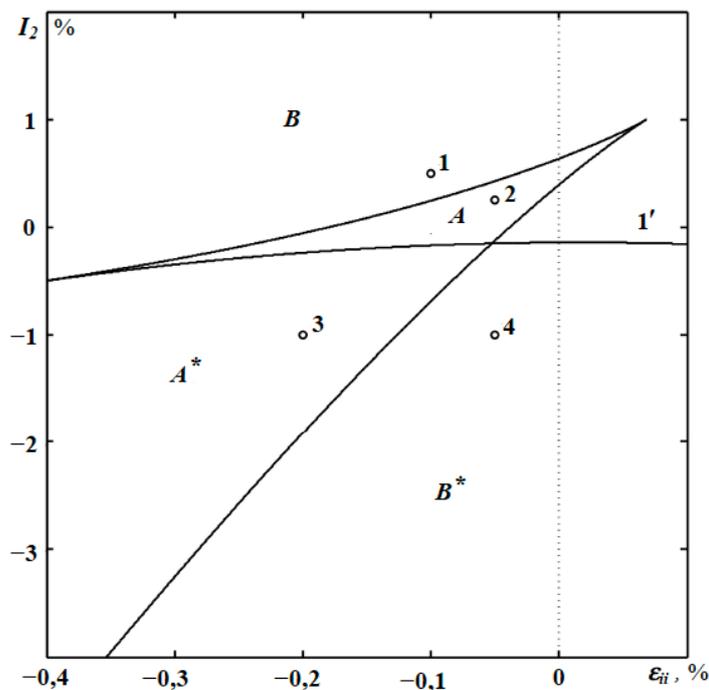


Рисунок 2. Фазовая диаграмма режимов фрагментации с областями формирования двух (A, A^*) и одной (B, B^*) предельных структур

В области А реализуются два ненулевых максимума эффективного потенциала (кривая 2 на рис. 3). Вместе с тем возможно одновременное сосуществование двух предельных структур с большими размерами зёрен (первый максимум) и более мелкой SMK или НК-структурой (второй максимум). Область А* существенно отличается от области А тем, что первый максимум эффективного потенциала приобретает нулевое значение для плотности дефектов $h_{g0} = 0$ (кривая 3 на рис. 3). В этом случае считается, что канал диссипации энергии, который связан с образованием дефектных структур, не работает, а образец является монокристаллом или имеет близкую к нему структуру (CZPK). Однако, как показано на кривой 3, формирование первого максимума $V(h_g)$ происходит в отрицательной области ($h_g < 0$), что лишено физического содержания. Поэтому считаем, что при достижении нулевого значения плотность GB перестает спадать и рассматриваемая система продолжает функционировать в режиме $h_g = 0$.

Аналогично рассуждая, единый нулевой максимум $V(h_g)$ (кривая 4 на рис. 3), что соответствует реализации монокристалла или CZPK, формируется в области малых деформаций В*. Однако видно, что экстремальное значение, аналогично кривой 3, формируется при отрицательном значении плотности GB. Исходя из вышеизложенных соображений, считаем, что система из произвольного неравновесного состояния будет следовать и функционировать исключительно в режиме $h_g = 0$. При больших деформациях из области В возможно образование только одной предельной структуры. В то же время повышение упругих сдвиговых деформаций I_2 позволяет получить предельную структуру с более мелкими размерами зёрен (SMK или НК), которая на границе $I_2 \rightarrow \infty$ будет представлять аморфную структуру. Отметим, что подобный процесс аморфизации кристаллического NdFeB-сплава во время IPDK наблюдался в работе.

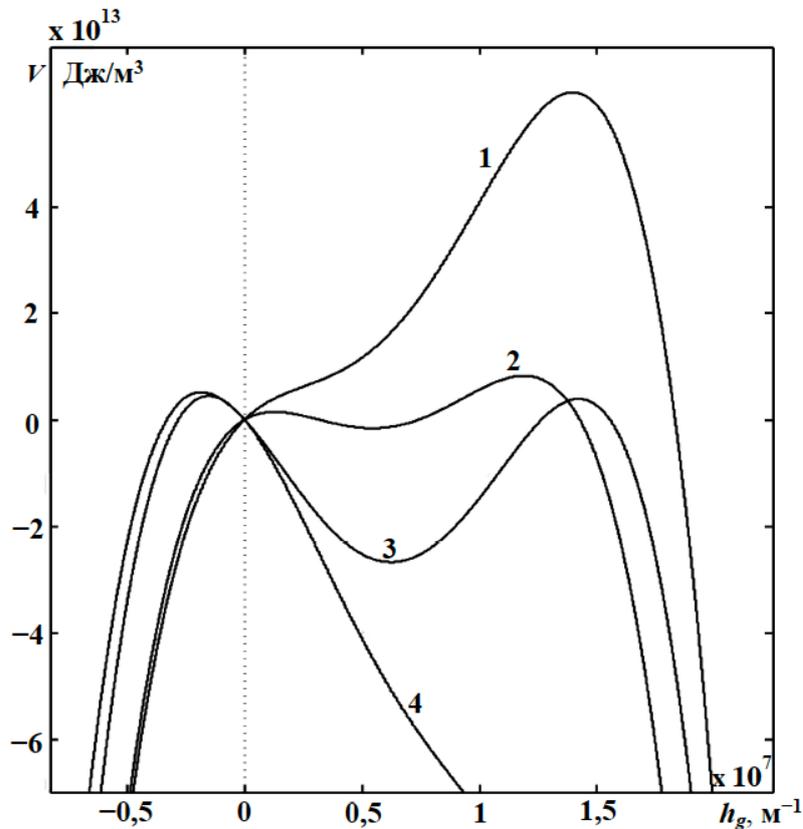


Рисунок 3. Форма эффективного потенциала $V(h_g)$ Дж/м³ (11) в зависимости от плотности GB $h_g \text{ м}^{-1}$. Кривые 1-4 построены для значений инвариантности $I_2 = (5 \cdot 10^{-4}; 2,5 \cdot 10^{-4}; -10^{-4}; -10^{-3})\%$ и $\varepsilon_{ii}^e = (-0,1; -0,05; -0,2; -0,05)\%$ (соответствующие точки 1-4 на рис. 2)

В то же время, реальному поведению материалов при IPD больше всего соответствуют кривые 1 и 2. В случае кривой 1 эволюция системы на начальной стадии протекает медленно, согласно наклону кривой внутренней энергии, а потом резко ускоряется на крутом участке кривой внутренней энергии. Последняя стадия соответствует активному режиму фрагментации материала в процессе IPD.

Заключение

В целом получены зависимости эффективного потенциала $V(h_g)$ (рис. 3), которые в рамках плотности GB соответствуют развитию внутренней энергии и (1) формируют множество решений относительно значений упругой деформации ε_{ij}^e . Вместе с тем эволюция двуdefектной системы в стационарных состояниях внутренней энергии, которая определяется уравнением (11) при определённых условиях (фиксированных значениях ε_{ii}^e и l_2) и установленных параметрах теории (приведены в табл. 1), реализуется вдоль одной кривой из этого множества. Считается, что внутренняя энергия системы может характеризоваться таким поведением в том случае, когда материал с помощью IPD деформируется с равномерной скоростью, но в то же время не укрепляется; или осуществляется процесс укрепления, но скорость деформирования в процессе обработки уменьшается. В случае, когда материал укрепляется и деформируется с постоянной скоростью, эволюция кристаллической структуры для определённого этапа будет описываться различными кривыми.

Следует отметить, что переход между предельными структурами, характеризующимися разными размерами кристаллитов, может происходить непосредственно во время импульсно-поточной деформации. После прекращения обработки дефектная структура больше не эволюционирует и остаётся в состоянии, сложившемся к моменту остановки процесса, так как для дальнейшей эволюции необходимо наличие пластической деформации. Возможна локальная тепловая релаксация, но она практически не влияет на дефектную структуру. В сплавах могут происходить локальные перераспределения компонентов, в чистых металлах – точечных дефектов; система придёт в состояние теплового равновесия, однако могут реализоваться метастабильные структуры.

Скорость деформации, температура и давление являются важными факторами для получения материала с мелкодисперсной структурой. Полученные при определённых условиях размеры кристаллитов будут предельными. Таким образом, рисунок 2 даёт обобщённое представление о возможных сценариях эволюции системы при моделировании, что важно для практического применения.

Список литературы

1. Banlusan K., Strachan A. First-principles study of elastic mechanical responses to applied deformation of metal-organic frameworks // *Journal of Chemical Physics*. 2017. 146(18). P. 2
2. Burkart M., Essig P., Liewald M., Beck M., Mueller M. Compensation of elastic die and press deformations during sheet metal forming by optimizing blank holder design. In *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering*. 2020. Vol. 967. pp. 861-866.
3. Feng W., Lv, J., Hua L., Long H., Wang F. Effect of Relief-hole Diameter on Die Elastic Deformation during Cold Precision Forging of Helical Gears. In *Procedia Engineering*. 2017. Vol. 207. pp. 627-632).
4. Hama T., Matsudai R., Kuchinomachi Y., Fujimoto H., Takuda H. Non-linear deformation behavior during unloading in various metal sheets. *ISIJ International*. 2015. 55(5). pp. 1067–1075.
5. Ishitsuka Y., Arikawa S., Yoneyama S. Change and anisotropy of elastic modulus in sheet metals due to plastic deformation. In *Proceedings of SPIE – The International Society for Optical Engineering*. 2015. Vol. 9302. pp
6. Jeong Y., Gnäupel-Herold T., Iadicola M., Creuziger, A. Uncertainty in flow stress measurements using X-ray diffraction for sheet metals subjected to large plastic deformations // *Journal of Applied Crystallography*. 2016. 49(6), pp. 1991-2004.
7. Khayatzaheh S., Rahimi S. & Blackwell P. Effect of plastic deformation on elastic and plastic recovery in CPTitanium. *Key Engineering Materials*. 2016. pp. 716, 891-896.

8. Kurth R., Bergmann M., Tehel R., Dix M., Putz M. Cognitive clamping geometries for monitoring elastic deformation in forming machines and processes. *CIRP Annals*. 2021.
9. Li Q., Hua G., Lu H., Yu B. & Li D.Y. Understanding the Effect of Plastic Deformation on Elastic Modulus of Metals Based on a Percolation Model with Electron Work Function. 2018. *JOM*, 70(7). pp. 1130-1135.
10. Mandal A., Gupta Y.M. Elastic-plastic deformation of molybdenum single crystals shocked along // *Journal of Applied Physics*. 2017. 121(4). pp. 589-610.
11. Martino E., Santos-Cottin D., Le Mardelé F., Semeniuk K., Pizzochero M., Čerņevičs K. N., ... Akrap A. Structural Phase Transition and Bandgap Control through Mechanical Deformation in Layered Semiconductors 1T-ZrX₂(X = S, Se). *ACS Materials Letters*. 2020. 2(9). pp. 1115-1120.
12. Nagasako N., Asahi R., Isheim D., Seidman D.N., Kuramoto S., Furuta T. Microscopic study of gum-metal alloys: A role of trace oxygen for dislocation-free deformation. *Acta Materialia*. 2016. pp. 105, 347-354.
13. Neto D.M., Coër J., Oliveira M.C., Alves J.L., Manach P.Y., Menezes L. F. Numerical analysis on the elastic deformation of the tools in sheet metal forming processes // *International Journal of Solids and Structures*. 2016. pp. 100–101, 270–285.
14. Odermatt A., Richert C., Huber N. Prediction of elastic-plastic deformation of nanoporous metals by FEM beam modeling: A bottom-up approach from ligaments to real microstructures. *Materials Science and Engineering A*. 2020. P. 791.
15. Shin S., Zhang C., Vecchio K.S. Phase stability dependence of deformation mode correlated mechanical properties and elastic properties in Ti-Nb gum metal. *Materials Science and Engineering A*. 2017. pp. 702, 173-183.
16. Takaki S., Masumura T., Tsuchiyama T. Elastic constants in ideal poly-crystalline metals. *Zairyo // Journal of the Society of Materials Science, Japan*. 2020. 69(9). pp. 657–660.
17. Winey J.M., Renganathan P., Gupta Y.M. Shock wave compression and release of hexagonal-close-packed metal single crystals: Inelastic deformation of c -axis magnesium // *Journal of Applied Physics*. (2015). 117(10). pp.
18. Xiong Q.-L., Li Z., Shimada T., Kitamura T. Energy storage and dissipation of elastic-plastic deformation under shock compression: Simulation and Analysis. *Mechanics of Materials*. 2021. 158.
19. Yashiro K. Deformation mode analysis by eigenvectors of atomic elastic stiffness in static uniaxial tension of various fcc, bcc, and hcp metals. *AIP Advances*. 2020. 10(3).
20. Zeng Z., Flyagina I.S., Tan J.-C. Nanomechanical behavior and interfacial deformation beyond the elastic limit in 2D metal-organic framework nanosheets. *Nanoscale Advances*. 2020. 2(11), pp. 5181-5191.

Systematization of the thermodynamic model of changes in the structure of metals and alloys under mechanical action

Patimat S. Bataeva

Associate Professor, Department of Business Informatics

Chechen State University named after A.Kh. Kadyrov

Grozny, Russia

mguspaeva@mail.ru

ORCID 0000-0000-0000-0000

Akhmed M. Gachaev

Head of the Department of Higher and Applied Mathematics
Chechen State University named after A.Kh. Kadyrov
Grozny, Russia
gachaev-chr@mail.ru
ORCID 0000-0000-0000-0000

Khusein G. Chaplaev

Associate Professor, Department of Economics and Educational Management
Chechen State Pedagogical University
Grozny, Russia
mguspaeva@mail.ru
ORCID 0000-0000-0000-0000

Received 03.09.2023

Accepted 14.10.2023

Published 15.12.2023

UDC 656.1/5:330.341.1

EDN FKLPSM

VAK 4.3.3. Food systems (engineering sciences)

OECD 02.11.JY FOOD SCIENCE & TECHNOLOGY

Abstract

Recently, the construction of theoretical models that allow us to qualitatively describe the accompanied processes of fragmentation (grinding) of the crystal structure of a material during processing by IPD methods has acquired significant importance. A thermodynamic model is presented that uniquely establishes the course of highly nonequilibrium processes and allows us to describe the specifics of the formation of the limiting (stationary) granular structure of the material during IPD. Defect densities, entropy, and components of the elastic strain tensor are considered as independent thermodynamic variables of the model. In the future, the presented ideas are used as a basis for solving specific problems. The purpose of the article is to generalize the thermodynamic model describing the fragmentation of metals or alloys at IPD, and to study the features and conditions of the formation of limit (stationary) structures of various types. Thus, in the approximation of a two-defect model, taking into account the dislocation density and GB, PD is constructed, which establishes the conditions for the formation of limit (stationary) structures of various types. In addition, the article examines in detail the evolution of the main structural defects and their interaction during the implementation of the stationary regime, and also establishes the dependence of the type of limit structure formed on the values of landslide deformation and the initial state of the material. It was found that the change in the states of the system has the character of SPT. It follows from the description methods that the limiting (stationary) structure is not immutable, but represents a dynamic equilibrium of the processes of generation and annihilation of structural defects.

Keywords

architecture, metal, durability, development, structure.

References

1. Banlusan K., Strachan A. Investigation of the first principles of elastic mechanical reactions to applied deformation of organometallic frameworks // *Journal of Chemical Physics*. 2017. 146(18). p. 2
2. Burkart M., Essig P., Leewald M., Beck M., Muller M. Compensation of elastic deformations of the die and press during sheet metal forming by optimizing the design of the workpiece holder. In the IOP conference series: *Materials Science and Engineering*. 2020. Volume 967. pp. 861-866.

3. Feng W., L.V., J., Hua L., Long H., Wang F. The effect of the diameter of the relief hole on the elastic deformation of the die during cold precision forging of screw gears. In the *Processia Engineering*. 2017. Volume 207. pp. 627-632).
4. Hama T., Matsudai R., Kuchinomachi Y., Fujimoto H., Takuda H. Nonlinear deformation behavior during unloading in various metal sheets. *ISIJ International*. 2015. 55(5). pp. 1067-1075.
5. Ishitsuka Yu., Arikawa S., Yoneyama S. Change and anisotropy of the modulus of elasticity in sheet metals due to plastic deformation. In the proceedings of the SPIE – International Society of Optical Engineering. 2015. Volume 9302. p.
6. Chong Yu., Gnaupel-Gerold T., Yadikola M., Kreuziger A. Uncertainty in tensile stress measurements using X-ray diffraction for sheet metals subjected to large plastic deformations // *Journal of Applied Crystallography*. 2016. 49(6), pp. 1991-2004.
7. Khayatzade S., Rahimi S. and Blackwell P. The effect of plastic deformation on the elastic and plastic recovery of titanium. *Key engineering materials*. 2016. pp. 716, 891-896.
8. Kurt R., Bergman M., Tegel R., Dix M., Putz M. Cognitive clamping geometries for monitoring elastic deformation in molding machines and processes. *Annals of CIRP*. 2021.
9. Li K., Hua G., Lu H., Yu B. And Li D.Yu. Understanding the effect of plastic deformation on the modulus of elasticity of metals based on a percolation model with the function of electron operation. 2018. *JOM*, 70 (7). pp. 1130-1135.
10. Mandal A., Gupta Y.M. Elastoplastic deformation of molybdenum single crystals upon impact along // *Journal of Applied Physics*. 2017. 121(4). pp. 589-610.
11. Martino E., Santos-Kottin D., Le Mardelet F., Semenyuk K., Pizzocero M., Chernevics K. N., ... Akrap A. Structural phase transition and band gap control by mechanical deformation in layered semiconductors 1T-ZrX₂(X = S, Se). *Letters based on ACS*. 2020. 2(9). pp. 1115-1120.
12. Nagasako N., Asahi R., Ishheim D., Seidman D.N., Kuramoto S., Furuta T. Microscopic examination of gum-metal alloys: The role of trace amounts of oxygen for deformation without dislocations. *Materials of the act*. 2016. pp. 105, 347-354.
13. Neto D.M., Koher J., Oliveira M.S., Alves J.L., Manah P.Yu., Menezes L. F. Numerical analysis of elastic deformation of tools in sheet metal forming processes // *International Journal of Solids and Structures*. 2016. pp. 100-101, 270-285.
14. Odermatt A., Richert S., Huber N. Prediction of elastic-plastic deformation of nanoporous metals by FEM-beam modeling: a bottom-up approach from ligaments to real microstructures. *Materials Science and Engineering A*. 2020. P. 791.
15. Shin S., Zhang S., Vecchio K.S. Dependence of phase stability on the deformation regime correlating with the mechanical properties and elastic properties of the Ti-Nb gum. *Materials Science and Engineering A*. 2017. pp. 702, 173-183.
16. Takaki S., Masumura T., Tsuchiyama T. Elastic constants in ideal polycrystalline metals. *Zairio // Journal of the Society of Materials Science, Japan*. 2020. 69(9). pp. 657-660.
17. Winey J.M., Renganathan P., Gupta Y.M. Shock wave compression and release of single crystals of metal with hexagonal dense packing: inelastic deformation of magnesium along the c axis // *Journal of Applied Physics*. (2015). 117(10). p.
18. Xiong K.-L., Li Z., Shimada T., Kitamura T. Energy accumulation and dissipation of elastoplastic deformation under shock compression: modeling and analysis. *Mechanics of materials*. 2021. 158.
19. Yashiro K. Analysis of the deformation mode according to the eigenvectors of atomic elastic stiffness under static uniaxial tension of various hcc, bcc and gpu metals. *AIP Achievements*. 2020. 10(3).
- 20.** Zeng Z., Flyagina I.S., Tan J.-S. Nanomechanical behavior and interfacial deformation beyond the elastic limit in two-dimensional organometallic skeleton nanoliths. *Nanoscale achievements*. 2020. 2(11), pp. 5181-5191.