

PACS: 05.70.Ce, 05.70.Ln, 62.20.Mk

Л.С. Метлов<sup>1</sup>, М.М. Мышилев<sup>2</sup>

## ОБЩИЕ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ МЕХАНИЗМЫ ИПД И СВЕРХПЛАСТИЧНОСТИ

<sup>1</sup>Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина НАН Украины  
ул. Р. Люксембург, 72, г. Донецк, 83114, Украина  
E-mail: metlov@mail.donbass.com

<sup>2</sup>Институт металлургии и материаловедения им. А.А. Байкова РАН  
Ленинский проспект, 49, г. Москва, 119911, Россия

Статья поступила в редакцию 28 августа 2009 года

*В рамках теории фазовых переходов Ландау предложена двухуровневая термодинамическая модель формирования структуры и субструктур металлов в процессе обработки их методами интенсивной пластической деформации (ИПД). Показано, что в зависимости от соотношения между параметрами модели она может описывать процессы преимущественного формирования структуры зерен или субзерен. Указаны особенности, связанные с взаимодействием элементов структуры и субструктур в процессе их формирования.*

**Ключевые слова:** сверхпластичность, интенсивная пластическая деформация, структура, субструктура, динамическая рекристаллизация, структурная перестройка

### **Введение**

Существует два типа релаксационных механизмов. Для первого ведущую роль играют флуктуационные явления, связанные с потерей симметрии относительно направления воздействия при вычислении средних термодинамических величин. Это так называемые вязкие механизмы [1–3]. Второй тип механизмов связан с динамическими процессами, протекающими при генерации, аннигиляции и движении дефектов. Например, при рождении дислокации происходит перескок системы из одного устойчивого состояния в другое, который сопровождается динамическими переходными процессами в виде акустической эмиссии.

Термодинамика внутренних переменных состояния имеет длительную историю. В 1928 г. Гэрзфельд и Райс при определении дисперсии и затухания звука предложили важную идею учета изменения внутренней структуры многоатомного газа путем введения дополнительной переменной [4]. За время изучения проблемы было рассмотрено большое количество видов кинетических уравнений

ний, описывающих изменение внутренней структуры в неравновесных процессах. Особо следует выделить работы школы Ландау [5–7], которая развивала одно из наиболее физических направлений теории неравновесных процессов, представленное в современной науке теорией фазовых полей [8–11].

Теория сверхпластичности развивалась многими школами России, Украины и за рубежом. В одном из подходов рассматривается роликовый механизм сверхпластичности, когда зерна в процессе деформирования вращаются, подобно роликам, все в одном и том же направлении [12,13]. Такая модель имеет ряд противоречий, связанных с тем, что направление вращения не определено симметрией задачи. Кроме того, движение материала в соседних зернах на границе контакта осуществляется в противоположных направлениях, в связи с чем относительная взаимная скорость движения на границе зерна оказывается равной удвоенной линейной скорости вращений в каждом отдельном зерне.

В работах О.А. Кайбышева с соавторами изложена концептуальная основа модели сверхпластической деформации (СПД), базирующейся на представлениях о полосах кооперированного зернограничного проскальзывания (КЗГП) [14,15]. Модель удовлетворяет стандартному набору требований, предъявляемых к физическим моделям сверхпластичности, и позволяет осуществлять анализ проблемы на макроуровне. Однако в ней не выписываются кинетические уравнения, связывающие все макропараметры теории, кроме кинетического соотношения между скоростью деформирования и средним числом полос КЗГП, зависящих от действующих напряжений (см. формулу (1) в [14]).

В.Н. Перевезенцев с соавторами то же самое соотношение трактуют, исходя из механизма зернограничного проскальзывания, основанного на представлениях о локальном плавлении границ зерен (см. соотношение (22) в [16]). Для алюминиевых сплавов, обладающих высокоскоростной сверхпластичностью, эффект локального плавления связывается с сегрегацией на межкристаллитных и межфазных границах магния, кремния и некоторых других элементов, что приводит к смещению точки солидуса. Сдвиговое плавление развивается при высоких скоростях проскальзывания, т.е. при высоких скоростях деформирования, что и отмечается в [16,17]. Эта концепция может быть естественным образом дополнена концепцией сдвигового плавления, развиваемой авторами [18–20].

Наиболее продвинутая термодинамическая теория, предложенная Я.И. Рудаевым с соавторами, базируется на кинетическом уравнении [21–23]. В основу подхода положена «потенциальная» функция, по виду совпадающая с функционалом свободной энергии в теории фазовых переходов 2-го рода. При этом уравнение состояния записано в конечной форме и дополнено кинетическими уравнениями для управляющего параметра и внутренних параметров состояния. Природа внутренних процессов, связанная с модификацией дефектных подсистем, не конкретизируется.

Теория сверхпластичности, основанная на концепции кооперативного движения дефектов и перестраиваемого потенциального рельефа, предложен-

на А.И. Олемским с соавторами [24]. Теория базируется на синергетических представлениях. Главное внимание в ней уделяется структурному аспекту, однако вопрос о производстве теплоты и энтропии внутренними источниками не рассматривается.

На примере деформирования прутков алюминиево-литиевых сплавов методами равноканального углового (РКУ) прессования [25] установлено, что в процессе ИПД могут формироваться развитая субструктура и мелкая структура зерен. При низких температурах формируются более мелкое зерно, но менее развитая субструктура; при высоких температурах, наоборот, – крупные зерна, но развитая субструктура. Причем большую способность к СПД демонстрируют как раз образцы с более развитой субструктурой. Образцы с мелким зерном, в отличие от общепринятого мнения, демонстрируют меньшую способность к СПД – для них деформация до разрушения оказалась незначительной. В других экспериментах методами полевой ионной микроскопии установлено, что нанозерна не являются идеальными бездефектными объектами, как это полагалось раньше, но также обладают развитой субструктурой [26].

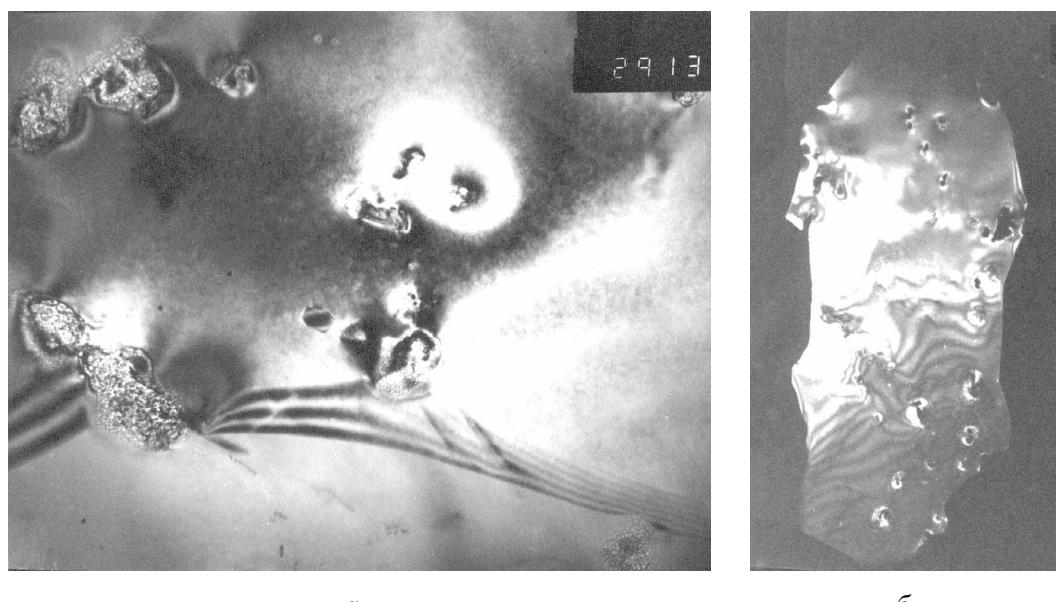
К числу основных проблем сверхпластичности относится определение ее механизмов. Одним из таких механизмов может служить явление «ударной» динамической рекристаллизации, когда субграница может быстро, фактически по сценарию ударной волны перемещаться в объеме зерна. В пользу такого механизма релаксации упругой энергии в условиях ИПД и СПД могут быть приведены экспериментальные и теоретические результаты, полученные моделированием методами молекулярной динамики.

### **Анализ экспериментальных результатов**

В статье [27] представлено исследование реорганизации в процессе сверхпластического течения структуры Al–Li-сплава, обладающего сочетанием уникальных свойств – высокими значениями упругих модулей и прочности, а также малой плотностью материалов. На первой стадии диаграммы растяжения в терминах истинных напряжений и деформаций  $\sigma$ – $e$  происходит повсеместная непрерывная реорганизация структуры в условиях преобладания процессов деформационного упрочнения над процессами динамического возврата и активного внутризеренного скольжения. В результате зерна становятся вытянутыми в направлении деформации. Сформированные таким образом зерна характерны для конца первой стадии (упрочнения) и начального участка второй стадии (разупрочнения) этой диаграммы. В процессе деформации в начале стадии разупрочнения вытянутость зерен уменьшается, они становятся практически равноосными.

Авторы обращают внимание на характерное для обеих стадий наличие в зернах многочисленных мелких частиц  $Al_2LiMg$  наряду с их присутствием на границах зерен. Подобное распределение частиц отличается от характерного для исходных образцов. Важен также факт, что частицы  $Al_2LiMg$  в зернах не-

редко образуют цепочки, расположенные приблизительно параллельно профилям границ зерен (рис. 1). Такое расположение не может быть абсолютно случайным и связано со скачкообразным движением границ зерен в процессе «ударной» динамической рекристаллизации. Можно предположить, что на участках, свободных от включений частиц  $\text{Al}_2\text{LiMg}$ , граница зерна перемещалась очень быстро, фактически скачком или по сценарию ударных волн и поэтому не успела оставить своих следов в форме указанных включений. В местах, где такие включения образовались, граница зерна имела длительную остановку. В дальнейшем она была сорвана локальными напряжениями и передвинулась.



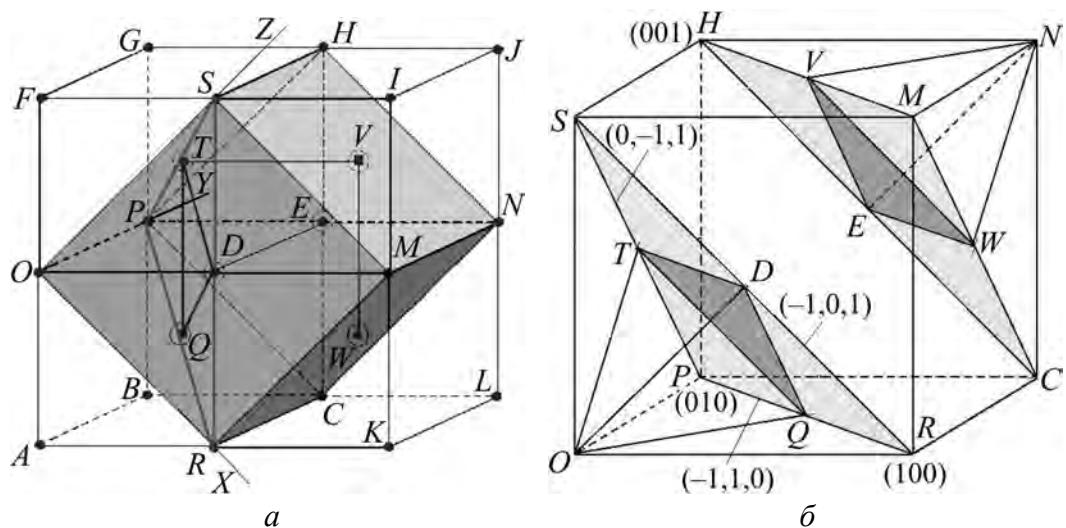
**Рис. 1.** Характерное расположение частиц  $\text{Al}_2\text{LiMg}$ : *а* – светлопольное, *б* – темнопольное изображения зерен. Видны частицы на границах и внутри зерен

Эти результаты еще не позволяют абсолютно точно утверждать, что существует еще один механизм быстрой перестройки зеренной структуры металлов и сплавов, протекающий по сценарию ударных волн, но их вполне достаточно, чтобы планировать новые целенаправленные эксперименты по выявлению и систематическому исследованию таких механизмов. По крайней мере, наличие подобного механизма во многом могло бы объяснить процессы быстрой перестройки структуры материала на более глубоком структурном уровне, которые важны на поздних стадиях протекания СПД, когда достигается мелкая зеренная структура. Этот же механизм смог бы многое объяснить в плане быстрой адаптации формы зерен в процессе СПД.

### Компьютерное моделирование «ударной» рекристаллизации

Для подтверждения принципиальной возможности скачкообразного движения границ зерен по описанному выше сценарию был проведен компьютерный эксперимент с привлечением методов молекулярной динамики. В

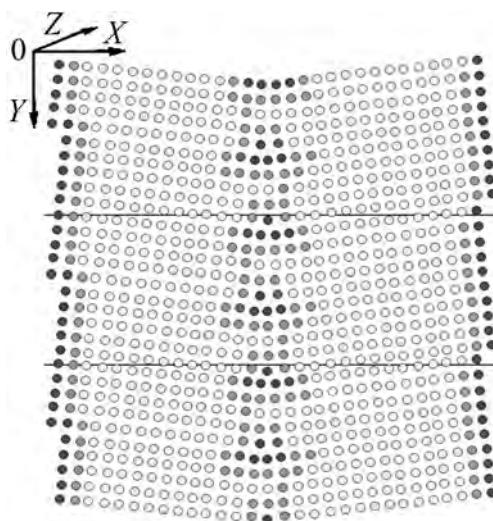
силу ограниченности вычислительных ресурсов рассматривали 3D-модель кристалла меди, состоящую из 600 атомов. Положение атомов элементарной ячейки соответствует ГЦК-структуре (рис. 2). Для создания эффекта бесконечного кристалла задавали периодические граничные условия с периодом двух постоянных решетки в направлении оси  $Z$  и периодом 10 постоянных решетки в направлении оси  $Y$ . В направлении оси  $X$  периодические граничные условия не накладывались, так что кристалл имел в этом направлении конечную толщину со свободными границами (пленка). По толщине пленки содержалось 30 атомов, расстояние между которыми равно  $\sqrt{2}$  от постоянной решетки (отрезок  $OQ$ ).



**Рис. 2.** Элементарная ячейка ГЦК-структуры: *а* – в системе координат, принятой в статье; *б* – в собственной системе координат кубической ячейки

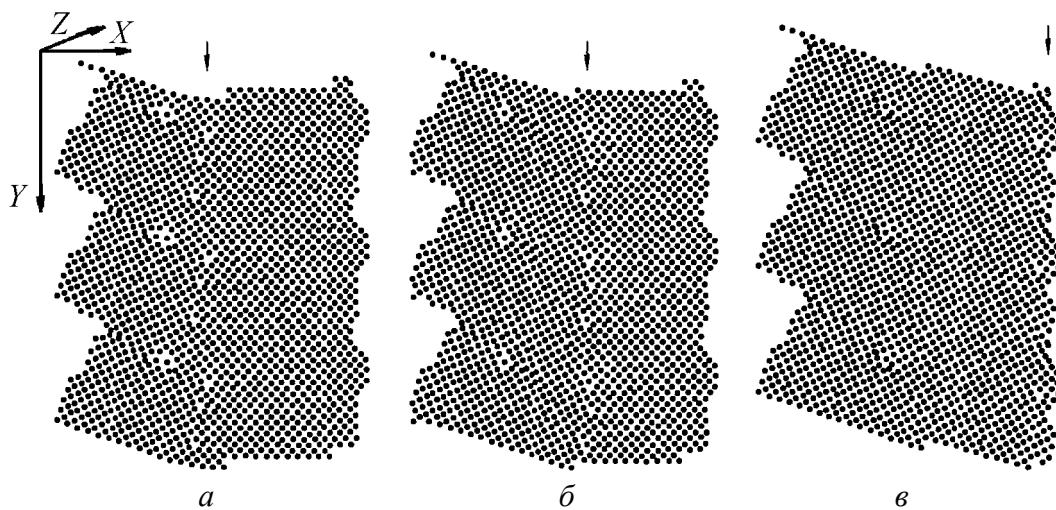
В начальном состоянии путем сдвига межатомарных плоскостей в пленку вводили дислокационную стенку, состоящую из двух дислокаций в пределах одного периода в граничных условиях (рис. 3). Вектор Бюргерса дислокаций направлен параллельно оси  $X$ , дислокационная линия – вдоль оси  $Z$ . Дислокационная стенка представляет собой малоугловую границу, параллельную свободным границам системы и разделяющую пленку на два бесконечных субзерна. За счет увеличения периода граничных условий в направлении оси  $Y$  пленку растягивали с постоянной скоростью (см. рис. 1).

Следует отметить, что введенные в силу ограниченности вычислительных ресурсов периодические граничные условия с периодом двух постоянных решетки, конечно, существенно понижают ценность проведенного эксперимента, так как фактически вводят запрет на движение дислокаций в некоторых плоскостях максимальной упаковки. В силу этого в некоторых ситуациях искусственно активизируются другие плоскости скольжения. Можно надеяться, что качественное согласие с поведением реальных ГЦК-кристаллов сохранится.



**Рис. 3.** Начальное положение дислокационной стенки по толщине пленки. Более темные градации серого цвета соответствуют более высоким значениям потенциальной энергии частиц

порядка  $16^\circ$ ). Фактически она является высокоугловой границей между двумя бесконечными в плоскости пленки зернами, которые в направлении  $X$  имеют наноразмер. Граница перемещалась как целое в поперечном сечении слева направо со скоростью порядка 0.45 скорости звука (рис. 4). В результате ее перемещения весь кристалл оказывался развернутым на некоторый угол относительно начального направления его осей симметрии (сравни рис. 3 и рис. 4, в). Такое перемещение границы можно рассматривать как движение фронта ударной волны. Слева и справа от него материал находится в



**Рис. 4.** Перемещение границы зерна по сечению слева направо: *а* – начальная стадия движения, *б* – промежуточная, *в* – завершающая. Стрелка указывает положение границы в сечении

В процессе растяжения дислокационная стенка разрушается, порождая новые дислокации и неоднородности. В большинстве проведенных авторами компьютерных экспериментов образование и перемещение дефектов осуществлялось индивидуально в результате дислокационных реакций и не носило коллективного характера. Только в одном из экспериментов удалось наблюдать коллективное согласованное движение дефектов. На определенной стадии растяжения пленки в правой части ее сечения была сформирована цепочка разуплотнений (светлая вертикальная полоска на рис. 4, *а*), которая разделяла две сильно разориентированные области в сечении пленки (угол разориентации

различных структурных и термодинамических состояниях, что можно трактовать как скачки свойств на фронте ударной волны. Отсюда следует предлагаемый авторами термин «ударная рекристаллизация», который отражает особенности данного механизма релаксации материала.

Эксперимент показывает принципиальную возможность движения границ зерен по сценарию ударных волн, что согласуется с экспериментальными доказательствами такой возможности. В силу ограниченности вычислительных ресурсов для исследований была выбрана простейшая конфигурация кристаллита со свободными боковыми границами. В реальном кристалле большая часть границ находится вдали от свободных поверхностей, и движение границ должно быть согласованным.

### **Термодинамика ИПД с учетом субструктур**

Как было сказано выше, для того чтобы материал после ИПД обладал свойством сверхпластичности, важно сформировать в нем развитую субструктуру. Ранее для моделирования эволюции зеренной структуры в процессе ИПД авторы рассматривали феноменологическую одноуровневую модель с одним видом структурного дефекта – границей зерна [28–32]. Формирование субструктур не рассматривали. В рамках этой модели вводили пару сопряженных термодинамических переменных:  $\varphi_g$  – поверхностную плотность энергии межзеренных границ и  $h_g$  – объемную плотность общей поверхности межзеренных границ. Большие значения переменной  $h_g$  соответствуют более мелкому зерну. Для описания одновременного формирования структуры и субструктуре необходимо ввести две пары таких термодинамических переменных (двухуровневая модель), одна из которых  $\varphi_g$  и  $h_g$  по-прежнему характеризует состояние границ зерен, а вторая  $\varphi_s$  и  $h_s$  – состояние границ субзерен. Формирование этих двух видов дефектов находится в конкурентных отношениях. Диссипация энергии, поступившей в систему за счет внешней работы, будет разветвляться по этим двум каналам.

Термодинамическое тождество для внутренней энергии в данном случае может быть записано в виде

$$du = \sigma_{ij} d\epsilon_{ij}^e + T ds + \varphi_g dh_g + \varphi_s dh_s, \quad (1)$$

где  $u$  – плотность внутренней энергии,  $\sigma_{ij}$  – тензор напряжений,  $\epsilon_{ij}^e$  – упругая часть тензора деформаций,  $T$  – температура,  $s$  – колебательная (чисто тепловая) энтропия. Роль конфигурационной (дефектной) энтропии при таком рассмотрении играют плотности дефектов  $h_g$  и  $h_s$ . Переменные  $\varphi_g$  и  $\varphi_s$  имеют ту же природу, что и эффективная температура  $T_e$  [33] или фиктивная  $T_f$  [34–37]. Эти переменные в случае неравновесных состояний отличаются между собой и от равновесной температуры  $T$ .

Энергия, полученная от внешних источников, может пойти на формирование либо зеренной, либо субзеренной структуры. При низких температу-

рах она идет в основном на формирование высокоугловых межзеренных границ, при высоких температурах – на формирование малоугловых внутризеренных границ. Формирование предельного размера зерна и субзерна определяется динамическим равновесием процессов измельчения структуры и процессов ее регенерации, рекристаллизации, в которых важную роль могут сыграть те же механизмы, что и при СПД.

Внутренняя энергия является функцией собственных аргументов  $u = u(\varepsilon_{ij}^e, s, h_g, h_s)$ . Совершая преобразование Лежандра по различным парам термодинамических переменных, получим различные варианты термодинамических потенциалов. В частности, преобразование Лежандра по переменным  $T$  и  $s$  приводит к свободной энергии вида

$$F = u - Ts, \quad (2)$$

собственными аргументами которой будут переменные:  $\varepsilon_{ij}^e, T, h_g, h_s$ . Представление свободной энергии в виде полинома четвертой степени по этим переменным имеет вид

$$f(h_g, h_s) = f_0 + \sum_{m=g,s} \left( \varphi_{0m} h_m - \frac{1}{2} \varphi_{1m} h_m^2 + \frac{1}{3} \varphi_{2m} h_m^3 - \frac{1}{4} \varphi_{3m} h_m^4 \right) + \varphi_{gs} h_g h_s, \quad (3)$$

где  $f_0$ ,  $\varphi_{km}$  ( $k = 0, 1, 2, 3$ ),  $\varphi_{gs}$  – коэффициенты разложения, зависящие от температуры  $T$  и упругой части тензора деформаций  $\varepsilon_{ij}^e$  как от управляющих параметров:

$$\begin{aligned} \varphi_{0m} &= \varphi_{0m}^* - g_m \varepsilon_{ii}^e + \left( \frac{1}{2} \bar{\lambda}_m (\varepsilon_{ii}^e)^2 + \bar{\mu}_m (\varepsilon_{ij}^e)^2 \right) + \varepsilon_{ii}^e \left( \frac{1}{2} \bar{\bar{\lambda}}_m (\varepsilon_{ii}^e)^2 + \bar{\bar{\mu}}_m (\varepsilon_{ij}^e)^2 \right) + \\ &\quad + A_m \varepsilon_{ij}^e \varepsilon_{jl}^e \varepsilon_{li}^e + \alpha_m T + \alpha_{gm} T \varepsilon_{ii}, \end{aligned} \quad (4a)$$

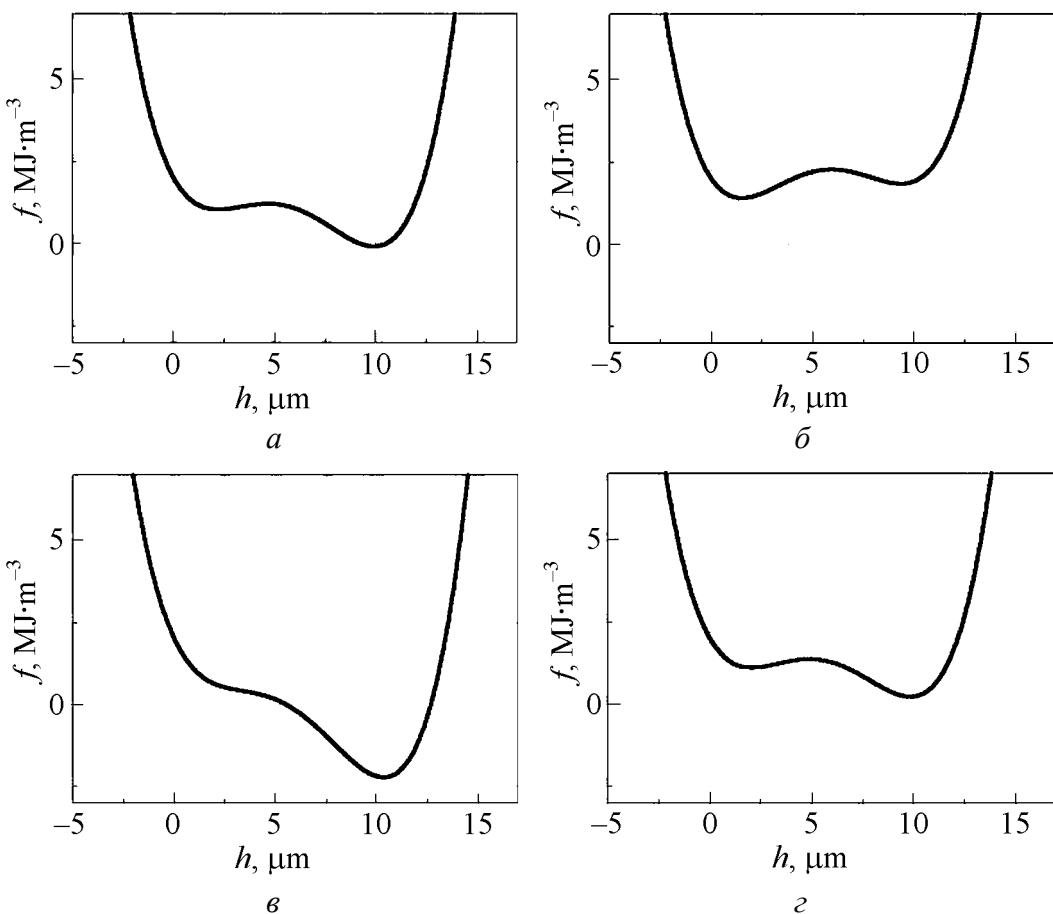
$$\varphi_{1m} = \varphi_{1m}^* - 2e_m \varepsilon_{ii}^e - 2 \left( \frac{1}{2} \tilde{\lambda}_m (\varepsilon_{ii}^e)^2 - \tilde{\mu}_m (\varepsilon_{ij}^e)^2 \right), \quad (4b)$$

$$\varphi_{2m} = \varphi_{2m}^* + f_m \varepsilon_{ii}^e, \quad (4b)$$

$$\varphi_{gs} = \varphi_{gs}^* + g_m \varepsilon_{ij}^e. \quad (4g)$$

Слагаемые в скобках уравнения (3) описывают каждый вид дефектообразования так, если бы они протекали независимо, последнее слагаемое описывает взаимодействие дефектов, т.е. влияние одного вида дефекта на образование другого вида.

При отсутствии взаимодействия каждый из процессов дефектообразования протекает независимо. Набор параметров по каждому виду дефекта предопределяет индивидуальные особенности дефектов этого вида. На рис. 5 приведены графики плотности свободной энергии, взятой с противоположным знаком  $f = -f(h_g, h_s)$ , по каждому виду дефекта отдельно, для которых



**Рис. 5.** Графики свободной энергии: *a*, *б* –  $\varepsilon_{ij}^e = -0.002$ ; *в*, *г* –  $\varepsilon_{ij}^e = -0.0022$ ; *а*, *в* –  $\bar{\mu}_g = -25 \text{ MJ/m}^2$ ; *б*, *г* –  $\bar{\mu}_s = -20 \text{ MJ/m}^2$ .

соответствующие постоянные теории выбраны одинаковыми и равными:  $\phi_0^* = 8 \text{ J/m}^2$ ,  $\phi_1^* = 0.7 \cdot 10^{-4} \text{ J} \cdot \text{м}$ ,  $\phi_2^* = 0.18 \cdot 10^{-10} \text{ J} \cdot \text{м}$ ,  $\phi_3^* = 0.107 \cdot 10^{-17} \text{ J} \cdot \text{м}$ ,  $g = 0.12 \cdot 10^4 \text{ J/m}^2$ ,  $e = 0.36 \cdot 10^{-2} \text{ J} \cdot \text{м}$ ,  $\varepsilon_{ij}^e = -0.107$  (остальные параметры равны нулю, индекс, обозначающий тип дефекта, опущен). Исключение составляет параметр  $\bar{\mu}$ , который для границ зерен и субзерен выбран различным:  $\bar{\mu}_g = -25 \text{ MJ/m}^2$ ,  $\bar{\mu}_s = -20 \text{ MJ/m}^2$ , т.е.  $\bar{\mu}_g < \bar{\mu}_s$ . Величина этого коэффициента определяет чувствительность данного типа дефектообразования к сдвиговым напряжениям.

Из рис. 5,*а*,*б* видно, что при малых значениях напряжений свободная энергия и границы, и субграницы имеет два минимума. Левый минимум соответствует формированию в процессе ИПД более крупных зерен или субзерен, правый – более мелких. Эти состояния отделены потенциальным барьером, благодаря которому система остается в том из минимумов, в который она попала в силу начальных условий. Как правило, обработке ИПД подвергаются образцы с крупным размером зерна, поэтому в процессе эволюции

система попадает в левый минимум. В силу обратной зависимости между средним размером зерна и параметром порядка  $h_m$  в область левого минимума попадают зерна с очень большим разбросом по размеру. Это приводит к тому, что фактически размер зерна будет меняться мало (он и так уже приближается к минимуму). Поэтому левый минимум свободной энергии соответствует обычной пластичности, а структуру, которая при этом формируется, можно считать первой стационарной или предельной [30].

При увеличении напряжений левый минимум исчезает (рис. 5,*в*). Причем раньше он исчезает для дефектов того типа, для которого выше значение параметра  $\bar{\mu}$ , т.е. в данном случае – для границ зерен. Когда напряжение достигает критического значения (исчезает левый минимум), система относительно быстро эволюционирует к правому минимуму. Именно такой переход по сценарию фазового перехода первого рода соответствует деформированию материала в режиме ИПД. Размер субструктуры останется на прежнем уровне, поскольку для нее в этот момент сохраняется ненулевой потенциальный барьер, отделяющий систему от состояний с более мелким субзерном (рис. 5,*г*). Чтобы возникла развитая (более мелкая) субструктура, необходимо еще больше увеличить внешние напряжения (скорость деформирования), чтобы система перешла в правый минимум и по второму параметру порядка  $h_s$ . Как правило, все установки ИПД работают при одной скорости деформирования, поэтому такой переход не может быть осуществлен.

Если между параметрами  $\bar{\mu}$  выполняется противоположное соотношение, а именно  $\bar{\mu}_g > \bar{\mu}_s$ , то с ростом внешних напряжений вначале будет формироваться более мелкая субструктура, и только с дальнейшим ростом напряжения – зернистая структура. Если внешнее напряжение оставить на том уровне, на котором произошел переход в более мелкое состояние субструктуры, то структура сохранит крупнозернистое строение.

Реально система за один цикл ИПД не успевает попасть в точку минимума свободной энергии. За один цикл система проходит только часть этого пути. После нескольких циклов ИПД она достигает минимума свободной энергии, после чего размер зерен и субзерен перестает меняться, сколько бы циклов ни повторялось. После достижения стационарного (предельного) состояния увеличение суммарной (накопленной) деформации не приводит к существенным качественным изменениям, кроме некоторого выделенного тепла. В этом плане система качественно ведет себя так же, как при сверхпластичности – при постоянном внешнем напряжении система может деформироваться (удлиняться при классической сверхпластичности) сколь угодно много. Можно положить, что для ИПД в стационарном состоянии действуют те же механизмы деформирования, что и в случае сверхпластичности, в том числе связанные с межзеренным проскальзыванием и с «ударной» рекристаллизацией (см. рис. 4). Именно эти механизмы препятствуют бесконечно большому измельчению зерен и субзерен в процессе ИПД.

### **Заключение**

Таким образом, в реальном и численном эксперименте показана принципиальная возможность движения границ зерен с высокой скоростью. Предложена термодинамическая модель формирования структуры и субструктур в процессе ИПД. Проанализированы очередность преобразования структуры и субструктуры и ее зависимость от параметров модели и приложенного внешнего напряжения.

Работа выполнена при финансовой поддержке государственных фондов фундаментальных исследований Украины и России (договор Ф28/443-2009).

1. *T. Yamada, K. Kawasaki*, Prog. Theor. Phys. **38**, 1031 (1967).
2. *H.B. Callen, T.A. Welton*, Phys. Rev. **83**, 34 (1951).
3. *Ch. Jarzynski*, Phys. Rev. Lett. **78**, 2690 (1997).
4. *K.F. Herzfeld, F.O. Rice*, Phys. Rev. **31**, 691 (1928).
5. *Л.Д. Ландау, И.М. Халатников*, ДАН СССР **96**, 459 (1954).
6. *Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц*, Теоретическая физика, Т. 5. Статистическая физика, Ч. 1, Наука, Москва (1976).
7. *Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц*, Теоретическая физика, Т. 9. Статистическая физика, Ч. 2. Теория конденсированного состояния, Наука, Москва (1978).
8. *I.S. Aranson, V.A. Kalatsky, V.M. Vinokur*, Phys. Rev. Lett. **85**, 118 (2000).
9. *L.O. Eastgate, J.P. Sethna, M. Rauscher, T. Cretegny*, Phys. Rev. E**65**, 036117 (2002).
10. *J.C. Ramirez, C. Beckermann, A. Karma, H.-J. Diepers*, Phys. Rev. E**69**, 051607 (2004).
11. *J. Rosam, P.K. Jimack, A.M. Mullis*, Phys. Rev. E**79**, 030601 (2009).
12. *V. Paidar, S. Takeuchi*, J. Phys. III **1**, 957 (1991).
13. *J.C. Tan, M.J. Tan*, Scr. Mater. **47**, 101 (2002).
14. *А.И. Пшеничнюк, О.А. Кайбышев, В.В. Астанин*, ФТТ **39**, 2179 (1997).
15. *О.А. Кайбышев, А.И. Пшеничнюк*, Вестник УГАТУ № 1, 53 (2000).
16. *В.Н. Перевезенцев, Ю.В. Свирина*, ЖТФ **68**, вып. 12, 38 (1998).
17. *В.Н. Перевезенцев, Ю.В. Свирина, А.Ю. Угольников*, ЖТФ **72**, вып. 4, 11 (2002).
18. *А.В. Хоменко, Я.А. Ляшенко*, ЖТФ **75**, вып. 11, 17 (2005).
19. *Л.С. Метлов, А.В. Хоменко, Я.А. Ляшенко*, Сборник научных трудов международной научной конференции «Физико-химические основы формирования и модификации микро- и наноструктур» (ФММН-2008), Харьков, Украина (2008), с. 206.
20. *L.S. Metlov, A.V. Khomenko, I.A. Lyashenko*, Preprint: № 0903.5031, New York, ArXiv (cond-mat), 2009 (<http://arxiv.org/abs/cond-mat/0903.5031>).
21. *Я.И. Рудаев, Д.А. Китаева*, Вестник СумГУ, естественнонаучная серия № 3, 72 (2005).
22. *Д.А. Китаева, Я.И. Рудаев*, Математическое моделирование систем и процессов **13**, 115 (2005).
23. *Г.М. Аманбаева, Д.А. Китаева, Я.И. Рудаев*, Математическое моделирование систем и процессов **14**, 6 (2006).

24. А.И. Олемской, А.В. Хоменко, Успехи физики металлов **2**, 189 (2001).
25. М.М. Мишляев, Е.В. Коновалова, М.М. Мишляева, А.С. Медведев, Тезисы 4-й международной конференции «Материалы и покрытия в экстремальных условиях», Жуковка, АР Крым, Украина (2006), с. 200.
26. V. Varyukhin, B. Efros, V. Ivchenko, N. Efros, E. Popova, Rev. Adv. Mater. Sci. **10**, 422 (2005).
27. M.M. Myshlyaev, M.M. Kamalov, M.M. Myshlyaeva, in: Nanomaterials by Severe Plastic Deformation, M. Zehetbauer, R.Z. Valiev (eds.), Wiley-VCH, Weinheim, Germany (2005), P. 717.
28. Л.С. Метлов, Деформация и разрушение материалов № 2, 40 (2007).
29. Л.С. Метлов, Вісник Донецького університету, Сер. А: Природничі науки, вип. 1, 269 (2006).
30. Л.С. Метлов, Вісник Донецького університету, Сер. А: Природничі науки, вип. 2, 169 (2006).
31. Л.С. Метлов, Вісник Донецького університету, Сер. А: Природничі науки, вип. 1, 196 (2007).
32. Л.С. Метлов, Вісник Донецького університету, Сер. А: Природничі науки, вип. 2, 108 (2007).
33. J.S. Langer, Phys. Rev. **E77**, 021502 (2008).
34. P.G. Wolynes, PNAS **106**, 1353 (2009).
35. A.Q. Tool, J. Am. Ceram. Soc. **29**, 240 (1946).
36. O.S. Narayanaswamy, J. Am. Ceram. Soc. **54**, 491 (1971).
37. C.T. Moynihan, A.J. Easteal, M.A. Debolt, J. Tucker, J. Am. Ceram. Soc. **59**, 12 (1976).

Л.С. Метлов, М.М. Мишляєв

### ЗАГАЛЬНІ ТЕРМОДИНАМІЧНІ МЕХАНІЗМИ ІПД І НАДПЛАСТИЧНОСТІ

В межах теорії фазових переходів Ландау запропонована двухрівнева термодинамічна модель формування структури і субструктур металів в процесі обробки їх методами інтенсивної пластичної деформації (ІПД). Показано, що в залежності від співвідношення між параметрами моделі вона може описувати процеси формування переважно структури зерен або субзерен. Указано особливості, які пов'язані із взаємодією елементів структури і субструктур в процесі їх формування.

**Ключові слова:** надпластичність, інтенсивна пластична деформація, структура, субструктура, динамічна рекристалізація, структурна перебудова

L.S. Metlov, M.M. Myshlyaev

### THERMODYNAMIC MECHANISMS COMMON FOR SEVERE PLASTIC DEFORMATION AND SUPERPLASTICITY

Within the framework of Landau phase-transition theory a two-layer thermodynamic model is proposed for the formation of structure and substructure of metals processed by

severe plastic deformation (SPD). It is shown that the model can describe processes of preferential formation of grain or subgrain structure depending on the relationship between model parameters. Features of structure and substructure elements interaction are noted.

**Keywords:** superplasticity, severe plastic deformation, structure, substructure, dynamic recrystallization, rearrangement of structure

**Fig. 1.** Typical location of  $\text{Al}_2\text{LiMg}$  particles:  $a$  – light-field,  $\delta$  – dark-field images of grains. Particles at grain boundaries and inside the grains are visible

**Fig. 2.** Unit cell of fcc-structure:  $a$  – in the coordinate system adopted in this paper;  $\delta$  – in the coordinate system of cubic cell

**Fig. 3.** Initial position of dislocation wall in film thickness. More dark gradations of the grey color correspond to higher values of the potential energy of particles

**Fig. 4.** Grain-boundary displacement in the section from left to right:  $a$  – initial stage of travel,  $\delta$  – intermediate,  $\epsilon$  – final. Position of the boundary in section is shown by arrow

**Fig. 5.** Free energy graphs:  $a, \delta - \varepsilon_{ij}^e = -0.002$ ;  $\epsilon, \varepsilon - \varepsilon_{ij}^e = -0.0022$ ;  $a, \epsilon - \bar{\mu}_g = -25$   $\text{MJ/m}^2$ ;  $\delta, \varepsilon - \bar{\mu}_s = -20$   $\text{MJ/m}^2$