

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

Л.С. Метлов

## ТЕРМОДИНАМИКА СИЛЬНЫХ ВОЗДЕЙСТВИЙ НА ВЕЩЕСТВО

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

Статья поступила в редакцию 13 января 2006 года

*Предложена модель формирования равновесного размера нанозерен при обработке металлов методами интенсивных пластических деформаций (ИПД) с учетом влияния температур. Получены условия формирования предельного размера нанозерен. Из модели следует возможность достижения в процессе обработки аморфного состояния в области либо высоких механических напряжений (высокая скорость деформирования), либо промежуточных напряжений, но с начальным размером нанозерен меньше некоторого критического значения. Приготовление материала с таким размером зерен должно осуществляться методами, отличными от ИПД. Модель показывает, что с понижением температуры предельный размер нанозерен уменьшается. Необходимого размера нанозерен можно добиться как увеличением внешних нагрузок, так и понижением температуры. При низких температурах обычными методами гидроэкструзии можно достигнуть такого же размера нанозерен, как и методами ИПД при высоких температурах.*

### Введение

ИПД – один из перспективных современных методов получения объемных наноматериалов. Фактически, при ИПД за счет внешней работы осуществляется энергетическая накачка образца. Часть энергии, сравнительно небольшая, идет на нагревание образца, но большая часть запасается в виде дополнительных границ и других неоднородностей, влекущих за собой фрагментацию образца.

Известные теории процесса ИПД базируются на механическом подходе и являются достаточно, а может быть и избыточно, детализированными [1]. В то же время имеются отдельные экспериментальные факты и закономерности, которые не удается объяснить в рамках существующих теорий. В настоящее время сложной проблемой теории процессов ИПД является объяснение существования предельного минимального размера зерна или так называемой предельной микроструктуры [2–4]. Данное свойство материала вводится в существующие теории [1] как параметр, задаваемый «руками», а не выводится как ее следствие. Кроме того, в этих теориях не учитывается

влияние на фрагментацию материала при ИПД температуры, при которой протекает процесс. В то же время экспериментально установлено, что снижение температуры при ИПД существенно уменьшает величину предельного размера зерна до такой степени, что того же уровня фрагментации можно добиться, не прибегая к сложным методам ИПД, а в рамках традиционных технологий гидроэкструзии [5].

Все это стимулирует поиск новых подходов к построению теории ИПД, в том числе на базе первых принципов, например термодинамики. В настоящее время ощущается дефицит «грубых» теорий, которые, не вдаваясь в излишние детали, позволили бы понять основные и принципиальные стороны процесса. Ранее был развит вариант термодинамической теории разрушения квазихрупких тел [6–8]. В настоящей работе идеи, развитые там, обобщаются на процессы ИПД, что позволило объяснить упомянутые выше факты.

### 1. Термодинамика разрушения квазихрупких тел

По сути, ИПД является сильно неравновесным процессом, для описания которого было бы уместно прибегнуть к специальному аппарату неравновесной термодинамики (см., напр., [9]). Однако известно, что в отдельных случаях удается исходно неравновесные процессы описать в рамках равновесной термодинамики. Классический пример тому – теория фазовых переходов Ландау. Известно, что для описания неравновесных процессов необходимо задавать большее количество независимых параметров, чем для описания аналогичных равновесных процессов [10]. В теории Ландау дополнительным параметром является параметр порядка [12], в других теориях – так называемые внутренние параметры [13,14]. Введение подобных параметров позволило свести описание неравновесных по сути процессов к описанию их как равновесных.

На первой стадии исследования плотность дефектов  $h$  или средняя энергия дефекта  $\phi$  (параметры порядка) рассматривались как внешние, и для них записывалось основное соотношение термодинамики

$$du = \sigma_{ij} d\varepsilon_{ij}^e + Tds + \phi dh, \quad (1)$$

где  $u$  – плотность внутренней энергии,  $J/m^3$ ;  $T$  – температура, К;  $s$  – плотность энтропии,  $J/(K \cdot m^3)$ ;  $\sigma_{ij}$  – тензор напряжений,  $N/m^2$ ;  $\varepsilon_{ij}^e$  – упругая часть тензора деформаций.

Соотношение (1) означает, что при всех прочих в термодинамическом отношении одинаковых параметрах системы ее внутренняя энергия будет увеличиваться, если число дефектов будет возрастать. Энергия дефекта при этом остается постоянной, и ее значение определяется внутренними процессами, поддерживающими систему в равновесном состоянии. Число же дефектов в данном случае не может изменяться за счет внутренних процессов, а обусловлено их притоком от внешних источников.

Следует отметить, что в выражении (1) два последних слагаемых одинаковы по конструкции. Дефекты безвозвратно ответвляют часть энергии от работы внешних сил, препятствуя последней переходить в тепло, как этого требуют законы термодинамики. В связи с этим  $\varphi$  можно трактовать как среднюю энергию, приходящуюся на один дефект [8]. Дополнительная внутренняя энергия, связанная с появлением отдельного дефекта, пропорциональна его размерам, а увеличение этой энергии равносильно увеличению среднего размера дефекта. Дополнительная энергия обусловлена прямым разрывом связей, формированием свободных поверхностей, перестройкой атомарной структуры в окрестности дефекта и т.д.

Осуществляя преобразование Лежандра внутренней энергии по переменным  $T, s$  [10,11] и  $\varphi, h$ , получим выражение для дифференциала свободной энергии:

$$df = \sigma_{ij} d\varepsilon_{ij}^e - sdT - hd\varphi. \quad (2)$$

Этот прием позволяет определить свободную энергию как для равновесного процесса, построить ее график, и только потом рассматривать смену состояний вдоль точек этого графика как неравновесный процесс.

Свободная энергия тем выше, чем больше выполнена работа внешних сил  $\sigma_{ij} d\varepsilon_{ij}^e$  и чем больше способны отдать свою энергию тепловое движение при охлаждении  $dT < 0$  и дефекты при залечивании  $d\varphi < 0$ . При этом само количество дефектов не изменяется (или изменяется очень медленно).

В предположении наличия внешнего резервуара дефектов, который поддерживал бы их плотность на постоянном уровне, свободная энергия является полным дифференциалом в переменных  $T, \varepsilon_{ij}^e$  и  $\varphi_k$ , а дуальные им термодинамические переменные будут равны:

$$s = -\frac{\partial f}{\partial T}, \quad \sigma_{ij} = \frac{\partial f}{\partial \varepsilon_{ij}^e}, \quad h = -\frac{\partial f}{\partial \varphi}. \quad (3)$$

В частном случае изотермических процессов справедливо

$$df = \sigma_{ij} d\varepsilon_{ij}^e - hd\varphi. \quad (4)$$

Следует отметить, что в духе основного закона термодинамики (1) соотношения (3) описывают внешние воздействия на систему. Если, например, движение дефектов через границы системы, необходимое для поддержания равновесного состояния, отсутствует, то указанный в (3) параметр  $h$  следует считать внутренним, и тогда он будет медленно релаксировать к некоторому стационарному значению, определяемому минимумом свободной энергии из условия [12,15]:

$$\frac{\partial f}{\partial \varphi} = 0. \quad (5)$$

Поскольку определение явного вида для плотности свободной энергии является трудноразрешимой задачей, применим стандартный в таких случаях прием – разложение свободной энергии в ряд по ее аргументам, вплоть до кубических слагаемых [7,8]:

$$f(\varepsilon_{ij}, \varphi) = f_0 - h_0 \varphi + \frac{1}{2} a \varphi^2 - \frac{1}{3} b \varphi^3 + \frac{1}{2} \lambda (\varepsilon_{ii}^e)^2 + \mu (\varepsilon_{ij}^e)^2 - g \varphi \varepsilon_{ii}^e - \frac{1}{2} \bar{\lambda} \varphi (\varepsilon_{ii}^e)^2 - \bar{\mu} \varphi (\varepsilon_{ij}^e)^2 + e \varphi^2 \varepsilon_{ii}^e + \dots \quad (6)$$

Соответствующие ему уравнения состояния, следующие из (3), имеют вид

$$h = h_0 - a \varphi + b \varphi^2 + g \varepsilon_{ii}^e + \frac{1}{2} \bar{\lambda} (\varepsilon_{ii}^e)^2 + \bar{\mu} (\varepsilon_{ij}^e)^2 - 2e \varphi \varepsilon_{ii}^e + \dots, \quad (7)$$

$$\sigma_{ij} = \lambda \varepsilon_{ii}^e \delta_{ij} + 2\mu \varepsilon_{ij}^e - g \varphi \delta_{ij} - \bar{\lambda} \varphi \varepsilon_{ii}^e \delta_{ij} - 2\bar{\mu} \varphi \varepsilon_{ij}^e + e \varphi^2 \delta_{ij} + \dots$$

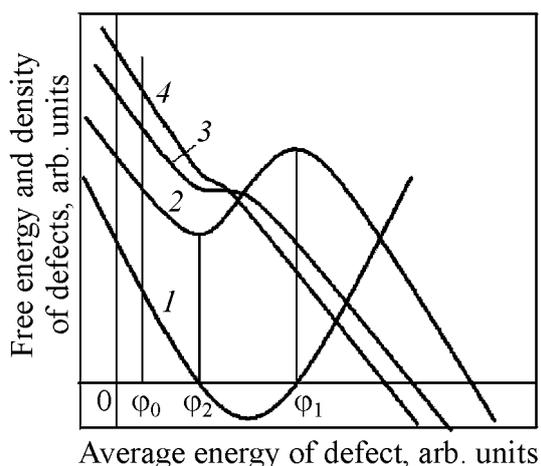
Здесь постоянная  $h_0$  – плотность микротрещин, для которой значение средней энергии микротрещины  $\varphi$  в свободном состоянии формально равно нулю. Постоянная  $a$  характеризует уменьшение энергии  $\varphi$  в поле других микротрещин (в материале, эффективно ослабленном другими микротрещинами). Поэтому она имеет противоположный знак относительно постоянной  $h_0$ . Постоянная  $b$  отвечает за разрушение материала, при котором происходит существенное увеличение размеров дефектов за счет их слияния и увеличение их количества. Знак минус указывает на то, что энергия, запасенная микротрещинами, оказывается потерянной для совершения работы. Кроме того, такой выбор знака обеспечивает естественную возможность описать разрушение материала при больших значениях средней энергии дефекта  $\varphi$ . Параметр  $g$  отвечает за влияние внешних механических напряжений на образование микротрещин – при всесторонне сжимающих напряжениях  $\varepsilon_{ij}^e < 0$  он вызывает уменьшение продуцирования микротрещин  $h$ , при всестороннем растяжении – наоборот, их увеличение. Параметры  $\bar{\lambda}$  и  $\bar{\mu}$  (в отличие от  $g$ ) всегда приводят к росту дефектности материала при всестороннем растяжении и сжатии, а также сдвиговом нагружении.

Если объединить слагаемые, стоящие при одинаковых степенях  $\varphi$ , то эффективные константы теории будут

$$h_0^* = h_0 + g \varepsilon_{ii}^e + \frac{1}{2} \bar{\lambda} (\varepsilon_{ii}^e)^2 + \bar{\mu} (\varepsilon_{ij}^e)^2, \quad (8)$$

$$a^* = a + 2e \varepsilon_{ii}^e.$$

График свободной энергии в данном приближении представляет собой кубическую параболу (рис. 1). В зависимости от знака детерминанта  $D = (a^*)^2 + 4b(h - h_0^*)$  возможны три формы кубической параболы – с двумя экстремумами (кривая 2), с точкой перегиба (кривая 3) и монотонно спа-



**Рис. 1.** Схематическое изображение зависимости плотности дефектов и свободной энергии от средней энергии дефектов: 1 – уравнение состояния  $h = h(\phi)$  (см. уравнение (7)); 2 – парабола с двумя экстремумами; 3 – с точкой перегиба; 4 – ниспадающая

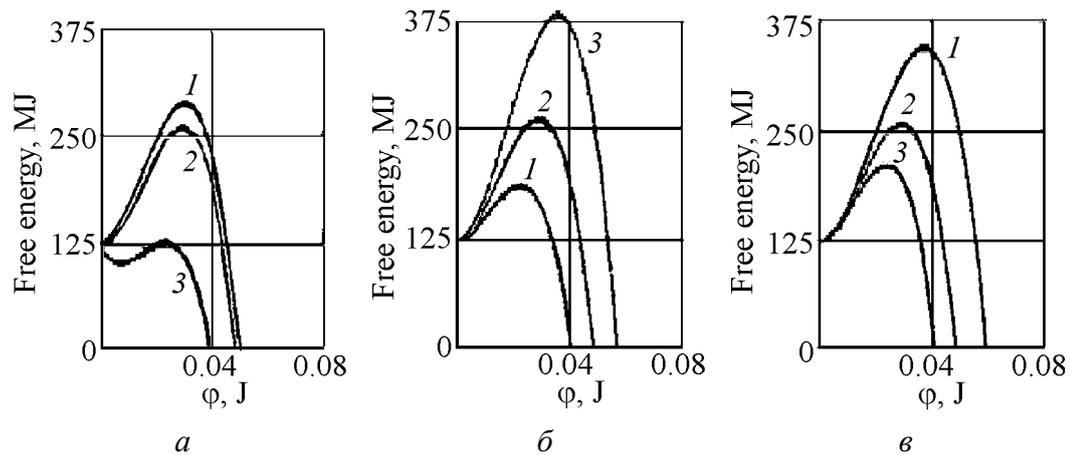
непрерывный переход системы от одной ветви к другой. Для свободной энергии, описываемой кривой 3, график уравнения состояния будет касаться оси абсцисс, а для описываемой кривой 4 будет лежать над нею. При этом во всех случаях с ростом средней энергии дефекта плотность дефектов сначала уменьшается, а затем увеличивается. Это означает, что благодаря внутренним процессам материал в таком напряженном состоянии (при заданном  $\varepsilon_{ij}^e$ ) сначала стремится консолидироваться, и только затем разуплотниться и разрушиться. Наличие щели для свободной энергии (рис. 1, кривая 2) приведет к тому, что переход от процесса консолидации к стадии разрушения не может быть осуществлен только за счет внутренних процессов. В этом случае материал будет устойчив и не будет разрушаться в течение неограниченного времени.

Левый экстремум свободной энергии (рис. 1, кривая 2) представляет собой минимум, и соответствующее ему состояние является устойчивым. Правый экстремум представляет собой максимум, и соответствующее ему состояние является неустойчивым, провоцирующим разрушение материала. Разница энергии в этих двух состояниях представляет собой энергетическую щель или энергетический барьер. Наличие такого барьера является предпосылкой для длительной устойчивости материала и выполненных из него конструкций. При переходе материала в напряженное состояние, которое описывается свободной энергией (рис. 1, кривые 3, 4), потенциальный барьер исчезает, и материал находится в состоянии медленного разрушения – типа крипа, что приводит, в конечном итоге, к его макроскопическому разрушению.

дающая (кривая 4). Какой из этих типов будет реализован в конкретном случае, зависит от соотношения параметров материала и от величины и характера напряженного состояния (значения тензора  $\varepsilon_{ij}^e$ ). Видно, что экстремумы свободной энергии при таком рассмотрении соответствуют нулевым значениям плотности дефектов, т.е. с точки зрения механики – сплошному бездефектному телу. Плотность дефектов между экстремумами согласно рис. 1 является отрицательной, что противоречит физическому смыслу. Благодаря этому между правой и левой ветвями свободной энергии в данном случае существует своего рода щель, запрещающая

Выберем для численных оценок в качестве набора базовых параметров модели следующие их значения:  $f_0 = 2 \cdot 10^8 \text{ J} \cdot \text{m}^{-3}$ ,  $h_0 = 10^9 \text{ m}^{-3}$ ,  $a = 1.1 \cdot 10^{12} \text{ J}^{-1} \cdot \text{m}^{-3}$ ,  $b = 0.35 \cdot 10^{-14} \text{ J}^{-2} \cdot \text{m}^{-3}$ ,  $\lambda = \mu = 0.208 \cdot 10^{11} \text{ Pa}$ ,  $g = 1.5 \cdot 10^{11} \text{ m}^{-3}$ ,  $\bar{\lambda} = 0$ ,  $\bar{\mu} = 3.5 \cdot 10^{14} \text{ m}^{-3}$ ,  $e = 5.6 \cdot 10^{10} \text{ J}^{-1} \cdot \text{m}^{-3}$ . Значения компонентов тензора деформации во всех расчетах, если не оговорено иное, полагались постоянными и равными  $\varepsilon_{11}^e = \varepsilon_{22}^e = \varepsilon_{33}^e = 0.001$ , что соответствует всестороннему растяжению материала.

Изменения формы свободной энергии и высоты потенциального барьера от вариаций параметров модели проиллюстрированы на рис. 2. Уменьшение параметра  $h_0$  по сравнению с базовым значением увеличивает высоту потенциального барьера (кривая 1 на рис. 2,а), что равносильно повышению прочности материала. Это не противоречит известным представлениям, – чем меньше изначально нарушен материал, тем он прочнее. Изменение же параметра  $h_0$  на ту же самую величину в сторону увеличения приводит к более резкому уменьшению высоты потенциального барьера (кривая 3, рис. 2,а) и, соответственно, его прочности. Последнее свидетельствует о высокой чувствительности материала к его микроскопической нарушенности.



**Рис. 2.** Зависимость свободной энергии от средней избыточной энергии дефекта при вариациях параметров  $h_0$  (а),  $a$  (б),  $b$  (в) в сторону их уменьшения (кривые 1) и увеличения (кривые 3); 2 – базовые параметры

Следует отметить, что минимум свободной энергии при большем начальном микроскопическом разрушении (кривая 3, рис. 2,а) заметно сместился в сторону больших значений. Это означает, что в микроскопически более разрушенном материале в термодинамическом плане более выгодными являются состояния с большими средними энергиями микротрещин. Поскольку большей энергией обладают дефекты большего размера, потерю устойчивости материала можно связать с достижением микротрещинами некоторых критических размеров или их критических средних энергий.

Меньшие значения параметра  $a$  (кривая 1, рис. 2,б), наоборот, приводят к снижению потенциального барьера и описывают материалы с меньшей

прочностью, а его большие значения (рис. 2,б, кривая 3) описывают материалы с более высокой прочностью. Это можно объяснить тем, что снижение эффективных параметров материала при увеличении параметра  $a$ , учитывающего взаимодействие микротрещин со своим окружением, приводит к росту адаптационных возможностей различных частей материала, снижению концентрации внутренних напряжений, что и приводит к повышению его устойчивости.

Влияние параметра  $b$  на устойчивость внешне такое же, как и параметра  $h_0$  (сравни рис. 2,а и в). То есть с его уменьшением устойчивость повышается (кривая 1, рис. 2,в), а с ростом – снижается (кривая 3, рис. 2,в). Однако влияние параметра  $b$  осуществляется по другому механизму. А именно, с его ростом в большей степени стимулируются процессы слияния старых и генерации новых микротрещин, что и приводит к снижению прочности материала.

Если согласно (8) в выражении  $h_0^*$  ограничиться только линейным слагаемым по обратимым деформациям, пропорциональным  $\varepsilon_{ii}^e$ , то при растяжении  $\varepsilon_{ii}^e > 0$ , и с ростом уровня обратимых деформаций устойчивость снижается (рис. 2,а). При сжатии, наоборот,  $\varepsilon_{ii}^e < 0$ , и с ростом деформаций устойчивость возрастает, что согласуется с повседневным опытом. Последние два слагаемые в выражении  $h_0^*$  квадратичны по деформациям. Это значит, что при положительных значениях параметров  $\bar{\lambda}$  и  $\bar{\mu}$  устойчивость материала уменьшается в случае как растяжения, так и сжатия. При этом логично предположить, что  $\bar{\lambda} \ll \bar{\mu}$ , т.е. сдвиговые деформации играют основную роль в разрушении материала.

Представленную здесь теорию можно применить для качественного объяснения смены различных механизмов разрушения квазихрупких тел. Согласно кинетической теории Журкова [16–18] время ожидания до разрушения зависит от приложенного внешнего напряжения в экспоненциальной зависимости. Этот закон выполняется для большинства материалов самой различной природы (металлов, керамик, горных пород и т.д.), в самом широком диапазоне нагрузок. В то же время в области малых нагрузок кривая зависимости долговечности (прочности) от приложенного напряжения заламывается вверх в область больших времен долговечности [18]. Такая особенность естественно объясняется в рамках предложенной теории. При достаточно больших нагрузках кривая свободной энергии имеет ниспадающий характер, т.е. описывается кривой 4 на рис. 1, которая не имеет равновесного положения. Под действием такого напряжения твердое тело находится в режиме накопления микротрещин, что завершается, в конечном итоге, его разрушением по экспоненциальному закону. При малых же нагрузках кривая свободной энергии переходит в форму, имеющую один минимум. Наличие равновесного положения в этом случае приводит к тому, что система, попав в

него, будет находиться в нем неограниченно долго по сравнению с предыдущим случаем. Это и вызывает залом кривой прочности (или долговечности).

Интересно применение этой особенности для объяснения феномена, принадлежащего иной научной области, а именно, различия устойчивости горных выработок на больших и малых глубинах. Горные породы – это один из примеров типичных квазихрупких твердых тел, для описания которых также применима развитая здесь теория. Известно, что технологические выработки, проведенные на небольших глубинах, обладают достаточно высокой степенью устойчивости. Вокруг таких же выработок на больших глубинах наблюдаются явления аномально больших смещений горных пород внутрь свободного пространства, что вызывает быстрое уменьшение сечения выработки и, в конце концов, ее полное разрушение [10]. Согласно теории при малых значениях тензора деформации  $\varepsilon_{ij}$ , т.е. при малых глубинах (оценки приведены ниже) для горных пород, окружающих выработку, будет выполняться условие существования равновесного состояния (случай  $D < 0$ ), которое описывается свободной энергией с одним минимумом (кривая 2 на рис. 1). При увеличении сдвиговых деформаций (объемная деформация в упругом приближении равна нулю), т.е. при больших глубинах, характер зависимости свободной энергии изменится, и она будет описываться уже кривой, не имеющей экстремумов (кривая 3 на рис. 1). В этом случае система не имеет равновесных состояний (при  $D > 0$ ) и, значит, будет постоянно разрушаться.

Следовательно, введение в основное соотношение (5) термодинамики таких внутренних параметров, как средняя дополнительная энергия, приходящаяся на один дефект, и плотности дефектов, позволило придать физическое содержание, казалось бы, чисто механической задаче разрушения материала и применить для анализа неравновесных процессов стандартные методы равновесной термодинамики.

## 2. Термодинамика интенсивной пластической деформации

Следует отметить, что разрушение квазихрупких материалов под действием длительных нагрузений (например, горные породы вокруг выработок на больших глубинах) выглядит более-менее обоснованным, поскольку эти процессы медленные (времена релаксации порядка нескольких месяцев) и, следовательно, квазиравновесные. В случае ИПД мы имеем дело, казалось бы, с противоположным асимптотическим пределом, а именно, с относительно быстро протекающими процессами (время одного цикла ИПД порядка секунды). Применимость методов равновесной термодинамики не очевидна и требует дополнительных пояснений или предположений.

Будем полагать, что процесс является стационарным, а возникающие сильно неравновесные потоки сбалансированы так, что они замкнуты сами на себя и слабо влияют на протекание остальных квазиравновесных процессов. Чтобы для квазиравновесных процессов, протекающих при ИПД, были

справедливы принципы равновесной термодинамики в приближении разреженного газа, следует показать, что частицы системы не взаимодействуют или, в крайнем случае, слабо взаимодействуют между собой. Если частицами системы в данном приближении рассматривать зерна металлической системы, то сильным взаимодействием частиц следует считать процессы, при которых происходит дробление зерен. Слабыми же взаимодействиями будем полагать процессы, при которых дробление зерен отсутствует или существенно замедляется. Тогда для режима ИПД, при котором достигается предельный размер нанозерна, перейдем в область слабого взаимодействия. Именно для описания эффекта достижения предельного размера зерна будут справедливы принципы равновесной термодинамики.

Выберем в качестве характеристики системы поверхностную плотность избыточной энергии границ  $\phi$ . Величина  $h$  имеет формальное значение параметра минимизации свободной энергии. Ее меру в стационарном состоянии можно определить как объемную плотность суммарной поверхности границ зерен. Связь параметра  $h$  со средним размером зерен зависит от формы последних. Полагая для простоты, что зерна имеют форму куба, для оценки его линейного размера  $l$  получим простое выражение  $l = 3/h$ . В соответствии с этим переопределяются и другие параметры приведенной в предыдущем разделе теории. Ограничиваясь, как и там, кубическим разложением свободной энергии и учитывая дополнительно температурную зависимость, получим три вида кривых кубической параболы (см. рис. 1).

С учетом температурного вклада свободная энергия будет иметь вид

$$f(\varepsilon_{ij}, \phi) = f_0 - h_0 \phi + \frac{1}{2} a \phi^2 - \frac{1}{3} b \phi^3 + \frac{1}{2} \lambda (\varepsilon_{ii}^e)^2 + \mu (\varepsilon_{ij}^e)^2 - g \phi \varepsilon_{ii}^e - \frac{1}{2} \bar{\lambda} \phi (\varepsilon_{ii}^e)^2 - \bar{\mu} \phi (\varepsilon_{ij}^e)^2 + e \phi^2 \varepsilon_{ii}^e + \alpha \phi T + \alpha_g \phi T \varepsilon_{ii}^e \dots \quad (9)$$

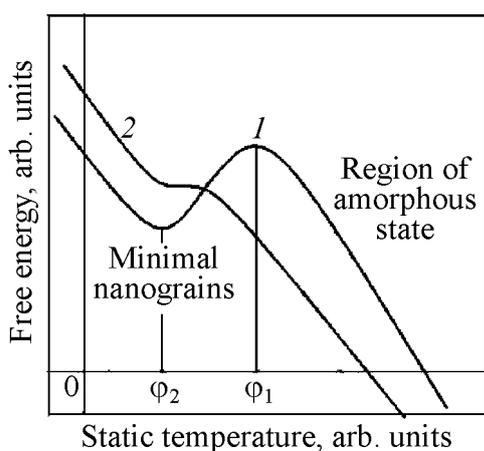


Рис. 3. Варианты режимов ИПД при различных нагрузках и температурах

Здесь дополнительные температурные слагаемые учитывают только линейные по  $\phi$  вклады.

Согласно принятым здесь определениям передвижение по графикам (рис. 3) в область высоких значений  $\phi$  равносильно формированию более мелких зерен. Движение вдоль ниспадающих ветвей графиков приводит к бесконечно мелкому зерну, что можно рассматривать как переход к аморфному состоянию. При промежуточных по величине внешних механических нагрузках (при малых нагрузках не реализуется пластическое течение)

система нанозерен имеет некоторое равновесное значение размера (кривая 1 на рис. 3), к которому оно стремится в процессе ИПД. Как правило, начальные размеры зерен велики, и в реальном процессе подход к минимуму осуществляется с правой части графика от малых значений  $\varphi$ . При приближении к точке минимума свободной энергии скорость дробления зерна замедляется. Если какой-то иной технологией добиться размера зерен меньшего, чем минимальное значение для данного нагружения, то движение по графику будет осуществляться в противоположном направлении, т.е. размер зерна в процессе ИПД будет расти.

При увеличении внешней механической нагрузки, что равносильно увеличению скорости деформирования, кривая 1 на рис. 3 будет постепенно переходить в кривую 2, которая не имеет минимума в конечной области. В этом случае материал будет «фрагментироваться» до атомарных размеров, что равносильно переходу к аморфному состоянию. При этом для его осуществления необходимо значительно увеличивать скорость деформирования материала настолько, чтобы, несмотря на высокую степень диссипации энергии в неравновесной подсистеме, остаточной энергии хватило для дробления самих зерен в квазиравновесной подсистеме. Вполне возможно, что не для всех материалов существует такой переход, поскольку он зависит от взаимоотношения равновесной и неравновесной подсистем, что выходит за пределы постулатов данной упрощенной модели.

Следует отметить, что для описания режима аморфизации материала важное значение имеет наличие кубического вклада по  $\varphi$ . Если константой  $b$  в выражении для свободной энергии пренебречь, то режимы аморфизации при промежуточных механических нагрузках исчезнут. При высоких нагрузках они могут возникнуть при обращении знака квадратной параболы, которая при определенной нагрузке повернется вершиной вверх (опрокинется).

Влияние температуры при ИПД учитывается перенормировкой постоянной теории, в данном приближении перенормировкой постоянной  $h_0$ . Понижение температур будет приводить к росту последней и, как уже было показано в предыдущем подразделе, к смещению вправо положения минимума свободной энергии по оси  $\varphi$ , что означает формирование в процессе ИПД более мелких зерен. Таким образом, согласно данной модели можно утверждать, что понижение температуры будет приводить к формированию при ИПД более мелкого зерна при меньших внешних механических нагрузках. Это означает, что такого же измельчения зерен можно добиться в рамках классических методов гидроэкструзии, не прибегая к современным вариантам методов ИПД [5].

### Заключение

Таким образом, предложена термодинамическая модель фрагментации материала при обработке металлов методами ИПД. За счет выделения двух

подсистем удалось разделить неравновесные и квазиравновесные процессы при ИПД и для описания последних применить методы равновесной термодинамики. В рамках модели показана принципиальная возможность описания формирования предельного размера нанозерен и указаны возможные основные режимы обработки ИПД, а также способы управления процессом формирования нанозерен нужного масштаба. Установлено, что с понижением температуры размер зерен при ИПД уменьшается. Теория предсказывает возможность достижения в процессе ИПД аморфного состояния и указывает, какими свойствами должен обладать материал для наиболее легкого достижения аморфного состояния. Предложены пути дальнейшего обобщения модели.

1. *Ya. Beigelzimer*, *Mechanics of Materials* **37**, 753 (2005).
2. *Я.Е. Бельгейзимер, В.Н. Варюхин, Д.В. Орлов, С.Г. Сынков*, Винтовая экструзия – процесс накопления деформаций, ТЕАН, Донецк (2003).
3. *В.И. Копылов, В.Н. Чувильдеев*, *Металлы* № 1, 22 (2004).
4. *В.Н. Чувильдеев, В.И. Копылов, А.В. Нохрин, И.М. Макаров, Ю.Г. Лопатин*, Доклады РАН **396**, 332 (2004).
5. *П.А. Хаймович*, Наноструктурирование монолитных металлов. Структурные основы модификации материалов методами нетрадиционных технологий, Тезисы докладов МНТ-VIII, Обнинск, 14–18 июня 2005.
6. *Л.С. Метлов, А.Ф. Морозов*, *ФТВД* **7**, № 3, 58 (1997).
7. *P. Van, B. Vasarhelyi*, in: *Rock Mechanics in the National Interest*, D. Elsworth, J.P. Tinucci, K.A. Heasley (eds.), A.A. Balkema publishers, Liss–Abindon–Exton(РА)–Tokio (2001), V. 1, p. 767–773.
8. *L.S. Metlov*, <http://arxiv.org/abs/cond-mat/0204361>, (1, print 17 Apr 2002).
9. *И. Дьярмати*, Неравновесная термодинамика. Теория поля и вариационные принципы, Мир, Москва (1974).
10. *К.А. Путилов*, Термодинамика, Наука, Москва (1971).
11. *И.П. Базаров*, Термодинамика, Высшая школа, Москва (1991).
12. *Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц*, Теоретическая физика, Т. 5. Статистическая физика, Наука, Москва (1964).
13. *B.D. Coeman, M.E. Gurti*, *J. Chem. Phys.* **47**, 597 (1967).
14. *Н. Петров, Й. Бранк*, Современные проблемы термодинамики, Мир, Москва (1986).
15. *Ю.М. Иванченко, А.А. Лисянский, А.Э. Филиппов*, Флуктуационные эффекты в системах с конкурирующими взаимодействиями, Наукова думка, Киев (1989).
16. *С.Н. Журков*, Вестник АН СССР № 3, 46 (1968).
17. *В.Р. Регель, А.И. Слуцкер, Э.Е. Томашевский*, Кинетическая природа прочности твердых тел, Наука, Москва (1974).
18. *В.А. Берштейн*, Механогидролитические процессы и прочность твердых тел, Наука, Ленинград (1987).

*L.S. Metlov*

## THERMODYNAMICS OF SEVERE INFLUENCES ON A SUBSTANCE

A model is proposed for the formation of nanograin equilibrium size during metal processing by methods of severe plastic deformation (SPD) with temperature effect taken into account. Conditions for the formation of nanograin size limit have been obtained. It follows that during the processing the amorphous state can be attained in the region of either high mechanical stresses (high deformation velocity) or intermediate stresses, where the nanograin initial size is smaller than some critical value. Such a material should be prepared by methods other than the SPD. The model shows that the nanograin size limit decreases with temperature decrease. Nanograins of a required size can be got by both higher external loads and temperature decrease. Under the low-temperature conditions, conventional hydroextrusion can give the nanograin size identical to that resulting from SPD methods used at high temperatures.

**Fig. 1.** Schematic of the density of defects and free energy as functions of the average density of defects: 1 – equation of state  $h = h(\varphi)$  (see Eq. (7)); 2 – parabola with two extremums; 3 – with a bend point; 4 – descending

**Fig. 2.** Free energy as a function of average excess energy of the defect for parameters  $h_0$  (a),  $a$  (б),  $b$  (в) varied (curves 1 – decreasing, curves 3 – increasing); 2 – basic parameters

**Fig. 3.** Version of SPD regimes for different loads and temperatures