

**ФУНДАМЕНТАЛЬНЫЕ
ПРОБЛЕМЫ
СОВРЕМЕННОГО
МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЯ**

Научный журнал
Издается с января 2004 г.

Том 21

Июнь 2024 г.

№ 2

Фундаментальные проблемы современного материаловедения

том 21 №2 2024 г.

Международный специализированный научный журнал
Выходит ежеквартально
Издается с января 2004 года

Учредитель:

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова»

Соучредители:

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Алтайский государственный педагогический университет»

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Сибирский государственный индустриальный университет»

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Томский государственный архитектурно-строительный университет»

Издатель:

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова»

Адрес издателя: 656038, Алтайский край, г. Барнаул, пр-т Ленина, д. 46

Главный редактор: д.ф.-м.н., профессор Старостенков М.Д.

Тел.: +7 (385) 229-08-52 Факс: +7 (385) 236-78-64

E-mail: genphys@mail.ru

Зам. главного редактора (ответственный за выпуск): д.т.н., профессор Гурьев А.М.

Тел.: +7 (385) 229-08-63 Факс: +7 (385) 236-78-64

E-mail: gurievam@mail.ru

Зам. главного редактора (ответственный за online выпуск): к.ф.-м.н., доцент Черных Е.В.

Тел.: +7 (385) 229-08-52 Факс: +7 (385) 236-78-64


E-mail: jane_5@mail.ru

Технический редактор: к.ф.-м.н., доцент Черных Е.В.

Тел.: +7 (385) 229-08-52 Факс: +7 (385) 236-78-64

E-mail: jane_5@mail.ru

Журнал включен в Перечень ВАК ведущих российских рецензируемых научных журналов и изданий, в которых должны быть опубликованы основные научные результаты диссертаций на соискание ученых степеней доктора и кандидата наук (редакция от 01.02.2022 г.).

Журнал включен в каталог периодических изданий Ульрих  от 18.02.2015 г., в перечень журналов, вошедших в ядро РИНЦ и в список 650 российских журналов, вошедших в Russian Science Citation Index (RSCI), представленный на платформе Web of Science.

Журнал зарегистрирован в Федеральной службе по надзору в сфере связи, информационных технологий и массовых коммуникаций.

Регистрационный номер: ПИ № ФС77-75026 от 01.02.2019 г.

Информация о подписке:

«Фундаментальные проблемы современного материаловедения» выходит раз в квартал. Индекс в каталоге ООО «Урал-Пресс» – 31038.

Цена годовой подписки через редакцию: 1600 руб. (400 руб. за номер).

Адрес редакции: 656038, Алтайский край, г. Барнаул, пр-т Ленина, д. 46

Тел./факс (3852) 29-08-52

E-mail: genphys@mail.ru

Адрес в Internet: <https://ojs.altstu.ru/index.php/fpsm>

Редакционная коллегия:

- Старостенков М.Д.** (д.ф.-м.н., профессор, главный научный сотрудник АлтГТУ, г. Барнаул, Россия)
- Громов В.Е.** (д.ф.-м.н., профессор, зав. кафедрой физики СибГИУ, г. Новокузнецк, Россия)
- Гурьев А.М.** (д.т.н., профессор, зав. кафедрой начертательной геометрии и графики АлтГТУ, г. Барнаул, Россия)
- Иванов С.Г.** (д.т.н., ведущий научный сотрудник АлтГТУ, г. Барнаул, Россия)
- Кашенко М.П.** (д.ф.-м.н., профессор, зав. кафедрой общей физики УГЛТУ, г. Екатеринбург, Россия)
- Кхаре А.** (профессор, Индийский институт науки образования и исследований, г. Пуна, Индия)
- Мулюков Р.Р.** (член корр. РАН, д.ф.-м.н., профессор, директор ИПСМ РАН, г. Уфа, Россия)
- Мэй Шунчи** (профессор, декан УТУ, г. Ухань, Китай)
- Коновалов С.В.** (д.т.н., профессор, проректор по научной и инновационной деятельности СибГИУ, г. Новокузнецк, Россия)
- Плотников В.А.** (д.ф.-м.н., профессор, зав. кафедрой общей и экспериментальной физики АлтГУ, г. Барнаул, Россия)
- Потекаев А.И.** (д.ф.-м.н., профессор, директор СФТИ, главный редактор журнала «Известия вузов. Физика», г. Томск, Россия)
- Пышноград Г.В.** (д.ф.-м.н., профессор АлтГТУ, г. Барнаул, Россия)
- Рубаник В.В.** (д.т.н., член-корреспондент Национальной академии наук Беларуси, директор ГНУ "ИТА НАН Беларуси", г. Витебск, Беларусь)
- Старенченко В.А.** (д.ф.-м.н., профессор, декан общеобразовательного факультета ТГАСУ, г. Томск, Россия)
- Семенов А.С.** (д.ф.-м.н., директор Политехнического института (филиал) Северо-Восточного федерального университета им. М.К. Аммосова в г. Мирном, Россия)
- Лыгденов Б.Д.** (д.т.н., профессор ВСГУТУ, г. Улан-Удэ, Россия)
- Дмитриев С.В.** (д.ф.-м.н., доцент, зав. лабораторией ИПСМ РАН, г. Уфа, Россия)
- Атучин В.В.** (к.ф.-м.н., доцент, руководитель лаборатории «Оптические материалы и структуры» ИФП СО РАН, г. Новосибирск, Россия)

Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedenia (Basic Problems of Material Science (BPMS) Vol. 21 No.2 (2024))

International specialized scientific journal
Issued quarterly
Published since January 2004

Founders:

Federal State Budget Educational Institution of Higher Education «Polzunov Altai State Technical University»
Federal State Budget Educational Institution of Higher Education «Altai State Pedagogical University»
Federal State Budget Educational Institution of Higher Education «Siberian State Industrial University»
Federal State Budget Educational Institution of Higher Education «Tomsk State University of Architecture and Building»

Publisher:

Federal State Budget Educational Institution of Higher Education «Polzunov Altai State Technical University»
Lenin Pr., 46, Barnaul, 656038, Russia

Editor in chief

PhD, Hab., Professor Starostenkov M.D.

Tel.: +7 (385) 229-08-52 Fax: +7 (385) 236-78-64
E-mail: genphys@mail.ru

Sub-Editors

PhD, Hab., Professor Guriev A.M.

Тел.: +7 (385) 229-08-63 Fax: +7 (385) 236-78-64
E-mail: gurievam@mail.ru

PhD Chernykh E.V.

Тел.: +7 (385) 229-08-52 Fax: +7 (385) 236-78-64
E-mail: jane_5@mail.ru

Editorial board:

Starostenkov M.D., PhD, Hab., Professor, Chief Researcher, I.I. Polzunov Altai State Technical University, Barnaul, Russia
Gromov V.E., PhD, Hab., Professor, Head of Department, Siberian State Industrial University, Novokuznetsk, Russia
Guriev A.M., PhD, Hab., Professor, Head of Department, I.I. Polzunov Altai State Technical University, Barnaul, Russia
Ivanov S.G., PhD, Hab., Chief Researcher, I.I. Polzunov Altai State Technical University, Barnaul, Russia
Kaschenko M.P., PhD, Hab., Professor, Head of Department, Ural State Forest Engineering University, Yekaterinburg, Russia
Khare A., PhD, Hab., Professor, Indian Institute of Science Education and Research, Pune, India
Mulyukov R.R., member corr. of RAS, PhD, Hab., Professor, director, Institute for Metals Superplasticity Problems of RAS, Ufa, Russia
Mei Shunqi, Professor, Dean, Wuhan Textile University, Wuhan, China
Konovalov S.V., PhD, Hab., Professor, Vice-Rector for Research and Innovation Activities, Siberian State Industrial University, Novokuznetsk, Russia
Plotnikov V.A., PhD, Hab., Professor, Head of Department, Altai State University, Barnaul, Russia
Potekaev A.I., PhD, Hab., Professor, Director, V.D. Kuznetsov's Siberian Physical-Technical Institute, Tomsk, Russia
Pyshnograi G.V., PhD, Hab., Professor, I.I. Polzunov Altai State Technical University, Barnaul, Russia
Rubanik V.V., PhD, Hab., Corresponding Member of the National Academy of Sciences of Belarus, director of the State Scientific Institution «Institute of Technical Acoustics National Academy of Sciences of Belarus», Vitebsk, Republic of Belarus
Starenchenko V.A., PhD, Hab., Professor, Dean, Tomsk State University of Architecture and Building, Tomsk, Russia
Semenov A.S., PhD, Hab., Director of the Mirny Polytechnic Institute (branch) of North-Eastern Federal University named after M. K. Ammosov, Russia
Lygdenov B.D., PhD, Hab., Professor, East Siberia State University of Technology and Management, Ulan-Ude, Russia
Dmitriev S.V., PhD, Hab., Institute for Metals Superplasticity Problems of RAS, Ufa, Russia
Atuchin V.V., PhD, Hab., Institute of Semiconductor Physics SB of RAS, Novosibirsk, Russia

Editorial

Polzunov Altai State Technical University, Lenin Pr., 46, Barnaul, 656038, Russia
<https://ojs.altstu.ru/index.php/fpsm>, e-mail: genphys@mail.ru

PhD Chernykh E.V.

Tel.: +7 (385) 229-08-52 Fax: +7 (385) 236-78-64
E-mail: jane_5@mail.ru

СОДЕРЖАНИЕ

РАЗДЕЛ 1. ФИЗИКА КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ

- Ю.Ф. Иванов, В.Е. Громов, О.А. Перегудов, Е.С. Ващук, А.Н. Гостевская*
Структура слоя быстрорежущей стали с азотом, наплавленного на детали металлургического оборудования.....143
- Ю.В. Соловьева, Я.Д. Липатникова, Г.А. Мун, И.Г. Вовнова, В.А. Старенченко, Д.Н. Черепанов*
3D моделирование распределения деформационных дефектов в объеме металлического ГЦК-монокристалла.....153
- А.В. Маркидонов, М.Д. Старостенков, А.Н. Гостевская, Д.А. Лубяной, П.В. Захаров*
Молекулярно-динамическое моделирование образования дислокаций на межфазной границе в железе после воздействия лазерного импульса.....164
- В.А. Плотников, А.В. Гусева, А.С. Грязнов, С.С. Пругов*
Особенности накопления и возврата деформации при многократном циклировании в сплавах с памятью формы.....172
- Н.А. Попова, В.Е. Громов, М.А. Порфирьев, Р.Е. Крюков, Ю.Ф. Иванов, В.В. Шляров, Е.Л. Никоненко*
Влияние различных видов нагружения рельсовой стали на эволюцию тонкой структуры.....179
- И.И. Тувалев, Р.Т. Мурзаев*
Устойчивость и деформационное поведение композита на основе ячеистой структуры: молекулярная динамика.....188
- М.Х. Эгамов*
Вращения плоскости поляризации светового излучения в нематических жидких кристаллах.....199

РАЗДЕЛ 2. МЕТАЛЛОВЕДЕНИЕ И ТЕРМИЧЕСКАЯ ОБРАБОТКА МЕТАЛЛОВ И СПЛАВОВ

- Е.Ю. Классман, Р.Я. Лутфуллин*
Влияние температуры нагрева заготовки перед теплой прокаткой на структуру и свойства титанового сплава BT22.....205
- Чжэн Ц., М.А. Гурьев, Ш. Мэй, Е.В. Черных, Б.Д. Лыгденов, А.М. Гурьев, Е.А. Кошелева*
Исследование влияния термодиффузионного борохромирования на структуру и свойства сталей AISI H12 и ASTM L6.....212

А.А. Бурков, М.А. Кулик, А.Ю. Быцура

Осаждение порошка дисилицида вольфрама на титановый сплав Ti6Al4V методом ЭИЛ.....220

В.В. Ларионов, Е.Н. Степанова, Ю.И. Тюрин

Исследование гидрированного сплава Ti-6Al-4V, подвергнутого механическому воздействию и облучению электронами.....230

М.В. Попова, М.А. Малюх

Тепловое расширение алюминиевых сплавов специального назначения после обработки расплава и термообработки.....239

И.Д. Поспелов, Д.В. Матвеева

Исследование механических свойств стали У10А для производства высокопрочных холоднокатаных лент после циклического отжига и пластической деформации.....247

**С.А. Земляков, М.Н. Зенин, С.Г. Иванов, М.А. Гурьев, Е.В. Черных,
А.М. Гурьев, Д.И. Зюзин**

Оценка влияния режимов термической обработки с использованием отрицательных температур на механические свойства стали ШХ15. Часть II: влияние режимов термообработки на структурно-фазовое состояние и микроструктуру.....254

CONTENTS

SECTION 1. CONDENSED MATTER PHYSICS

<i>Yu.F. Ivanov, V.E. Gromov, O.A. Peregudov, E.S. Vashchuk, A.N. Gostevskaya</i> Structure of a layer of a high-speed steel with nitrogen deposited on the parts of metallurgical equipment.....	143
<i>Yu.V. Solov'eva, Y.D. Lipatnikova, G. A. Mun, I.G. Vovnova, V.A. Starenchenko, D. N. Cherepanov</i> 3D modeling of the deformation defects distribution in the volume of FCC single crystal metals.....	153
<i>A.V. Markidonov, M.D. Starostenkov, A.N. Gostevskaya, D.A. Lubyanyoy, P.V. Zakharov</i> Molecular dynamics simulation of the reduction in porosity of the surface layer of a bcc crystal caused by influence of laser pulses.....	164
<i>V.A. Plotnikov, A.V. Guseva, A.S. Gryaznov, S.S. Prugov</i> Features of accumulation and deformation during multiple cecling in alloys with shape memory.....	172
<i>N.A. Popova, V.E. Gromov, M.A. Porfiriev, R.E. Kryukov, Yu.F. Ivanov, V.V. Shlyarov, E.L. Nikonenko</i> Effect of different types of rail steel loading on the fine structure evolution.....	179
<i>I.I. Tuvalev, R.T. Murzaev</i> Stability and deformation behavior of cellular graphene composite: molecular dynamics.....	188
<i>M.Kh. Egamov</i> Rotation of the plane polarization of light radiation in nematic liquid crystals.....	199
 SECTION 2. METAL SCIENCE AND HEAT TREATMENT OF METALS AND ALLOYS	
<i>E.Yu. Klassman, R.Ya. Lutfullin</i> Effect of heating temperature of the billet before warm rolling on the microstructure and properties of VT22 titanium alloy.....	205
<i>Q. Zheng, M.A. Guryev, S. Mei, E.V. Chernykh, B.D. Lygdenov, A.M. Guryev, E.A. Kosheleva</i> The effect of thermodiffusion borochromizing on the structure and properties of AISI H12 and ASTM L6 steel.....	212

<i>A.A. Burkov, M.A. Kulik, A.Yu. Bytsura</i> Deposition of tungsten disilicide powder on titanium alloy Ti6Al4V by ESD technique.....	220
<i>V.V. Larionov, E.N. Stepanova, Yu.I. Tyurin</i> Study of hydrogenated Ti-6Al-4V alloy subjected to mechanical stress and electron irradiation.....	230
<i>M.V. Popova, M.A. Malyukh</i> Thermal expansion special purpose aluminum alloys after melt treatment and heat treatment.....	239
<i>I.D. Pospelov, D.V. Matveeva</i> Research of the mechanical properties of steel U10A for the production of high-strength cold-rolled strips after cyclic annealing and plastic deformation.....	247
<i>S.A. Zemlyakov, M.N. Zenin, S.G. Ivanov, M.A. Guryev, E.V. Chernykh, A.M. Guryev, D.I. Ziuzin</i> Estimation of the influence of heat treatment modes using negative temperatures on the mechanical properties of ShKh15 steel. Part II: the influence of heat treatment modes on the structural-phase state and microstructure.....	254

РАЗДЕЛ 1. ФИЗИКА КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ

Научная статья

1.3.8. Физика конденсированного состояния (физико-математические науки)

УДК 621.791.92

doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2024.02.001

СТРУКТУРА СЛОЯ БЫСТРОРЕЖУЩЕЙ СТАЛИ С АЗОТОМ, НАПЛАВЛЕННОГО НА ДЕТАЛИ МЕТАЛЛУРГИЧЕСКОГО ОБОРУДОВАНИЯ

Юрий Федорович Иванов¹, Виктор Евгеньевич Громов^{2†}, Олег Александрович Перегудов³,
Екатерина Степановна Вашук⁴, Анастасия Николаевна Гостевская⁵

¹ Институт сильноточной электроники СО РАН, пр. Академический, 2/3, 634055, Томск, Россия

^{2, 5} Сибирский государственный индустриальный университет, ул. Кирова, 42, 654007, Новокузнецк, Россия

³ Омский государственный технический университет, пр. Мира, 11, 644050, Омск, Россия

⁴ Филиал Кузбасского государственного технического университета им. Т.Ф. Горбачева в г. Прокопьевске, ул. Ноградская, 19А, 653039, Прокопьевск, Россия

¹ yufi55@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0001-8022-7958>

² gromov@physics.sibsiu.ru[†], <https://orcid.org/0000-0002-5147-5343>

³ olegomgtu@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0001-5154-5498>

⁴ vaschuk@bk.ru, <https://orcid.org/0000-0002-1345-7419>

⁵ lokon1296@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-7328-5444>

Аннотация. Методами современного физического материаловедения исследована структура, микротвердость и трибологические свойства быстрорежущей стали Р18Ю, легированной азотом и алюминием направленной на валки из среднеуглеродистой стали 30ХГСА. Плазменная наплавка осуществлена в закрытой среде азота порошковой проволокой. Проведен регулируемый термический цикл для получения равномерного состояния и предотвращения формирования холодных трещин. Выявлено, что наплавленный слой имеет структуру ячеисто-дендритного типа. Зерна обогащены атомами железа, а границы разделены тонкими прослойками второй фазы, обогащенными атомами хрома, алюминия, вольфрама и ванадия. Внутри центральной части зерен обнаружены включения игольчатого типа длиной 150–730 нм. Четырехкратный высокотемпературный отпуск при 580 °С в течении 1 часа обеспечивает: растворение наноразмерных включений в объеме зерен; способствует более равномерному распределению легирующих элементов; формирует структуру пластинчатого (игольчатого) типа, характерную по морфологическому признаку для игольчатого мартенсита. Выдвинуто и обосновано предположение, что зерна наплавленного слоя сформированы твердым раствором γ -железа (аустенита). Выявлено незначительное снижение микротвердости, износостойкости и коэффициента трения наплавочного слоя после высокотемпературного отпуска. Такое поведение наплавочного материала при высокотемпературном отпуске может быть обусловлено релаксацией термических напряжений, сформированных в слое при наплавке.

Ключевые слова: способ плазменной наплавки, порошковая проволока, регулируемый термический цикл, быстрорежущие стали, высокотемпературный отпуск, азот, твердость, износостойкость.

Благодарности: Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 23-19-00186, <https://rscf.ru/project/23-19-00186>.

Для цитирования: Иванов Ю.Ф., Громов В.Е., Перегудов О.А., Вашук Е.С., Гостевская А.Н. Структура слоя быстрорежущей стали с азотом, наплавленного на детали металлургического оборудования // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2024. Т. 21, № 2. С. 143–152. doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2024.02.001.

Original article

STRUCTURE OF A LAYER OF A HIGH-SPEED STEEL WITH NITROGEN DEPOSITED ON THE PARTS OF METALLURGICAL EQUIPMENT**Yurii F. Ivanov¹, Viktor E. Gromov^{2†}, Oleg A. Peregudov³, Ekaterina S. Vashchuk⁴, Anastasia N. Gostevskaya⁵**¹Institute of High Current Electronics SB RAS, Academicheskii Pr., 2/3, Tomsk, 634055, Russia^{2,5}Siberian State Industrial University, Kirov Str., 42, Novokuznetsk, 654007, Russia³Omsk State Technical University, Pr. Mira, 11, Omsk, 644050, Russia⁴Branch of the Kuzbass State Technical University named after T.F. Gorbachev in Prokopyevsk, Nogradskaya Str., 19A, Prokopyevsk, 653039, Russia¹yufi55@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0001-8022-7958>²gromov@physics.sibsiu.ru[†], <https://orcid.org/0000-0002-5147-5343>³olegomgtu@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0001-5154-5498>⁴vaschuk@bk.ru, <https://orcid.org/0000-0002-1345-7419>⁵lokoni296@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-7328-5444>

Abstract. The structure, microhardness and tribological properties of high-speed steel R18YU, alloyed with nitrogen and aluminum, aimed at rolls of medium-carbon steel 30HGSA, have been studied by methods of modern physical materials science. Plasma surfacing is carried out in a closed nitrogen medium with a powder wire. An adjustable thermal cycle was carried out to obtain a uniform state and prevent the formation of cold cracks. It was revealed that the deposited layer has a cellular-dendritic type structure. The grains are enriched with iron atoms, and the boundaries are separated by thin layers of the second phase enriched with atoms of chromium, aluminum, tungsten and vanadium. Needle-like inclusions with a length of 150-730 nm were found inside the central part of the grains. Four-fold high-temperature tempering at 580 °C for 1 hour provides: dissolution of nanoscale inclusions in the volume of grains; promotes a more uniform distribution of alloying elements; forms a lamellar (needle-like) type structure, characteristic morphologically for needle-like martensite. The assumption is put forward and justified that the grains of the deposited layer are formed by a solid solution of γ -iron (austenite). A slight decrease in microhardness, wear resistance and coefficient of friction of the surfacing layer after high-temperature tempering was revealed. This behavior of the surfacing material during high-temperature tempering may be due to the relaxation of thermal stresses formed in the layer during surfacing.

Keywords: plasma surfacing method, flux-cored wire, controlled thermal cycle, high-speed steel, high-temperature tempering, nitrogen, hardness, wear resistance.

Acknowledgements: The study was supported by the Russian Science Foundation grant No. 23-19-00186, <https://rscf.ru/project/23-19-00186>.

For citation: Ivanov, Yu. F., Gromov, V. E., Peregudov, O. A., Vashchuk, E. S. & Gostevskaya, A. N. (2024). Structure of a layer of a high-speed steel with nitrogen deposited on the parts of metallurgical equipment. *Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedeniya (Basic Problems of Material Science (BPMS))*, 21(2), 143–152. (In Russ.). doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2024.02.001.

Введение

В последнее время в металлургии и машиностроении наблюдаются устойчивая тенденция использования покрытий, обладающих комплексом повышенных эксплуатационных свойств и в первую очередь абразивной износостойкостью в условиях высоких температур. Для этих целей наиболее эффективными являются быстрорежущие стали [1-4]. Основными свойствами, определяющими состояние металлических изделий, в конкретных условиях изнашивания являются характеристики их микроstructures, которые в свою очередь определены

химическим составом, структурой сплава, технологией их получения и режимами термической и поверхностной обработки. Предложенные в работах [4-7] способы наплавки быстрорежущими сталями высокой твердости позволяют получить наплавочный металл в состоянии закалки и без трещин. Технологическая последовательность операций наплавки состоит из механической обработки заготовки, самой плазменной наплавки, высокотемпературного отпуска и окончательной механической обработки. При реализации предложенных способов используется плазменная наплавка порошковыми проволоками в среде азота, что позволяет

достичь уникальных свойств по сравнению с безазотистыми сплавами аналогичного назначения. Трудности использования азота заключаются в его высокой диффузионной подвижности при высоких температурах, что приводит к повышенному угару и росту зерна, и может полностью нивелировать положительный эффект легирования азотом. Применительно к износостойким покрытиям азот используется для повышения ударо и коррозионной стойкости покрытий [4-10]. К сожалению, физическая природа и механизмы формирования повышенной твердости и износостойкости наплавленного быстрорежущего металла до конца не выяснены.

Целью работы является исследование влияния термического цикла плазменной наплавки в защитно-легирующей среде азота и последующего высокотемпературного отпуска на состояние структуры наплавленной теплостойкой стали P18, дополнительно легированной алюминием и азотом.

Материалы, методы и методики исследования

В работе исследовалась наплавленная быстрорежущая сталь P18Ю, дополнительно легированная алюминием и азотом, следующего химического состава, % (по массе): С – 0,87; Cr – 4,41; W – 17,00; Mo – 0,10; V – 1,50; Ti – 0,35; Al – 1,15; N – 0,06. В качестве металла подложки использовали сталь 30ХГСА следующего химического состава, % (по массе): С – 0,3; Cr – 0,9; Mn – 0,8; Si – 0,9.

Наплавку заготовки осуществляли на установке для плазменной наплавки тел вращения [11-14] подачей в сварочную ванну нетокопроводящей присадочной порошковой проволоки ПП-Р18Ю. Режимы наплавки не отличались от описанных в работах [4-7].

Из верхних слоев наплавленного металла на станке электроискровой резки вырезали образцы, которые подвергали высокотемпературному отпуску при температуре нагрева 580 °С, время выдержки 1 ч, количество отпусков 4. При проведении металлографического исследования применяли оптический микроскоп OLYMPUS GX-51. Образцы подвергали травлению 4 % спиртовым раствором азотной кислоты с выдержкой в нем в течение 10 с. Накопление карт, спектров профилей ЭДС осуществлялось на сканирующем электронном микро-

скопе КУКУ-ЕМ6900 с термоэмиссионным вольфрамовым катодом, при заданных параметрах: ускоряющее напряжение 20 кВ; ток эмиссии 150 мкА; ток накала точки насыщения 2,4 А; рабочее расстояние между образцом и объективной линзой 15 мм [15-18].

Исследования микротвердости проводились методом Виккерса на приборе HVS-1000. Индентором служила четырехгранная алмазная пирамида, нагрузка на которую составляла 1 Н.

Трибологические испытания осуществляли на трибометре Pin on Disc and Oscillating TRIBOtester (TRIBOtechnic) при следующих параметрах: шарик из оксидной керамики состава Al_2O_3 диаметром 6 мм, радиус дорожки трения 2 мм, путь, пройденный контртелом, 100 м, нагрузка на индентор 10 Н. Трибологические испытания осуществляли в условиях сухого трения при комнатной температуре.

Результаты и их обсуждение

Характерное изображение структуры наплавленного слоя в плоскости, параллельной поверхности подложки, полученное методами сканирующей электронной микроскопии, приведено на рис.1.

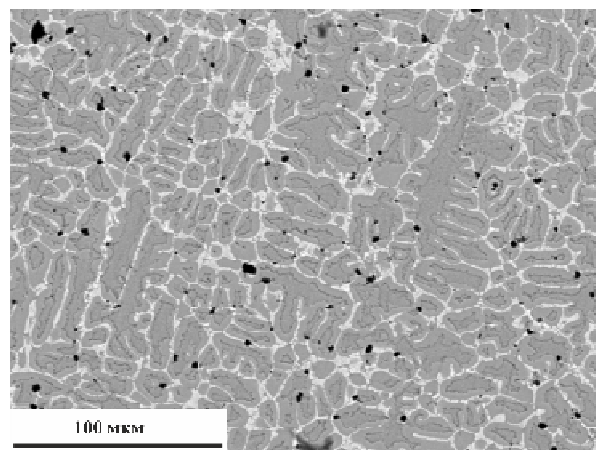


Рис.1. Структура наплавленного слоя, выявленная методами сканирующей электронной микроскопии

Fig.1. The structure of the deposited layer revealed by scanning electron microscopy

Методами микрорентгеноспектрального анализа установлено, что наплавленный материал имеет сложный элементный состав (рис.2). Результаты количественного анализа элементного состава наплавленного слоя, представленные в таблице 1, свидетельствуют о том, что основным химическим элементом ис-

следуемого участка наплавки является железо; легирующие железо элементы металлов и не-

металлов (углерод) присутствуют в существенно меньшем количестве.

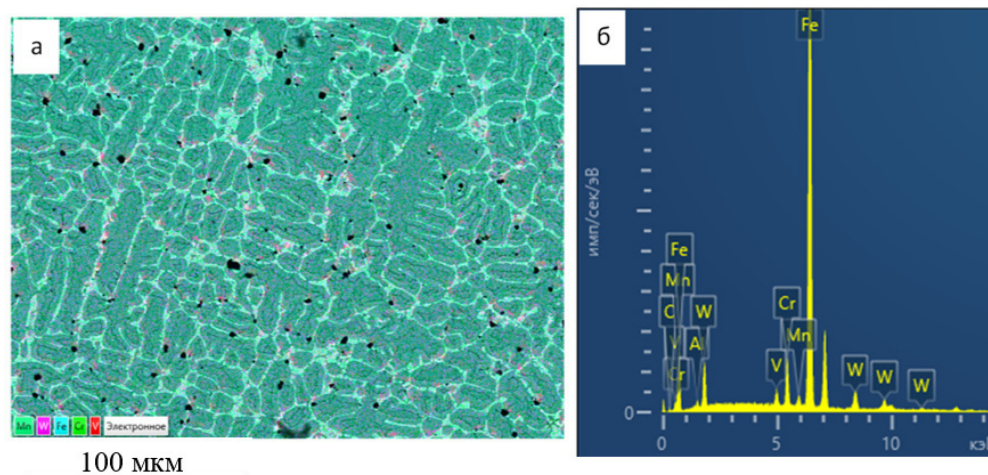


Рис.2. Электронно-микроскопическое изображение структуры наплавленного слоя (а); на (б) представлены энергетические спектры, полученные с данного (а) участка наплавленного слоя

Fig.2. Electron microscopic image of the deposited layer structure (a); (b) shows the energy spectra obtained from the given (a) area of the deposited layer

Таблица 1. Результаты анализа элементного состава участка наплавленного слоя, электронно-микроскопическое изображение которого приведено на рис.1 и рис.2а

Table 1. The results of the analysis of the elemental composition of the area of the deposited layer, the electron microscopic image of which is shown in Fig.1 and Fig.2a

Элемент	вес. %	атом. %
C	6,02	24,26
Al	1,17	2,09
V	1,29	1,22
Cr	3,97	3,69
Mn	0,65	0,57
Fe	75,02	65,02
W	11,88	3,13

Наплавленный слой имеет структуру ячеисто-дендритного типа, далее по тексту называемые зернами (рис.1, рис.2а). Границы зерен разделены сравнительно тонкими (≈ 1 мкм) прослойками второй фазы. Методами картирования установлено, что объем зерен обогащен атомами железа, прослойки, расположенные вдоль границ зерен, обогащены преимущественно атомами хрома, вольфрама и ванадия (рис.3). Алюминий (по всей видимости, окислы алюминия) формирует включения округлой формы, расположенные также на границах зерен.

Детальные исследования структуры наплавленного слоя позволили выявить в объеме зерен (в центральной его части) области повышенной травимости (рис.4). В объеме данных областей присутствуют частицы второй фазы игольчатой формы, продольные размеры которых изменяются в пределах от 150 нм до 730 нм.

Уточнение распределения элементного состава наплавленного слоя осуществляли методом микрорентгеноспектрального анализа по точкам. Области анализа элементного состава указаны на рис.5 квадратами и обозначены цифрами.

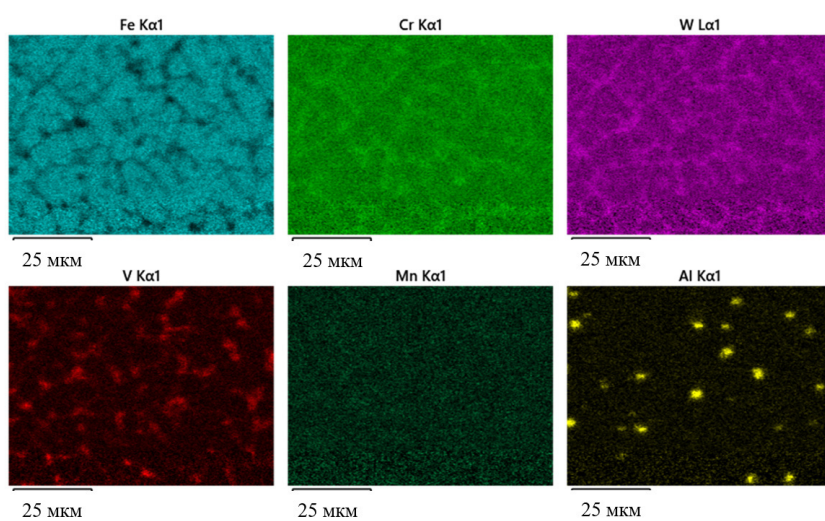


Рис.3. Карты распределения атомов металлов наплавленного слоя

Fig.3. Distribution maps of metal atoms of the deposited layer

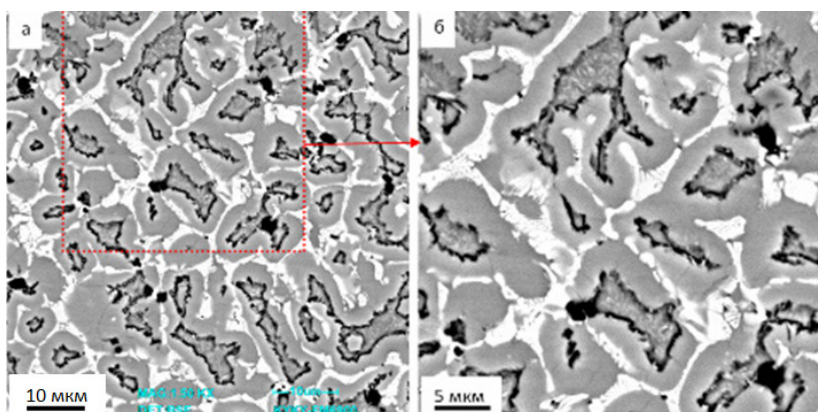


Рис.4. СЭМ изображение структуры наплавленного слоя

Fig.4. SEM image of the deposited layer structure

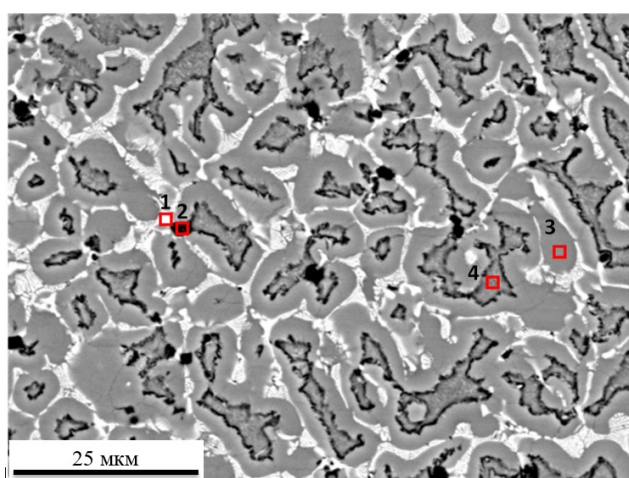


Рис.5. Электронно-микроскопическое изображение структуры участка наплавленного слоя с указанными точками анализа элементного состава материала

Fig.5. Electron microscopic image of the structure of the area of the deposited layer with the indicated points of analysis of the elemental composition of the material

Результаты анализа элементного состава участка наплавленного слоя, электронно-микроскопическое изображение которого при-

ведено на рис.5, выполненного методом «по точкам», представлено в таблице 2.

Таблица 2. Результаты анализа элементного состава участка наплавленного слоя, электронно-микроскопическое изображение которого приведено на рис.5

Table 2. The results of the analysis of the elemental composition of the area of the deposited layer, the electron microscopic image of which is shown in Fig.5

Элемент	Область 1		Область 2		Область 3		Область 4		В среднем	
	вес. %	ат. %	вес. %	ат. %	вес. %	ат. %	вес. %	ат. %	вес. %	ат. %
C	12,1	40,05	0,00	0,00	4,81	20,59	5,94	24,59	6,31	25,88
Al	10,08	14,83	2,99	6,78	0,55	1,04	0,00	0,00	1,10	2,01
V	7,34	5,72	4,40	5,27	1,52	1,53	1,44	1,41	2,29	2,22
Cr	3,36	2,57	4,56	5,36	4,81	4,75	3,82	3,65	4,40	4,18
Mn	0,34	0,25	0,00	0,00	0,47	0,44	0,51	0,46	0,46	0,41
Fe	44,75	31,82	70,04	76,61	73,50	67,64	74,23	66,09	69,00	60,90
W	22,01	4,75	18,0	5,98	14,34	4,01	14,06	3,80	16,44	4,41

Примечание: результаты, представленные в столбце «В среднем», получены при микрорентгеноспектральном анализе всей площади наплавленного слоя, представленного на рис.5

Анализируя результаты, приведенные в табл.2, можно отметить, что прослойки второй фазы, расположенные вдоль границ зерен (прослойки светлого контраста), обогащены атомами вольфрама, углерода, ванадия и алюминия (табл.2, область 1). Вкрапления округлой формы темного контраста обогащены атомами вольфрама, хрома, ванадия и не содержат атомы углерода (табл.2, область 2). Объем ячеек кристаллизации (табл.2, области 3 и 4) характеризуются относительно малой концентрацией атомов алюминия и ванадия.

Таким образом, выполненные исследования структуры и элементного состава наплавленного слоя выявили существенно неоднородное распределение легирующих железо химических элементов, что должно способствовать формированию многофазной структуры.

Высокотемпературный отпуск приводит к существенному преобразованию структуры и, по всей видимости, фазового состава наплавленного слоя. Анализируя результаты, представленные на рис.6, можно отметить, во-первых, отсутствие в объеме зерен областей, содержащих наноразмерные включения (рис.4), и, во-вторых, формирование структуры пластинчатого (игольчатого) типа, по морфологическому признаку характерной для пластинчатого мартенсита.

Этот результат дает основание утверждать, что объем зерен был представлен твердым раствором на основе ГЦК кристаллической решетки железа, т.е. остаточным аустенитом. После-

дующий высокотемпературный отпуск привел к потере стабильности γ -фазы и способствовал мартенситному $\gamma \rightarrow \alpha$ превращению.

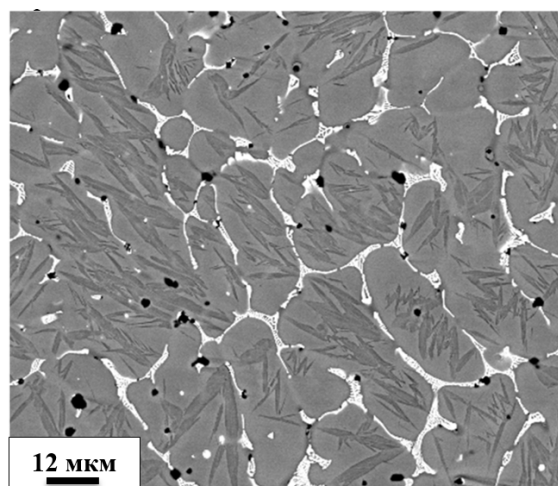


Рис.6. Структура наплавленного слоя, подвергнутого высокотемпературному отпуску, выявленная методами сканирующей электронной микроскопии

Fig.6. The structure of the deposited layer subjected to high-temperature tempering revealed by scanning electron microscopy

Высокотемпературный отпуск не привел значимому перераспределению химических элементов в наплавленном слое. Результаты микрорентгеноспектрального анализа показали, что прослойки второй фазы, расположенные по границам ячеек кристаллизации, обогащены атомами вольфрама и хрома, атомами алюминия обогащены включения округлой формы,

также расположенные на границы ячеек. Атомы ванадия распределены практически равномерно по объему ячеек и формируют включения округлой формы.

Методом картирования «по точкам» выполнен анализ распределения легирующих элементов в наплавленном слое, подвергнутом

высокотемпературному отпуску. Результаты анализа элементного состава участка наплавленного слоя, электронно-микроскопическое изображение которого приведено на рис.7, выполненного методом «по точкам», представлено в табл.3.

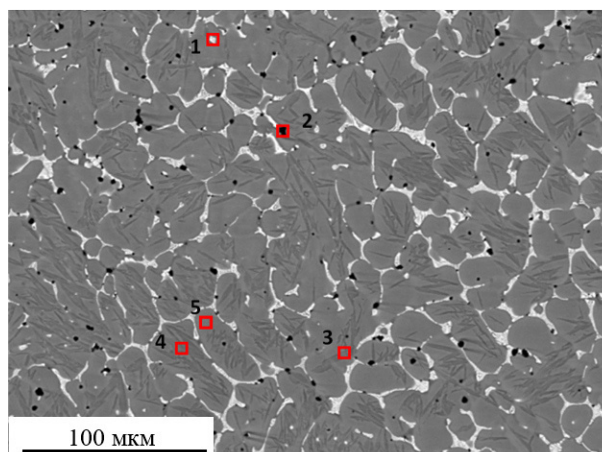


Рис.7. Электронно-микроскопическое изображение структуры участка наплавленного слоя, подвергнутого высокотемпературному отпуску, с указанными точками анализа элементного состава материала

Fig.7. Electron microscopic image of the structure of the area of the deposited layer subjected to high-temperature tempering, with the indicated points of analysis of the elemental composition of the material

Сопоставляя результаты элементного анализа, представленные в таблицах 2 и 3, можно отметить, что высокотемпературный отпуск

способствовал более равномерному распределению легирующих элементов в сплаве.

Таблица 3. Результаты анализа элементного состава участка наплавленного слоя после высокотемпературного отпуска, электронно-микроскопическое изображение которого приведено на рис.7

Table 3. The results of the analysis of the elemental composition of the area of the deposited layer after high-temperature tempering, the electron microscopic image of which is shown in Fig.7

Элемент	Область 1		Область 2		Область 3		Область 4		Область 5	
	вес. %	ат. %	вес. %	ат. %	вес. %	ат. %	вес. %	ат. %	вес. %	ат. %
C	3,97	17,13	4,36	18,24	4,93	20,70	8,06	30,29	4,31	17,99
O	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,74	2,32
Al	0,57	1,09	2,27	4,23	0,65	1,21	0,53	0,89	0,58	1,07
Si	0,84	1,56	0,43	0,77	0,19	0,35	0,00	0,00	0,00	0,00
P	0,28	0,48	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
V	0,00	0,00	0,03	0,02	0,01	0,01	0,05	0,04	0,01	0,01
Cr	4,03	4,02	4,38	4,24	3,93	3,81	3,41	2,96	3,72	3,59
Mn	0,44	0,41	0,33	0,30	0,44	0,40	0,38	0,31	0,38	0,35
Fe	74,77	69,35	74,16	66,78	75,01	67,76	75,66	61,13	80,16	71,92
Ni	2,85	2,51	2,71	2,32	2,89	2,49	2,77	2,13	0,00	0,00
W	12,24	3,45	11,33	3,1	11,95	3,28	9,13	2,24	10,10	2,75

Анализ микротвердости образцов показал, что твердость наплавленного слоя составляет 5,5 ГПа. Твердость наплавленного слоя после дополнительного высокотемпературного от-

пуска практически не изменилась и составила 5,4 ГПа. Некоторое снижение микротвердости материала при высокотемпературном отпуске может быть обусловлено релаксацией термиче-

ских напряжений, сформировавшихся в наплавленном слое при его создании.

Выполнены испытания наплавленного слоя на износостойкость в условиях сухого трения. Установлено, что дополнительный отпуск приводит к незначительному (на 8,9 %) снижению износостойкости наплавки. Одновременно с этим, отпуск наплавленного слоя сопровождается снижением коэффициента трения с 0,7 (наплавка в исходном состоянии) до 0,65 (наплавка после отпуска).

Заключение

Методами плазменной наплавки порошковыми проволоками в среде азота сформированы слои на стали 30ХГСА. Показано, что наплавленный слой имеет структуру ячеисто-дендритного типа, названных зернами. Объем зерен обогащен атомами железа. Границы зерен разделены тонкими (≈ 1 мкм) прослойками второй фазы, которые обогащены атомами хрома, алюминия, вольфрама и ванадия. В зернах, в центральной части объема, выявлены области, содержащие включения игольчатого типа длиной 150-730 нм. Установлено, что высокотемпературный отпуск наплавленного слоя приводит, во-первых, к растворению наноразмерных включений, расположенных в объеме зерен, и, во-вторых, способствует более равномерному распределению легирующих элементов в сплаве и, в-третьих, приводит к формированию структуры пластинчатого (игольчатого) типа, по морфологическому признаку характерной для пластинчатого мартенсита. Это позволило предположить, что зерна наплавленного слоя сформированы твердым раствором на основе γ -железа (аустенит). Показано, что высокотемпературный отпуск приводит к незначительному снижению микротвердости, износостойкости и коэффициента трения наплавленного слоя.

Список литературы

1. Геллер Ю.А. Инструментальные стали. Москва: Металлургия, 1983. 527 с.
2. Гольдштейн М.И., Грачев С.В., Векслер Ю.Г. Специальные стали. Москва: МИСИС, 1999. 408 с.
3. Технология электрической сварки металлов и сплавов плавлением / под ред. акад. Б. Е. Патона. Москва: Металлургия, 1974. 768 с.
4. Малушин Н.Н., Валуев Д.В. Обеспечение качества деталей металлургического оборудо-

вания на всех этапах их жизненного цикла путем применения плазменной наплавки теплоустойчивыми сталями. Томск: Изд-во НТЛ, 2013. 358 с.

5. Малушин Н.Н., Громов В.Е., Романов Д.А., Башенко Л.П., Перегудов О.А. Упрочнение теплоустойчивых сплавов плазмой в среде азота: монография. Новокузнецк: ООО «Полиграфист», 2022. 232 с.

6. Малушин Н.Н., Валуев Д.В., Осетковский В.Л., Солодский С.А. Технологии наплавки деталей горно-металлургического комплекса теплоустойчивыми сталями высокой твердости: монография. Томск: Изд. ТПУ, 2015. 212 с.

7. Рябцев И.А., Сенченков И.К. Теория и практика наплавочных работ. Киев: Экотехнологія, 2013. 400 с.

8. Походня И.К., Шлепаков В.Н., Максимов С.Ю., Рябцев И.А. Исследования и разработки ИЭС им. Е.О. Патона в области электродуговой сварки и наплавки порошковой проволокой (Обзор) // Автоматическая сварка. 2010. № 12 (692). С. 34–42.

9. Соснин Н.А., Ермаков С.А., Тополянский П.А. Плазменные технологии. Сварка, нанесение покрытий, упрочнение. Москва: Машиностроение, 2008. 406 с.

10. Нефедьев С.П., Емелюшин А.Н. Влияние азота на формирование структуры и свойств плазменных покрытий типа 10P6M5 // Вестник Югорского государственного университета. 2021. Вып. 3(62). С. 33–45.

11. Volobuev Yu.S., Volobuev O.S., Parkhomenko A.G., Dobrozhela E.I., Klimenchuk O.S. Using a new general-purpose ceramic flux SFM-101 in welding of beams // Welding International. 2012. V. 26, N 8. P. 649–653.

12. Golovko V.V., Potapov N.N. Special features of agglomerated (ceramic) fluxes in welding // Welding International. 2011. V. 25, N 11. P. 889–893.

13. Crespo A.C., Puchol R.Q., González L.P., Pérez C.R.G., Castellanos G., Cedré E.D., Ortíz T. Study of the relationship between the composition of a fused flux and its structure and properties // Welding International. 2009. V. 23, N 2. P. 120–131.

14. Puchol R.Q., Blanco J.R., González L.P., Hernández G.C., Pérez C.R.G. The influence of the air occluded in the deposition layer of flux during automatic welding: a technological aspect to consider in the quality of the bead // Welding International. 2009. V. 23, N 2. P. 132–140.

15. Ladd M., Palmer R. Structure Determination by X-ray Crystallography. New York: Kluwer Academic, Plenum Publishers, 2003. 819 p.

16. Waseda Y., Matsubara E., Shinoda K. Diffraction Crystallography. Introduction, Examples and Solved Problems. Berlin: Springer, 2011. 310 p.

17. Ernst F., Ruhle M., Science C. High-Resolution Imaging and Spectrometry of Materials. Berlin: Springer, 2003. 440 p.

18. Weirich T. Electron Crystallography. Berlin: Springer, 2006. 536 p.

Информация об авторах

Ю. Ф. Иванов – доктор физико-математических наук, профессор, главный научный сотрудник Института Сильноточной электроники СО РАН.

В. Е. Громов – доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой естественнонаучных дисциплин им. проф. В.М. Финкеля Сибирского государственного индустриального университета.

О. А. Перегудов – кандидат технических наук, доцент кафедры «Машиностроение и материаловедение», проректор по молодежной политике и воспитательной деятельности Омского государственного технического университета.

Е. С. Ващук – кандидат технических наук, доцент кафедры естественнонаучных дисциплин Филиала Кузбасского государственного технического университета имени Т.Ф. Горбачева в г. Прокопьевск.

А. Н. Гостевская – научный сотрудник лаборатории ЭМиОИ, аспирант Сибирского государственного индустриального университета.

References

1. Geller, Yu. A. (1983). Tool steels. Moscow: Metallurgiya. P. 527. (In Russ.).

2. Goldstein, M. I., Grachev, S. V. & Veksler, Yu. G. (1999). Special steels. Moscow: MISIS. P. 408. (In Russ.).

3. Technology of electric welding of metals and alloys by melting. Ed. acad. B. E. Paton. Moscow: Metallurgiya. (1974). P. 768. (In Russ.).

4. Malushin, N. N. & Valuev, D. V. (2013). Ensuring the quality of parts of metallurgical equipment at all stages of their life cycle by using

plasma surfacing with heat-resistant steels. Tomsk: NTL Publishing House. P. 358. (In Russ.).

5. Malushin, N. N., Gromov, V. E., Romanov, D. A., Baschenko, L. P. & Peregudov, O. A. (2022). Hardening of heat-resistant alloys by plasma in a nitrogen environment: monograph. Novokuznetsk: Polygraphist LLC. P. 232. (In Russ.).

6. Malushin, N. N., Valuev, D. V., Osetkovsky, V. L. & Solodsky, S. A. (2015). Technologies for surfacing parts of the mining and metallurgical complex with high-hardness heat-resistant steels: monograph. Tomsk: Ed. TPU. P. 212. (In Russ.).

7. Ryabtsev, I. A., Senchenkov, I. K. (2013). Theory and practice of surfacing works. Kyiv: Ecotechnology. P. 400. (In Russ.).

8. Pokhodnya, I. K., Shlepakov, V. N., Maksimov, S. Yu. & Ryabtsev, I. A. (2010). Research and development of IES them. E.O. Paton in the field of electric arc welding and surfacing with flux-cored wire (Review). *Avtomaticeskaya svarka*, 12(692), 34–42. (In Russ.).

9. Sosnin, N. A., Ermakov, S. A. & Topolyansky, P. A. (2008). Plasma technologies. Welding, coating, hardening. Moscow: Mashinostroenie. P. 406. (In Russ.).

10. Nefediev, S. P. & Emelyushin, A. N. (2021). Influence of nitrogen on the formation of the structure and properties of plasma coatings of the 10P6M5 type. *Bulletin of the Yugorsk State University*, 3(62), 33–45. (In Russ.).

11. Volobuev, Yu. S., Volobuev, O. S., Parkhomenko, A. G., Dobrozhela, E. I. & Klimenchuk, O. S. (2012). Using a new general-purpose ceramic flux SFM-101 in welding of beams. *Welding International*, 26(8), 649–653.

12. Golovko, V. V. & Potapov, N. N. (2011). Special features of agglomerated (ceramic) fluxes in welding. *Welding International*, 25(11), 889–893.

13. Crespo, A. C., Puchol, R. Q., González, L. P., Pérez, C. R. G., Castellanos, G., Cedré, E. D. & Ortíz, T. (2009). Study of the relationship between the composition of a fused flux and its structure and properties. *Welding International*, 23(2), 120–131.

14. Puchol, R. Q., Blanco, J. R., González, L. P., Hernández, G. C. & Pérez, C. R. G. (2009). The influence of the air occluded in the deposition layer of flux during automatic welding: a technological aspect to consider in the quality of the bead. *Welding International*, 23(2), 132–140.

15. Ladd, M. & Palmer, R. (2003). *Structure Determination by X-ray Crystallography*. New York: Kluwer Academic, Plenum Publishers. P. 819.

16. Waseda, Y., Matsubara, E. & Shinoda, K. (2011). *Diffraction Crystallography. Introduction, Examples and Solved Problems*. Berlin: Springer. P. 310.

17. Ernst, F., Ruhle, M. & Science, C. (2003). *High-Resolution Imaging and Spectrometry of Materials*. Berlin: Springer. P. 440.

18. Weirich, T. (2006). *Electron Crystallography*. Berlin: Springer. P. 536.

Information about the authors

Yu. F. Ivanov – Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor, Institute of High Current Electronics SB RAS.

V. E. Gromov – Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor, Head of the Department of Natural Sciences named after prof. V.M. Finkel, Siberian State Industrial University.

O. A. Peregudov – Candidate of Technical Sciences, Associate Professor of «Mechanical Engineering and Materials Science» Department, Vice-Rector, Omsk State Technical University.

E. S. Vashchuk – Candidate of Technical Sciences, Associate Professor of the Department of Natural Science, Branch of the Kuzbass State Technical University named after T.F. Gorbachev in Prokopyevsk.

A. N. Gostevskaya – Post-Graduate Student, Researcher of the EM&OI Laboratory, Siberian State Industrial University.

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.
The authors declare that there is no conflict of interest.

Статья поступила в редакцию 08.04.2024; одобрена после рецензирования 17.05.2024; принята к публикации 27.05.2024.

The article was received by the editorial board on 08 Apr. 24; approved after reviewing 17 May 24; accepted for publication 27 May 24.

Научная статья

1.3.8. Физика конденсированного состояния (физико-математические науки)

УДК 539.372:669:531

doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2024.02.002

3D МОДЕЛИРОВАНИЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ДЕФОРМАЦИОННЫХ ДЕФЕКТОВ В ОБЪЕМЕ МЕТАЛЛИЧЕСКОГО ГЦК-МОНОКРИСТАЛЛА

Юлия Владимировна Соловьева^{1†}, Яна Данияровна Липатникова²,
Георгий Александрович Мун³, Ирина Герасимовна Вовнова⁴,
Владимир Александрович Старенченко⁵, Дмитрий Николаевич Черепанов⁶

¹⁻⁶ Томский государственный архитектурно-строительный университет, пл. Соляная, 2, 634034, Томск, Россия

³ АО «ТомскНИПИнефть», пр. Мира, 72, 634027, Томск, Россия

¹ j_sol@mail.ru[†], <https://orcid.org/0000-0003-2362-0555>

² yana.lipatnikova@list.ru

³ georgymun@mail.ru

⁴ irinavov12@mail.ru

⁵ star@tsuab.ru, <https://orcid.org/0000-0003-4741-7519>

⁶ d_n_ch@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-9766-1037>

Аннотация. В работе представлены результаты 3D моделирования распределения и накопления дислокаций и малоугловых границ в объеме металлического ГЦК-монокристалла в процессе деформации одноосным сжатием. Расчеты выполнены в модели синтеза дислокационной кинетики и механики деформируемого твердого тела для случаев деформации без учета и с учетом сил торцевого трения. Приведены картины распределения интенсивности пластических деформаций, плотности дислокаций, плотности малоугловых границ в плоскости центрального продольного сечения деформируемого прямоугольного образца. Выявлены три области деформируемого объема кристалла, отличающиеся накоплением деформационных дефектов при наличии сил торцевого трения: торцевая часть кристалла, участки кристалла, прилегающие к свободной поверхности, и центральная часть. Проведена статистическая оценка степени однородности распределения деформационных дефектов в деформируемом объеме.

Ключевые слова: 3D-математическая модель, металлы, ГЦК-решетка, пластическая деформация, дислокации, малоугловые границы, дислокационная кинетика, механика деформируемого твердого тела.

Благодарности: Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда, проект № 24-22-00115, <https://rscf.ru/project/24-22-00115/> (<https://rscf.ru/en/project/24-22-00115/>).

Для цитирования: Соловьева Ю.В., Липатникова Я.Д., Мун Г.А., Вовнова И.Г., Старенченко В.А., Черепанов Д.Н. 3D моделирование распределения деформационных дефектов в объеме металлического ГЦК-монокристалла // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2024. Т. 21, № 2. С. 153–163. doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2024.02.002.

Original article

3D MODELING OF THE DEFORMATION DEFECTS DISTRIBUTION IN THE VOLUME OF FCC SINGLE CRYSTAL METALS

Yuliya V. Solov'eva^{1†}, Yana D. Lipatnikova², Georgiy A. Mun³, Irina G. Vovnova⁴,
Vladimir A. Starenchenko⁵, Dmitriy N. Cherepanov⁶

¹⁻⁶ Tomsk State University of Architecture and Building, Solyanaya Sq., 2, Tomsk, 634003, Russia

³ JSC «TomskNIPIneft», Mira Pr., 72, Tomsk, 634027, Russia

¹ j_sol@mail.ru[†], <https://orcid.org/0000-0003-2362-0555>

² yana.lipatnikova@list.ru

³ georgymun@mail.ru

⁴ irinavov12@mail.ru

⁵ star@tsuab.ru, <https://orcid.org/0000-0003-4741-7519>

⁶ d_n_ch@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-9766-1037>

Abstract. The paper presents the results of 3D modeling of the distribution and accumulation of dislocations and low-angle boundaries in the volume of a metal FCC single crystal during deformation by uniaxial compression. Calculations were performed using a model for the synthesis of dislocation kinetics and mechanics of a deformable solid for the cases of deformation without and with account of the end faces friction forces. Pictures of the distribution of the intensity of plastic deformations, the density of dislocations, and the density of low-angle boundaries in the plane of the central longitudinal section of deformed rectangular sample are presented. Three regions of the deformable volume with the different accumulation of deformation defects are identified in the presence of the end faces friction forces: the end face of the crystal, sections of the crystal adjacent to the free surface, and the central part. A statistical assessment of the degree of homogeneity of the distribution of deformation defects in the deformed volume was carried out.

Keywords: 3D mathematical model, metals, FCC lattice, plastic deformation, dislocations, low-angle boundaries, dislocation kinetics, mechanics of a deformable solid.

Acknowledgements: The research was funded by the Russian Science Foundation (project No. 24-22-00115), <https://rscf.ru/project/24-22-00115/> (<https://rscf.ru/en/project/24-22-00115/>).

For citation: Solov'eva, Yu. V., Lipatnikova, Y. D., Mun, G. A., Vovnova, I. G., Starenchenko, V. A. & Cherepanov, D. N. (2024). 3D modeling of the deformation defects distribution in the volume of FCC single crystal metals. *Fundamental'nye problemy sovremennoy materialovedeniya (Basic Problems of Material Science (BPMS))*, 21(2), 153–163. (In Russ.). doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2024.02.002.

Введение

Пластическая деформация является сложным многофакторным явлением. В отношении металлических кристаллических тел накоплен большой объем научной информации, позволяющей связать механические свойства деформируемых тел с их структурой. Это касается, прежде всего, классических работ, посвященных изучению стадийности пластической деформации [1, 2] и связи стадий со структурными особенностями и эволюцией субструктур на примере различных модельных металлических материалов с ГЦК-кристаллической решеткой [3, 4]. Детально исследована эволюция субструктуры монокристаллического чистого никеля в работе [5]. На основании данных исследований, были построены математические модели среднего поля [6, 7], которые учитывают микромеханизмы, определяющие кинетику накопления и аннигиляции дефектов в процессе пластической деформации. Данный тип моделирования позволяет весьма успешно описывать средние значения сопротивления деформированию, провести оценки плотностей деформационных дефектов, описать стадийность пластического течения чистых металлов. В то же время особенности натурального эксперимента подразумевают неоднородность напряженно-деформируемого состояния в зависимости от схемы нагружения. Хорошо известно, что даже в случае реализации простой схемы нагружения одноосным сжатием экспериментаторам не удастся полностью избавиться от влияния тре-

ния в области контакта торцевой грани образца с поверхностью пуансона. Деформация осадкой сопровождается структурной и деформационной неоднородностью, формированием ковочного креста. Задачи описания неоднородного напряженно-деформируемого состояния решаются методами континуальной механики деформируемых сред – методами механики деформируемого твердого тела.

В настоящей работе реализуется задача проведения численного эксперимента по одноосному высокоскоростному сжатию металлического монокристалла с ГЦК-кристаллической решеткой с целью анализа структурных неоднородностей, связанных со схемой напряженного состояния определяющей различную интенсивностью накопления деформационных дефектов различного вида (дислокаций, малых угловых границ) в локальных объемах деформируемого образца. Используется авторская модель синтеза дислокационной кинетики и механики деформированного твердого тела, которая прошла успешную апробацию при описании явления макролокализации пластической деформации интерметаллидов со сверхструктурой $L1_2$ [8, 9].

Принципы построения модели

Используемая в расчетах модель дислокационной кинетики ГЦК-чистых металлов, в которой учитываются микромеханизмы деформационного упрочнения и разупрочнения, связанные с накоплением плотности дислокаций (ρ) и

малоугловых границ разориентации (N), была построена согласно концепции упрочнения и отдыха [6, 7], и в наиболее общем (упрощенном) виде может быть представлена в виде следующих уравнений:

$$\begin{aligned} \frac{d\rho}{d\varepsilon} &= C \frac{(\alpha Gb)^2 \rho}{\tau} \omega - \frac{1}{\dot{\varepsilon}} A \frac{\rho^2}{\tau} - \frac{1}{\dot{\varepsilon}} R \rho N + \xi \frac{N}{\Delta h}, \\ \frac{dN}{d\varepsilon} &= I \rho N - \xi N, \\ \tau &= \tau_f^0 + (\alpha_0 - \beta T) Gb \rho^{1/2} + \frac{GbN}{4\pi} \lg\left(\frac{1}{Nb}\right), \end{aligned} \quad (1)$$

где ρ – плотность дислокаций, ε – величина относительной пластической деформации, $\dot{\varepsilon}$ – скорость пластической деформации, C – коэффициент модели [6], ω – доля краевых дислокаций в общей плотности дислокаций, G – модуль сдвига, b – модуль вектора Бюргера, τ – сдвиговое деформирующее напряжение, N – плотность малоугловых границ разориентации, Δh – среднее расстояние между дислокациями в границе разориентации, I , R , ξ – коэффициенты, контролирующие баланс дислокационных стенок [6, 7], A – коэффициент аннигиляции, $\alpha = \alpha_0 - \beta T$ – параметр междислокационного взаимодействия, α_0 , β – константы, определяемые из экспериментальной зависимости $\alpha(T)$, получаемой для конкретного металла.

Представленная математическая модель пластической деформации и упрочнения основана на следующих основных предположениях:

1) исходный монокристалл ориентирован в направлении [001], для которого характерно максимально множественное скольжение;

2) рассматриваются металлы с высокой энергией дефекта упаковки, для которых поперечное скольжение происходит при небольших напряжениях, а винтовые дислокационный сегменты разного знака быстро аннигилируют, поэтому в уравнениях скорость их накопления не учитывается.

Приведенная модель имеет достаточно хорошее согласование с экспериментальными данными в широком диапазоне температур деформации и более подробно описана в работах [6, 7, 10, 11].

Полученные кривые течения σ – ε металла были включены в модель механики упругопластической среды для описания упрочнения и разупрочнения деформируемого материала.

Система уравнений механики деформируемого твердого тела, описывающих движе-

ние упругопластической среды [8, 9], имеет следующий вид:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_V \rho_m dV &= 0, \\ \frac{d}{dt} \int_V \rho_m \mathbf{u} dV &= \int_{\Sigma} \mathbf{n} \boldsymbol{\sigma} dS, \\ \frac{d}{dt} \int_V \rho_m E dV &= \int_{\Sigma} \mathbf{n} \boldsymbol{\sigma} \mathbf{u} dS, \\ \hat{\mathbf{e}} &= \frac{\hat{\mathbf{s}}^\nabla}{2\mu} + \lambda \hat{\mathbf{s}}, \\ \hat{\mathbf{s}} : \hat{\mathbf{s}} &= \frac{2}{3} \sigma_T^2(q), \\ p(v, \varepsilon_v) &= \frac{\rho_m c_0^2 \left(1 - \frac{\varepsilon \gamma_0}{2}\right)}{(1 - \beta \cdot \varepsilon)^2} \varepsilon + \rho_m \gamma_0 \varepsilon_v, \end{aligned} \quad (2)$$

где t – время, V – объем интегрирования, Σ – его поверхность, \mathbf{n} – единичный вектор внешней нормали к поверхности Σ , ρ_m – плотность среды, $\boldsymbol{\sigma} = -p\hat{\mathbf{g}} + \hat{\mathbf{s}}$ – тензор напряжений, $\hat{\mathbf{s}}$ – его девиатор, p – давление, $\hat{\mathbf{g}}$ – метрический тензор, $\bar{\mathbf{u}}$ – вектор скорости, $E = \varepsilon_v + \bar{\mathbf{u}} \cdot \bar{\mathbf{u}}/2$ – удельная полная энергия, ε_v – удельная внутренняя энергия, $\hat{\mathbf{e}} = \hat{\mathbf{d}} - (\hat{\mathbf{d}} : \hat{\mathbf{g}}) \hat{\mathbf{g}}/3$ – девиатор тензора скоростей деформаций, $\hat{\mathbf{d}} = (\nabla \bar{\mathbf{u}} + \nabla \bar{\mathbf{u}}^T)/2$ – тензор скоростей деформаций, $\hat{\mathbf{s}}^\nabla$ – объективная мера скорости изменения напряжения, μ – модуль сдвига, σ_T – предел текучести, $\hat{\boldsymbol{\omega}} = (\nabla \bar{\mathbf{u}}^T + \nabla \bar{\mathbf{u}})/2$ – тензор вихря, q – параметр, который принимается равным величине пластической деформации, $\varepsilon = 1 - V$, c_0 – объемная скорость звука в материале, γ_0 – термодинамический коэффициент Грюнайзена, β – угловой коэффициент ударной адиабаты.

Уравнения (1) и (2) образуют синтетическую модель, объединяющую кинетику дефектов элементов среды и механику деформируемого твердого тела, которая численно реализована в авторских программных комплексах. Задачи динамической одноосной деформации сжатием монокристалла чистого металла с учетом накопления деформационных дефектов различного вида решаются в упомянутых выше в программных комплексах [12] и «РАНЕТ-3» [13], в которых свойства элемента среды в за-

висимости от степени деформации и деформирующего напряжения задается уравнением кинетики (1), а деформируемый объект представляется как совокупность взаимодействующих элементов описывается уравнениями механики деформируемой среды (2).

Результаты моделирования

В ходе проведенного исследования с использованием авторской программы для ЭВМ [12] были выполнены расчеты в рамках модели дислокационной кинетики для начальных стадий кривой деформационного упрочнения чистого никеля. Показано, что модель с неплохой точностью описывает общую форму кривой σ - ε , её стадийность и уровень деформирующих напряжений. Эволюция субструктур, которая модельно описывается изменением величин плотности дислокаций (ρ) и плотностью малоугловых границ разориентации (N), также соответствует экспериментальным наблюдениям. На рис.1а приведен участок расчетной кривой деформации σ - ε , соответствующий стадии II и стадии III. На этом же рисунке показаны данные моделирования средней скалярной плотности дислокаций (ρ) (см. рис.1б) от степени деформации и плотность малоугловых границ разориентации (N) (см. рис.1в). Сравнение полученных теоретических зависимостей σ - ε с экспериментальными кривыми, приведенными в работе [5], показало совпадение по порядку значений расчетных величин и качественному виду зависимостей. Модель, также хорошо отражает тот факт, что на стадии II (до степени относительной деформации $\varepsilon \approx 6\%$) и до середины стадии III ($\approx 20\%$ относительной деформации) плотность малоугловых границ практически не увеличивается.

Именно в этом интервале деформаций экспериментально наблюдаются ячеистые разориентированные субструктуры. Увеличение степени деформации свыше значений 0,2 (20% относительной деформации) приводит к быстрому росту плотности малоугловых границ (N) (см. рис.1в), что соответствует наблюдаемому в эксперименте появлению разориентированных субструктур – разориентированных ячеистых, полосовых и фрагментированных на стадии IV деформационного упрочнения [5].

Приведенные на рис.1 зависимости описывают пластическое поведение (кривая σ - ε) и структурные параметры (ρ , N) элемента дефор-

мируемой среды. Для получения картины распределения деформационных дефектов в объеме деформируемого кристалла проводились расчеты в программном комплексе «Ранет-3» [14]. Пластические свойства элемента среды, рассчитанные в модели дислокационной кинетики, вводились в модель механики деформируемого твердого тела через критерий пластичности Мизеса (величина σ_T в уравнениях (2)). Решалась задача одноосного сжатия прямоугольного бруска размерами $(14,0 \times 7,5 \times 2,5)$ мм³ со скоростью деформации 30 м/с в полной трехмерной постановке. Картины распределения интенсивности пластических деформаций (ε_{ii}), плотности дислокаций (ρ) и плотности малоугловых границ (N) приведены в плоскости центрального продольного сечения деформируемого прямоугольного бруска (см. рис.2-4). На рисунках стрелкой указано расположение подвижных узлов и направление их движения.

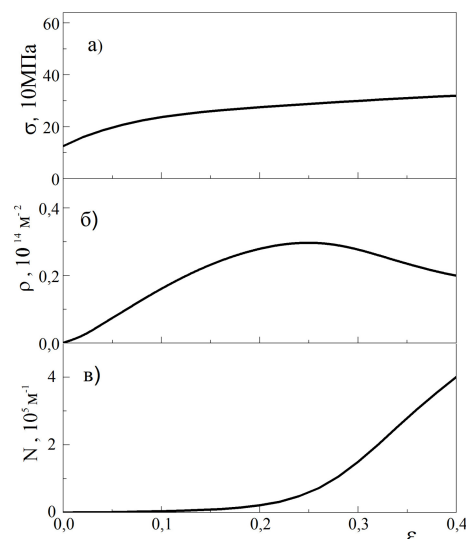


Рис.1. Кривая течения элемента деформируемой среды σ - ε (а), зависимости плотности дислокаций ρ - ε (б), плотности малоугловых границ N - ε (в)

Fig.1. Stress-strain curve of an element of a deformable medium σ - ε (a), dislocation density ρ - ε (b), density of low-angle boundaries N - ε (c) dependences

Рассмотрим картины распределения интенсивности пластических деформаций (ε_{ii}), приведенные на рис.2. Расчеты были проведены для случаев деформации без учета сил торцевого трения (рис.2а) и с учетом сил торцевого трения (рис.2б). В первом случае эволюция распределения пластических деформаций в объеме образца протекает однородно. В отсутствие торцевого трения единственной причиной неоднородности деформированного со-

стояния среды является прохождение по материалу ударной волны, связанной с особенностями динамического нагружения. Расчёты показали, что эффект прохождения ударного волнового фронта в объеме образца оказывается значимым вначале деформирования (примерно

до 7 % деформации). В дальнейшем в отсутствие сил трения деформация образца протекает однородно – коэффициент вариации значений интенсивностей деформации по всем расчетным элементам оказывается ниже десяти процентов.

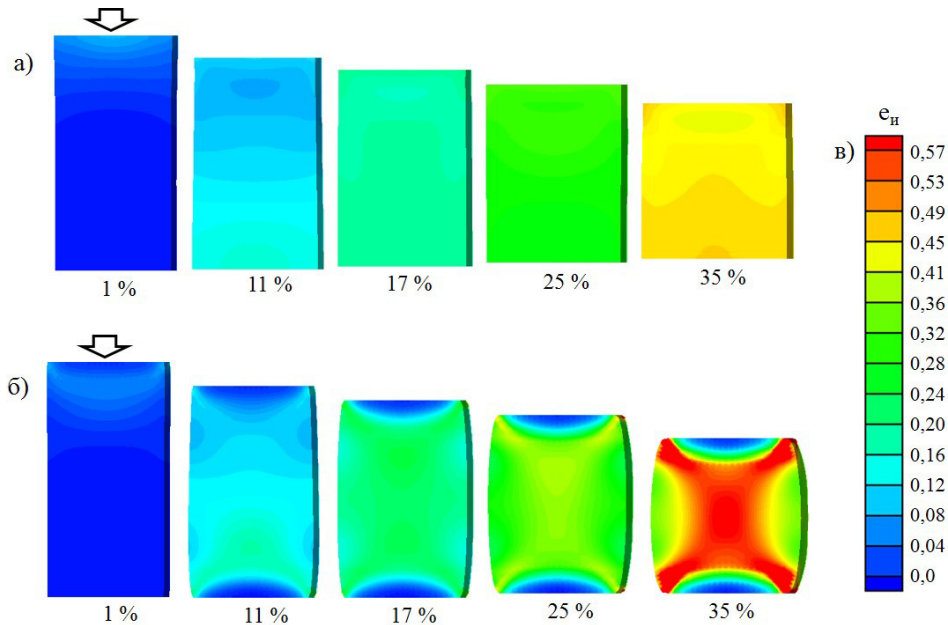


Рис.2. Распределение интенсивности пластических деформаций в сечении: без учета сил торцевого трения (а), с учетом сил торцевого трения (б). Цветовая шкала интенсивности пластических деформаций (e_n) (в)

Fig.2. Distribution of the intensity of plastic deformations: without the forces of the end faces friction (а), with the forces of end faces friction (б). Color scale of plastic deformation intensity (e_n) (с)

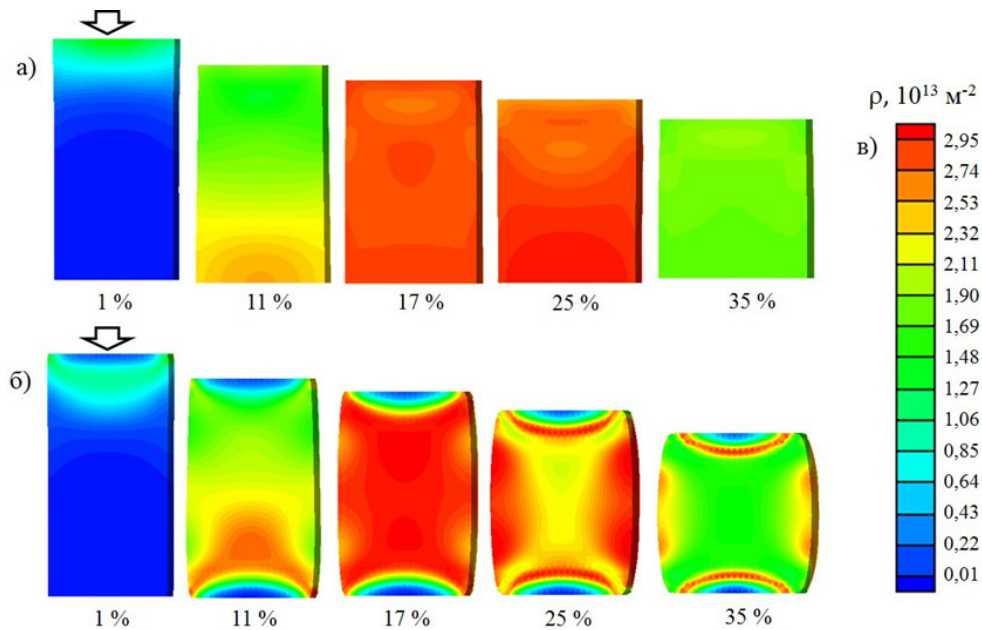


Рис.3. Распределение плотности дислокаций в сечении: без учета сил торцевого трения (а), с учетом сил торцевого трения (б). Цветовая шкала величины плотности дислокаций (в)

Fig.3. Dislocation density distribution: without the forces of the end faces friction (а), with the forces of the end faces friction (б). Color scale of dislocation density (с)

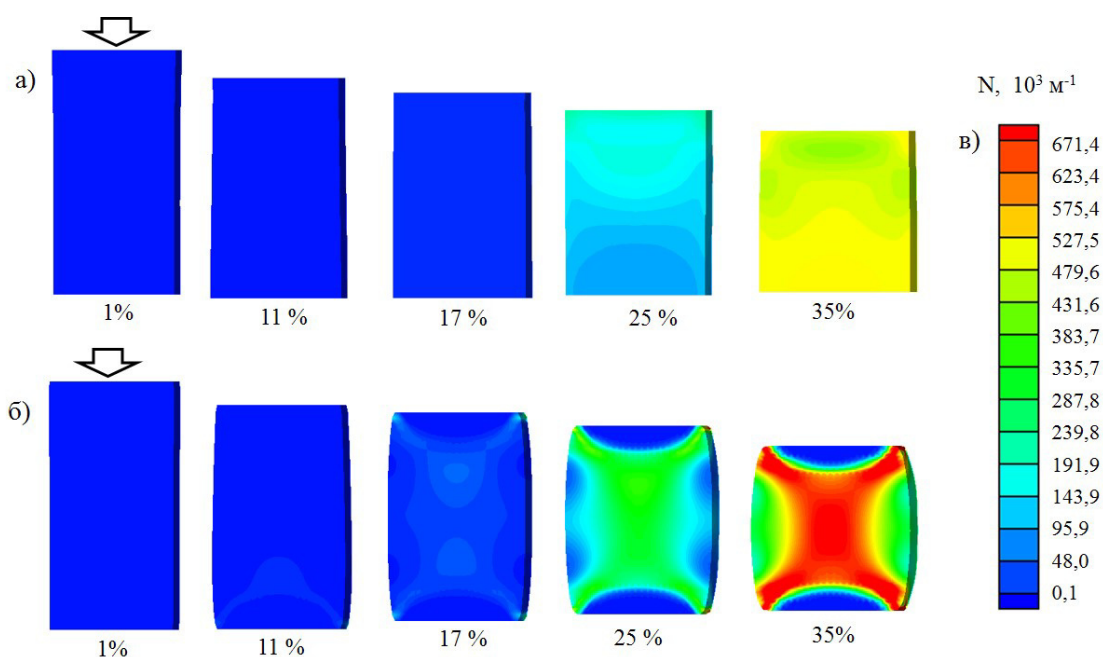


Рис.4. Распределение плотности малоугловых границ в сечении: без учета сил торцевого трения (а), с учетом сил торцевого трения (б). Цветовая шкала величины плотности малоугловых границ (в)

Fig.4. Distribution of the density of low-angle boundaries: without the forces of the end faces friction (a), with the forces of the end faces friction (b). Color scale of the density of low-angle boundaries (c)

Качественно другая картина распределений деформаций в объеме образца наблюдается при наличии сил торцевого трения (см. рис.2б). В этом случае уже с первых секунд деформации развивается существенная неоднородность напряженно-деформированного состояния, которая выражается в формировании крестообразной области избыточных деформаций и напряжений от торцевых ребер образца, которые из-за наличия трения становятся концентраторами напряжений. Наблюдается характерное формирование бочкообразной формы образца, свойственное пластичным материалам после обработки давлением при наличии сил трения. Такие эффекты хорошо известны, наличие крестовидных пересекающихся полос локализации пластической деформации наблюдались, при деформации сжатием монокристаллов алюминия [14] вдоль высокосимметричной кристаллографической ориентировки [001]. Похожие картины наблюдали, также, авторы [15] при деформации стальных образцов. Таким образом, используемая в работе 3D модель механики деформированного твердого тела хорошо отражает основные особенности деформационного поведения металлов в задачах прессования без трения и с наличием сил торцевого трения.

Модель синтеза дислокационной кинетики и механики деформируемого твердого тела по-

зволяет провести расчёты распределения в объеме образца плотностей дефектов различного вида в условиях сформированного напряженно-деформированного состояния. В отсутствие силы трения, расчеты показывают в целом однородное изменение параметров ρ и N в объеме кристалла (рис.3а, рис.4а). Исключение составляют начальные деформации, при которых ещё значимым является распространение динамической волны нагружения. Хорошо видно, что плотность дислокаций до степени деформации 20 % растет однородно по мере увеличения степени деформации во всём деформируемом объеме (рис.3а), а после достижения максимального значения начинает снижаться. Снижения дислокационной плотности (ρ) соответствует началу процесса формирования малоугловых границ разориентации (см рис.4а), которые образуются при перестроении краевых дислокаций и их ухода из средней плотности дислокаций в границы наклона.

Решение задач распределения плотностей дефектов различного вида в объеме деформированного кристалла с учетом сил торцевого трения (рис.3б и рис.4б) показывает, что в этом случае можно выделить три области кристалла, существенно отличающиеся друг от друга особенностями формирования субструктур в процессе пластической деформации. Это торцевая

область образца, участки вблизи свободной поверхности образца и центральная часть образца. Тонкие приторцевые слои материала в натурном эксперименте могут быть представлены участками образца, с обеих сторон, прилегающих к пуансонам испытательной машины. По нашим оценкам толщина каждого слоя составляет примерно 1,5 мм. Характерной особенностью эволюции субструктуры в этих областях кристалла является чрезвычайно медленная скорость накопления субструктурных дефектов, вследствие низких значений локальных напряжений и деформаций. Необходимо отметить, что если к 35 % деформации наблюдается накопление дислокаций в приторцевых слоях, т.е. плотность дислокаций в целом увеличивается (см. рис.3б), то плотность малоугловых границ не изменяется, оставаясь равной исходному значению (см. рис.4б).

Отличаются особенностями формирования субструктур и участки образца, прилегающие к свободной поверхности образца. Поскольку эти части образца не испытывают влияния торцевых концентраторов напряжений, то и накопление плотностей дефектов различного вида в

этой части образца запаздывает по сравнению с центральной крестообразной областью.

Для оценки влияния сил трения на степень однородности субструктур, сформированных в процессе пластического течения, был проведен статистический анализ величин ρ и N , характеризующих каждый конечный элемент среды. Были определены основные статистические характеристики для наборов из 70560 значений, соответствующих числу конечных элементов, на которые разбивался деформируемый объем при проведении счетной процедуры. Для величин ρ и N на рис.5 и рис.6 показаны зависимости от степени относительной деформации (ε) следующих статистических характеристик: среднее, мода, медиана, максимальное значение, минимальное значение, коэффициент вариации. Хорошо видно, что кривые изменения среднего значения величин качественно и количественно повторяют зависимости от степени деформации величин ρ и N элемента деформируемой среды в модели дислокационной кинетики (см. рис.1).

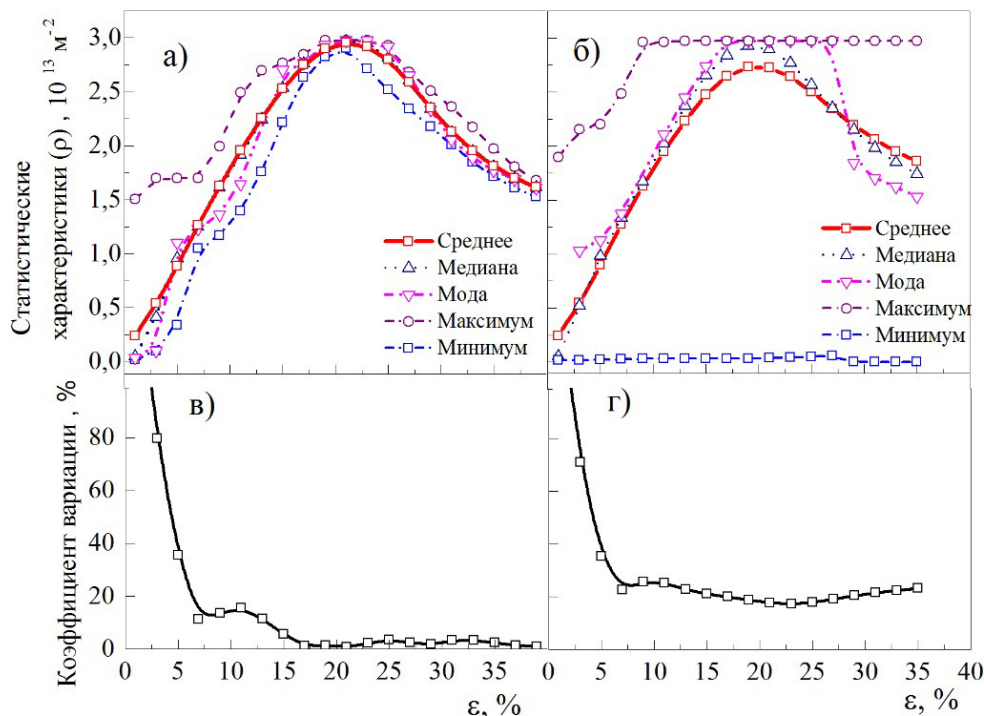


Рис.5. Основные статистические характеристики плотности дислокаций (среднее, мода, медиана и др.) (а) и (б); коэффициент вариации (в) и (г). Расчёт, выполненный без учета сил торцевого трения (а) и (в); с учетом сил торцевого трения (б) и (г)

Fig.5. Basic statistical characteristics of dislocation density (average, mode, median, etc.) (a) and (b); coefficient of variation (c) and (d). Calculation performed without the forces of the end faces friction (a) and (c), with the forces of the end faces friction (b) and (d)

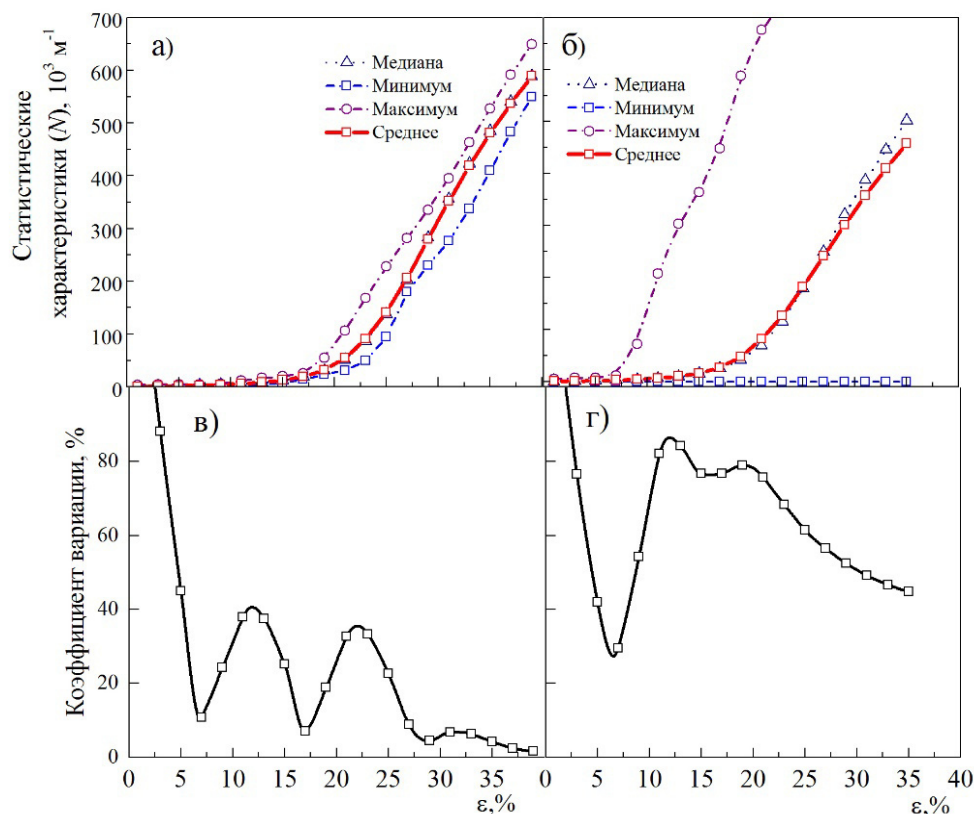


Рис.6. Основные статистические характеристики плотности малоугловых границ (среднее, мода, медиана и др.) (а) и (б); коэффициент вариации (в) и (г). Расчёт, выполненный без учета сил торцевого трения (а) и (в); с учетом сил торцевого трения (б) и (г)

Fig.6. Basic statistical characteristics of low-angle boundaries (average, mode, median, etc.) (a) and (b); coefficient of variation (c) and (d). Calculation performed without the forces of the end faces friction (a) and (c), with the forces of the end faces friction (b) and (d)

Однородность формирующейся в процессе деформации структуры оценивалась величиной коэффициента вариации (стандартное отклонение, деленное на среднеарифметическое значение). По мере развития деформации формируется более однородная структура: коэффициент вариации плотности дислокаций и плотности малоугловых стенок снижается. При этом субструктура, связанная с накоплением малоугловых границ раздела, оказывается менее однородной – коэффициент вариации характеризуется высокими немонотонно меняющимися значениями.

Неоднородность в развитии субструктуры малоугловых границ обусловлена механизмами разрушения и образования границ, которые учитываются в модели кинетики деформационных дефектов. Также на степень однородности

сформированных субструктур в значительной мере влияет наличие торцевого трения.

Далее была построена зависимость величины $\langle \sigma \rangle$, полученная усреднением напряжения Мизеса по 70560 элементам, от величины $\langle \rho \rangle^{1/2}$, где $\langle \rho \rangle$ – среднее значение плотности дислокаций. Из рис.7. хорошо видно, что на начальной стадии наблюдается линейная зависимость рассматриваемых величин. Это свидетельствует о выполнении в модельном эксперименте хорошо известного в дислокационной физике соотношения Тейлора [16]. Сравнение с экспериментальным результатом, полученным в работе [5], показывает близкие значения параметра междислокационного взаимодействия: $\alpha_{\text{теор}} = 0,6 \pm 0,2$; $\alpha_{\text{эксп}} = 0,4 \pm 0,1$.

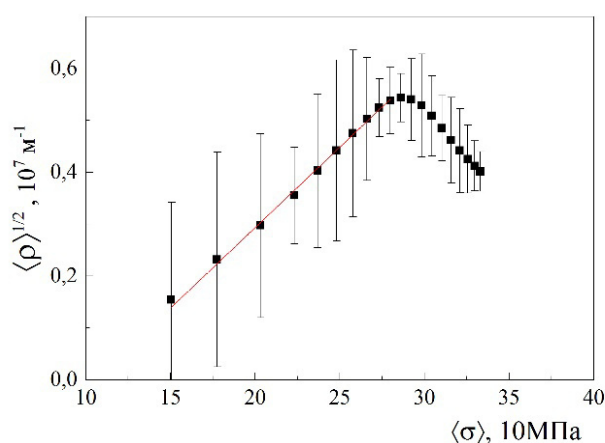


Рис.7. Зависимость $\langle \rho \rangle^{1/2}$ от величины среднего деформирующего напряжения $\langle \sigma \rangle$. Проверка выполнения соотношения Тейлора

Fig.7. Dependence of $\langle \rho \rangle^{1/2}$ on the value of the average stress $\langle \sigma \rangle$. Checking of the Taylor relationship fulfillment

Заключение

С использованием 3D модели синтеза дислокационной кинетики и механики деформируемого твердого тела проведено теоретическое исследование распределения и накопления деформационных дефектов различного типа в объеме деформируемого кристалла. Была показана принципиальная возможность и верификационное совпадение ряда расчетных величин с их экспериментальными значениями. В результате было получено описание особенностей и эволюции распределения дислокаций и малоугловых границ в деформируемом объеме с учетом влияния сил торцевого трения и при их отсутствии. При наличии сил трения получено модельное описание формирования характерной бочкообразной формы образца. Силы торцевого трения оказываются важным фактором, влияющим на неоднородность распределения дефектов в деформируемом объеме. Показано, что накопление дислокационной плотности в деформируемом объеме в процессе деформации осуществляется более однородно, в отличие от распределения плотности малоугловых границ. При наличии сил торцевого трения выделяются три области деформируемого объема кристалла, отличающиеся накоплением деформационных дефектов: приторцевая часть кристалла, участки кристалла, прилегающие к сво-

бодной поверхности, и центральная часть. В тонких слоях, прилегающих к поверхностям пуансонов и в областях вблизи свободной поверхности, скорость накопления деформационных дефектов снижена по сравнению с центральной частью образца. Степень неоднородности, количественная оценка которой проведена по коэффициенту вариации величин ρ и N , не превышает наблюдаемую в эксперименте при электронно-микроскопическом исследовании микроструктур. Необходимо отметить, что в данной задаче был рассмотрен случай высокосимметричной кристаллографической ориентировки благоприятной для множественного скольжения. В случае кристаллов других ориентировок при проведении моделирования необходимо учитывать сдвиговую анизотропию свойств.

Список литературы

1. Белл Дж.Ф. Экспериментальные основы механики деформируемых твердых тел. II. Конечные деформации. М.: Наука, 1984. 431 с.
2. Бернер Р., Кронмюллер Г. Пластическая деформация монокристаллов. М. Мир, 1969. 272 с.
3. Рыбин В.В., Малышевский В.А., Олейник В.Н. Структуры и превращения при пластическом деформировании металлов и сплавов // Физика металлов и металловедение. 1976. Т. 42, № 5. С. 1092–1098.
4. Конева Н.А., Козлов Э.В. Физическая природа стадийности пластической деформации // Изв. вузов. Физика. 1990. № 2. С. 89–106.
5. Соловьев А.Н., Старенченко С.В., Соловьева Ю.В. Эволюция дислокационной субструктуры в монокристаллах никеля и механизмы деформации // Изв. вузов. Физика. 2017. Т. 60, № 4. С. 73–78.
6. Старенченко В.А., Черепанов Д.Н., Соловьева Ю.В., Попов Л.Е. Генерация и накопление точечных дефектов в процессе пластической деформации в монокристаллах с ГЦК-структурой // Известия вузов. Физика. 2009. Т. 52, № 4. С. 60–71.
7. Старенченко В.А., Черепанов Д.Н., Селиванникова О.В. Моделирование пластической деформации кристаллических материалов на основе концепции упрочнения и отдыха // Известия вузов. Физика. 2014. Т. 57, № 2. С. 4–14.

8. Фахрутдинова Я.Д., Соловьева Ю.В., Валуйская Л.А., Белов Н.Н., Старенченко В.А. Моделирование локализации пластической деформации в терминах механики сплошных сред // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. 2012. Т. 9, № 4. С. 527–533.

9. Старенченко В.А., Липатникова Я.Д., Соловьева Ю.В., Белов Н.Н., Валуйская Л.А., Вовнова И.Г. Токовая неустойчивость упрочнения микроэлемента деформационной среды как причина формирования бегающей шейки // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. 2022. Т. 19, № 4. С. 454–462.

10. Черепанов Д.Н., Вовнова И.Г., Соловьева Ю.В., Старенченко В.А. Моделирование субструктур, формирующихся при умеренных и мегапластических деформациях в ГЦК-монокристаллах // *Известия вузов. Физика*. 2023. Т. 66, № 8 (789). С. 31–40.

11. Cherepanov D.N., Solov'eva Yu.V., Starenchenko V.A. Mechanisms of the Formation and Accumulation of Misorientations in Deformable Metals and Alloys // *Journal of Surface Investigation: X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques*. 2024. V. 18, N 1. P. 74–83.

12. Черепанов Д.Н., Старенченко В.А., Соловьева Ю.В. Расчет характеристик дефектной подсистемы металлических ГЦК-материалов в условиях квазистатического нагружения. Программный комплекс для ЭВМ. Патентное ведомство: Россия. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ №: RU 2023665354, 2023 г.

13. Югов Н.Т., Белов Н.Н., Югов А.А. Расчет адиабатических нестационарных течений в трехмерной постановке (РАНЕТ-3). Пакет программ для ЭВМ. Федеральная служба по интеллектуальной собственности, патентам и товарным знакам. Свидетельство о гос. регистрации программы для ЭВМ №2010611042, 2010 г.

14. Теплякова Л.А., Лычагин Д.В., Козлов Э.В. Локализация сдвига при деформации монокристаллов алюминия с ориентацией оси сжатия [001] // *Физическая мезомеханика*. 2002. Т. 5, № 6. С. 49–55.

15. Копаница Д.Г., Устинов А.М., Потеев А.И., Клопотов А.А., Марченко Е.С. Изменения напряженно-деформированных состояний приповерхностных слоев стали в процессе нагружения // *Известия вузов. Физика*. 2017. Т. 60, № 9. С. 105–113.

16. Фридель Ж. Дислокации. М.: Мир, 1967. 643 с.

Информация об авторах

Ю. В. Соловьева – доктор физико-математических наук, доцент, заведующая кафедрой физики, химии и теоретической механики Томского государственного архитектурно-строительного университета.

Я. Д. Липатникова – кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник Томского государственного архитектурно-строительного университета.

Г. А. Мун – аспирант кафедры физики, химии и теоретической механики Томского государственного архитектурно-строительного университета; инженер, АО «ТомскНИПИ-нефть».

И. Г. Вовнова – старший преподаватель кафедры прикладной математики Томского государственного архитектурно-строительного университета.

В. А. Старенченко – доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой высшей математики Томского государственного архитектурно-строительного университета.

Д. Н. Черепанов – старший научный сотрудник, доцент кафедры высшей математики Томского государственного архитектурно-строительного университета.

References

1. Bell, J. F. (1984). Experimental basis of the mechanics of deformable solids II. Finite strains. M.: Nauka. P. 431. (In Russ.).

2. Berner, R. & Kronmuller, H. (1969). Plastic deformation of single crystals. Mir, Moscow. P. 272. (In Russ.).

3. Rybin, V. V., Malyshevsky, V. A. & Oleinik, V. N. (1976). Structures and transformations during plastic deformation of metals and alloys. *Phiz. Met. Met.*, 42(5), 1092–1098. (In Russ.).

4. Koneva, N. A. & Kozlov, E. V. (1990). Physical nature of the stages of plastic deformation. *Izv. Vuz. Fizika*, (2), 89–106. (In Russ.).

5. Solov'ev, A. N., Starenchenko, S. V. & Solov'eva, Yu. V. (2017). Evolution of dislocation substructures in nickel single crystals and deforma-

- tion mechanisms. *Russian Physics Journal*, 60(4), 638–644.
6. Starenchenko, V. A., Cherepanov, D. N., Solov'eva, Yu. V. & Popov, L. E. (2009). Generation and accumulation of point defects in FCC single crystals upon plastic strain. *Russian Physics Journal*, 52(4), 398–410.
7. Starenchenko, V. A., Cherepanov, D. N. & Selivanikova, O. V. (2014). Modeling of plastic deformation of crystalline materials on the basis of the concept of hardening and recovery. *Russian Physics Journal*, 57(2), 139–151.
8. Fakhrutdinova, Y. D., Solov'eva, Yu. V., Valyiskaya, L. A., Belov, N. N. & Starenchenko, V. A. (2012). Modeling of plastic deformation localization in terms of continuum mechanics. *Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedeniya (Basic Problems of Material Science (BPMS))*, 9(4), 527–533. (In Russ.).
9. Starenchenko, V. A., Lipatnikova, Ya. D., Solov'eva, Yu. V., Belov, N. N., Valyiskaya, L. A. & Vovnova, I. G. (2022). Current instability of hardening of deformable medium microelement as a reason of neck propagation. *Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedeniya (Basic Problems of Material Science (BPMS))*, 19(4), 454–462. (In Russ.).
10. Cherepanov, D. N., Vovnova, I. G., Solov'eva, Yu. V. & Starenchenko, V. A. (2023). Mathematical modeling of deformation substructures in FCC single crystals under moderate and megaplastic (severe) deformations. *Izv. Vuz. Fizika*, 66(8), 31–40. (In Russ.).
11. Cherepanov, D. N., Solov'eva Yu. V. & Starenchenko, V. A. (2024). Mechanisms of the formation and accumulation of misorientations in deformable metals and alloys. *Journal of Surface Investigation: X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques*, 8(1), 74–83.
12. Cherepanov, D. N., Starenchenko, V. A. & Solov'eva, Yu. V. (2023). Characteristics of the defective system of FCC-metallic materials under quasi-static loading. Computer software package. Patent office: Russia. Certificate of state registration of a computer program No.: RU 2023665354.
13. Yugov, N. T., Belov, N. N. & Yugov, A. A. (2010). Calculation of adiabatic unsteady flows in three-dimensional formulation (RANET-3). Computer software package. Federal Service for Intellectual Property, Patents and Trademarks. Certificate of state Registration of the computer program No. 2010611042.
14. Teplyakova, L. A., Lychagin, D. V. & Kozlov, E. V. (2002). Shear localization in deformed al single crystals with a compression axis orientation [001] *Fizicheskaya mezomekhanika*, 5(6), 49–55. (In Russ.).
15. Potekaev, A. I., Klopotov, A. A., Marchenko, E. S., Kopanitsa, D. G. & Ustinov, A. M. (2018). Changes in the stress-strain states of subsurface layers of steel during loading. *Russian Physics Journal*, 60(9), 1577–1585.
16. Friedel, J. (1964). Dislocations Pergamon press. USA. P. 491.

Information about the authors

Yu. V. Solov'eva – Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Assistant Professor, Head of the Department of Physic, Chemistry and Theoretical mechanics, Tomsk State University of Architecture and Building.

Y. D. Lipatnikova – Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Senior Researcher, Tomsk State University of Architecture and Building.

G. A. Mun – Graduate-Student, Tomsk State University of Architecture and Building; Engineer, JSC «TomskNIPIneft».

I. G. Vovnova – Senior-Lecturer of the Department of Applied Mathematics, Tomsk State University of Architecture and Building.

V. A. Starenchenko – Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor, Head of the Department of Higher Mathematics, Tomsk State University of Architecture and Building.

D. N. Cherepanov – Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Senior-Researcher, Assistant Professor of Department of Higher Mathematics, Tomsk State University of Architecture and Building.

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.
The authors declare that there is no conflict of interest.

Статья поступила в редакцию 09.04.2024; одобрена после рецензирования 17.05.2024; принята к публикации 27.05.2024.

The article was received by the editorial board on 09 Apr. 24; approved after reviewing 17 May 24; accepted for publication 27 May 24.

Научная статья

1.3.8. Физика конденсированного состояния (физико-математические науки)

УДК 538.911

doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2024.02.003

**МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ОБРАЗОВАНИЯ
ДИСЛОКАЦИЙ НА МЕЖФАЗНОЙ ГРАНИЦЕ В ЖЕЛЕЗЕ ПОСЛЕ ВОЗДЕЙСТВИЯ
ЛАЗЕРНОГО ИМПУЛЬСА****Артем Владимирович Маркидонов^{1†}, Михаил Дмитриевич Старостенков²,
Анастасия Николаевна Гостевская³, Дмитрий Анатольевич Лубяной⁴,
Павел Васильевич Захаров⁵**¹ Кузбасский гуманитарно-педагогический институт Кемеровского государственного университета, ул. Циолковского, 23, 654041, Новокузнецк, Россия² Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова, пр. Ленина, 46, 656038, Барнаул, Россия^{1,3} Сибирский государственный индустриальный университет, ул. Кирова, 42, 654006, Новокузнецк, Россия⁴ Филиал Кузбасского государственного технического университета им. Т.Ф. Горбачева в г. Прокопьевске, ул. Ноградская, 19А, 653039, Прокопьевск, Россия⁵ Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, ул. Политехническая, 29, 195251, Санкт-Петербург, Россия¹ markidonov_artem@mail.ru[†], <https://orcid.org/0000-0002-4566-528X>² genphys@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-6326-7613>³ lokon1296@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-7328-5444>⁴ lubjanoy@yandex.ru, <https://orcid.org/0000-0001-9773-3558>⁵ zakharovpvl@rambler.ru, <https://orcid.org/0000-0002-6410-1594>

Аннотация. Под воздействием лазерных импульсов возможны значительные изменения микроструктуры поверхностных слоев материалов, в частности под облученной поверхностью может наблюдаться протяженный дислокационный слой. При этом предлагаются различные механизмы образования дислокаций в данном случае. Очевидно, что более полное понимание первопричин возникновения дислокаций является актуальной задачей и ее решение может найти свое практическое применение. Сложность прямых наблюдений изучаемых процессов не позволяет проводить всестороннее исследование, поэтому в данном случае с успехом применяются численные эксперименты с применением методом компьютерного моделирования. В данной работе представлены результаты моделирования структурных изменений, возникающих при имитации воздействия на поверхность кристалла железа лазерных импульсов с различной плотностью энергии, и сопровождающихся образованием дислокаций. В основе модели лежит приближение, которое предполагает, что воздействие лазера приводит лишь к нагреву облученного материала. Для проведения исследования применялся метод молекулярной динамики с использованием потенциала межчастичного взаимодействия, рассчитанного в рамках метода погруженного атома. В ходе моделирования в расчетной ячейке возникла межфазная граница, которая является источником механических напряжений. Ее особенностью является наличие кривизны поверхности, приводящей к неравномерности распределения напряжений. Высказывается предположение, что именно благодаря этому создаются необходимые условия для образования дислокаций. В работе визуализирован процесс зарождения и последующего роста дислокаций, а также дислокационная реакция. Выполнены оценки изменения длины дислокаций при различных вариациях начальных условий и параметров моделирования. Возможно, результаты исследования найдут свое применение при описании процессов, протекающих при высокоэнергетическом воздействии на твердое тело.

Ключевые слова: модель, кристалл, поверхность, межфазная граница, дислокация.

Для цитирования: Маркидонов А.В., Старостенков М.Д., Гостевская А.Н., Лубяной Д.А., Захаров П.В. Молекулярно-динамическое моделирование образования дислокаций на межфазной границе в железе после воздействия лазерного импульса // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2024. Т. 21, № 2. С. 164–171. doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2024.02.003.

Original article

MOLECULAR DYNAMICS SIMULATION OF THE REDUCTION IN POROSITY OF THE SURFACE LAYER OF A BCC CRYSTAL CAUSED BY INFLUENCE OF LASER PULSES

Artem V. Markidonov^{1†}, Mikhail D. Starostenkov², Anastasia N. Gostevskaya³,
Dmitry A. Lubyanyoy⁴, Pavel V. Zakharov⁵

¹ Kuzbass Humanitarian Pedagogical Institute, Kemerovo State University, Tsiolkovsky Str., 23, Novokuznetsk, 654041, Russia

² I.I. Polzunov Altai State Technical University, Lenin Pr., 46, Barnaul, 656038, Russia

^{1,3} Siberian State Industrial University, Kirova Str., 42, Novokuznetsk, 654006, Russia

⁴ Branch of the Kuzbass State Technical University named after T.F. Gorbachev in Prokopyevsk, Nogradskaya Str., 19A, Prokopyevsk, 653039, Russia

⁵ Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, Politekhnicheskaya Str., 29, St. Petersburg, 195251, Russia

¹ markidonov_artem@mail.ru[†], <https://orcid.org/0000-0002-4566-528X>

² genphys@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-6326-7613>

³ lokon1296@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-7328-5444>

⁴ lubjanoy@yandex.ru, <https://orcid.org/0000-0001-9773-3558>

⁵ zakharovpvl@rambler.ru, <https://orcid.org/0000-0002-6410-1594>

Abstract. Under the influence of laser pulses, significant changes in the microstructure of the surface layers of materials are possible; in particular, an extended dislocation layer can be observed under the irradiated surface. At the same time, various mechanisms for the formation of dislocations in this case are proposed. Obviously, a more complete understanding of the root causes of the occurrence of dislocations is an urgent task and its solution can find its practical application. The complexity of direct observations of the processes under study does not allow for a comprehensive study, therefore, in this case, numerical experiments using computer modeling are successfully used. This paper presents the results of modeling structural changes that occur when simulating the impact of laser pulses with different energy densities on the surface of an iron crystal, and which are accompanied by the formation of dislocations. The model is based on an approximation that assumes that laser exposure only leads to heating of the irradiated material. To carry out the study, the molecular dynamics method was used using the interparticle interaction potential calculated within the framework of the embedded atom method. During the simulation, an interphase boundary appeared in the computational cell, which is a source of mechanical stress. Its peculiarity is the presence of surface curvature, leading to uneven stress distribution. It is suggested that it is precisely due to this that the necessary conditions for the formation of dislocations are created. The work visualizes the process of nucleation and subsequent growth of dislocations, as well as the dislocation reaction. The changes in the length of dislocations have been assessed for various variations of initial conditions and modeling parameters. Perhaps the results of the study will find their application in describing the processes that occur during high-energy exposure to a solid body.

Keywords: model, crystal, surface, interfacial boundary, dislocation.

For citation: Markidonov, A. V., Starostenkov, M. D., Gostevskaya, A. N., Lubyanyoy, D. A. & Zakharov, P. V. Molecular dynamics simulation of the reduction in porosity of the surface layer of a bcc crystal caused by influence of laser pulses. *Fundamental'nye problemy sovremennoyo materialovedeniya (Basic Problems of Material Science (BPMS))*, 21(2), 164–171. (In Russ.). doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2024.02.003.

Введение

На сегодняшний день лазерное излучение применяется во многих технологиях обработки и модификации поверхности материалов благодаря возможности локализации воздействия и высокой скорости нагрева участка мишени. Тем не менее, кроме очевидных преимуществ данная технология может приводить и к ряду нежелательных явлений в обрабатываемом материале, например, образованию высокой концентрации структурных дефектов. Несмотря на

то, что данное явление общеизвестно, до сих пор остаются вопросы, относящиеся к механизмам образования, в частности, дислокаций. Традиционные представления об их генерации заключаются в образовании высокой концентрации точечных дефектов в поврежденном поверхностном слое, которые в дальнейшем кластеризуются, образуют вакансионные диски, трансформирующиеся путем схлопывания в дислокационные петли [1]. Кроме того, в качестве источника дислокационных петель рассматриваются увеличивающиеся в объеме об-

ласти расплавленного материала, и при этом рост петель продолжается даже после кристаллизации расплава [2]. Некоторые исследователи указывают на образование дислокаций не после релаксации остаточных термоупругих напряжений, а непосредственно в момент воздействия импульса, и которое обусловлено лазерно-индуцированной волной напряжений [3]. Таким образом, можно сделать вывод о разнообразии механизмов генерации дислокаций, которые в том числе зависят и от длительности воздействия лазерного импульса.

Ранее авторами в работах [4-6] методом молекулярной динамики были рассмотрены структурные изменения, происходящие в поверхностном слое монокристалла железа при импульсном лазерном воздействии. Было обнаружено, что в жидкой фазе формируются пустоты, которые могут сохраняться в материале и после кристаллизации. Этот процесс можно рассматривать как начальную стадию структурных изменений, происходящих в кристалле в процессе релаксации после воздействия лазерного импульса на поверхность. Целью данной работы является исследование изменений, происходящих на более поздней стадии релаксации.

Материалы, методы и методики исследования

Молекулярно-динамическая модель представляет собой прямоугольную расчетную ячейку, имитирующую монокристалл железа, и в которой оси координат соответствуют ортогональным кристаллографическим направлениям $[111]$, $[1\bar{1}0]$ и $[11\bar{2}]$. Параметры потенциала межчастичного взаимодействия, определенного в рамках модели ЕАМ, были заимствованы из работы [7]. Для решения дифференциальных уравнений движения применялся скоростной алгоритм Верле с временным шагом 1 фс. Вычисления проводились с использованием свободно распространяемого пакета молекулярно-динамического моделирования XMD [8].

В основе применяемого в данной работе подхода для моделирования воздействия пикосекундного лазерного импульса лежит тепловая модель, которая предполагает, что воздействие лазерного излучения на мишень сводится лишь к ее термическому нагреву. Методика проведения вычислительного эксперимента изложена в работе [4] и на первом этапе заключается в не-

равномерном нагреве расчетной ячейки в течение 10 пс в соответствии с заданным теоретическим распределением, при котором температура убывает в направлении, перпендикулярном свободной поверхности. Для создания поверхности применялись свободные граничные условия вдоль одной из осей расчетной ячейки, в то время как вдоль остальных осей использовались периодические граничные условия. Основным варьируемым параметром имитируемого лазерного излучения, который в итоге влияет на величину температуры, в данном вычислительном эксперименте является плотность энергии q . На втором этапе в течение 90 пс температура кристалла понижается также в соответствии с заданным распределением. В ходе данных этапов проводится анализ структуры кристалла при помощи различных алгоритмов, которые будут указаны ниже. Визуализация исследуемой структуры осуществлялась при помощи пакета OVITO [9].

Результаты и их обсуждение

Рассмотрим структурные изменения, происходящие в моделируемом кристалле в ходе вычислительного эксперимента, при создании поверхности вдоль направления $[1\bar{1}0]$. На этапе охлаждения расчетной ячейки наблюдается процесс кристаллизации, сопровождающийся образованием краевой дислокации с вектором Бюргерса $a/2 \langle 111 \rangle$ (где a – параметр решетки), длина которой увеличивается по мере движения фронта кристаллизации, с последующей трансформацией в петлю (см. рис.1). На рисунке 1 представлены атомы, которые по методу углов и связей Экланда-Джонса [10] не идентифицированы как располагающиеся в узлах ОЦК решетки, и в большей степени, которые могут быть рассмотрены как относящиеся к жидкой фазе. Для идентификации дислокационной линии использовался алгоритм, изложенный в работе [11]. Также на рисунке представлено изображение межфазной границы в виде поверхности, построенной с применением метода триангуляционной сетки.

При моделировании кристалла, имеющего поверхность вдоль направления $[111]$, в расчетной ячейке было идентифицировано две полные дислокации $a/2 \langle 111 \rangle$ с последующим их объединением и образованием дислокации $a \langle 100 \rangle$, что энергетически выгодно (см. рис.2).

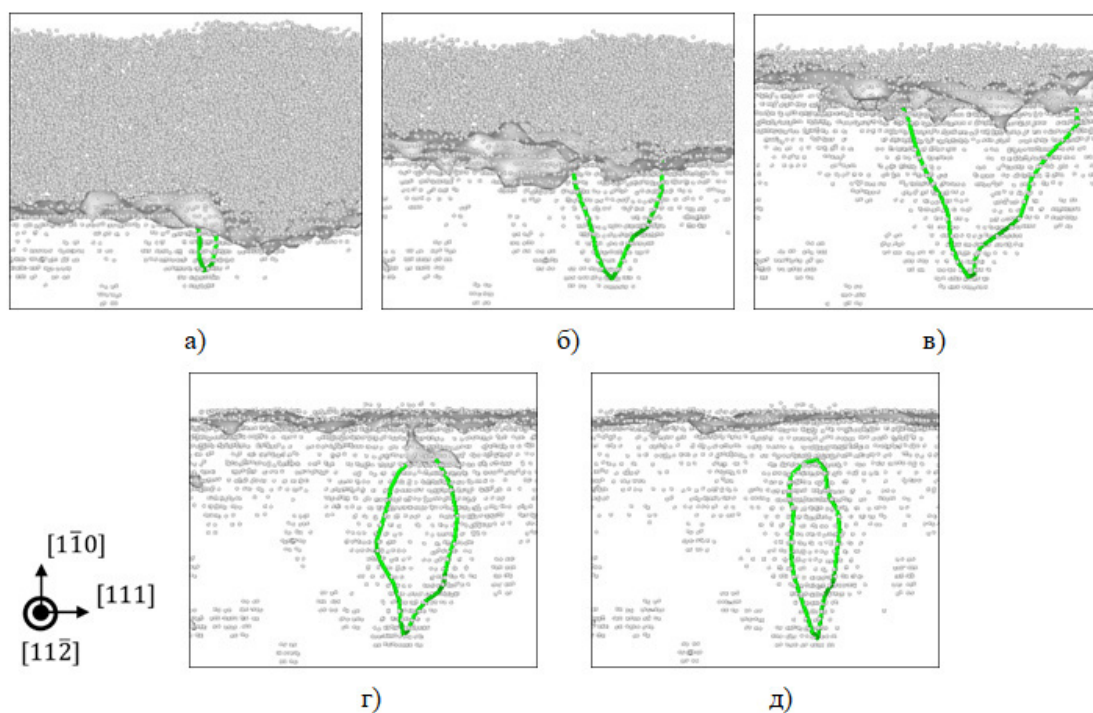


Рис.1. Визуализация образования дислокационной петли при моделируемой плотности энергии $q = 4 \text{ МВт/см}^2$. Представлены фрагменты расчетной ячейки через 32 (а), 47 (б), 62 (в), 77 (г) и 90 (д) пс

Fig.1. Visualization of the formation of a dislocation loop at a simulated energy density $q = 4 \text{ MW/cm}^2$. Fragments of the computational cell are presented through 32 (a), 47 (b), 62 (c), 77 (d) and 90 (e) ps

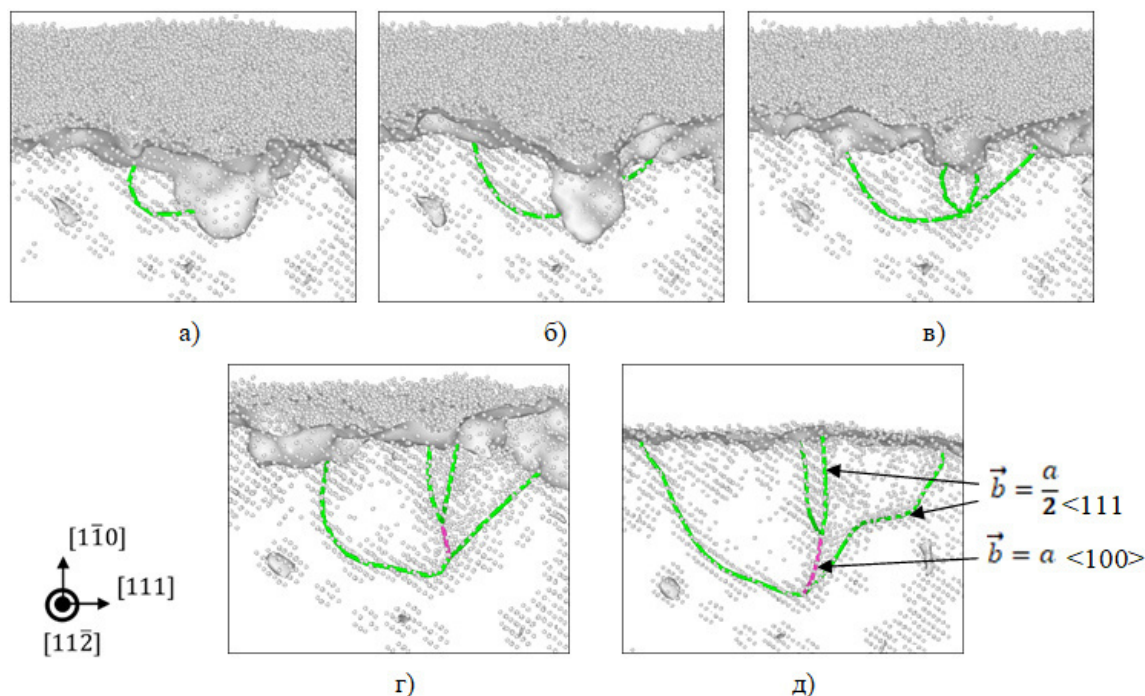


Рис.2. Визуализация образования дислокаций при моделируемой плотности энергии $q = 3,5 \text{ МВт/см}^2$. Представлены фрагменты расчетной ячейки через 40 (а), 43 (б), 45 (в), 56 (г) и 80 (д) пс.

Цветовая дифференциация дислокационных линий выполнена в соответствии с вектором Бюргерса

Fig.2. Visualization of dislocation formation at a simulated energy density $q = 3.5 \text{ MW/cm}^2$. Fragments of the computational cell are presented through 40 (a), 43 (b), 45 (c), 56 (d) and 80 (e) ps. Color differentiation of dislocation lines is carried out in accordance with the Burgers vector

При создании поверхности вдоль направления $[1\bar{1}2]$ образование дислокаций зафиксировано не было.

В обоих рассмотренных случаях дислокации $a/2 \langle 111 \rangle$ зарождаются на межфазной границе и скользят в плоскостях $\{112\}$ и $\{110\}$. Но в численном эксперименте, результаты которого представлены на рис.1, вектор Бюргера дислокации коллинеарен вектору, соответствующему одному из ребер расчетной ячейки,

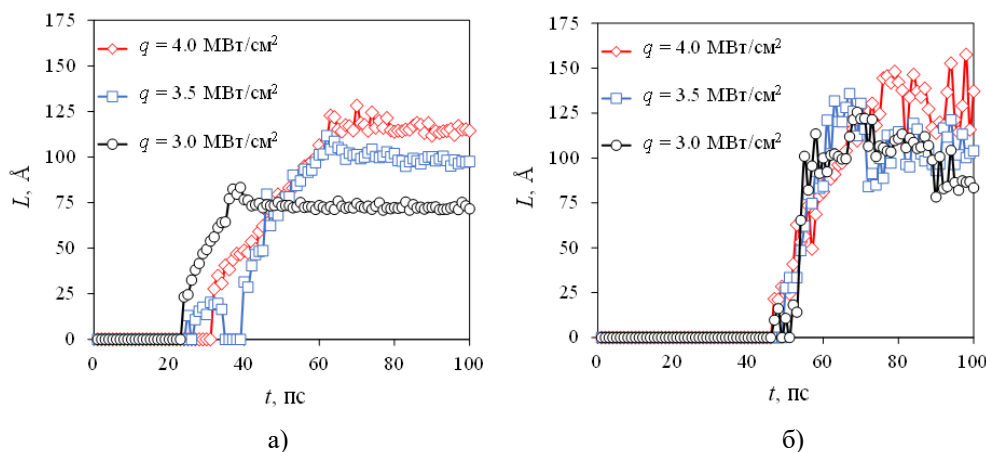


Рис.3. Изменение длины дислокационных линий в расчетной ячейке в ходе численного эксперимента при различной величине плотности энергии q . При моделировании создавалась поверхность кристалла вдоль направления $[1\bar{1}0]$ (а) и $[111]$ (б)

Fig.3. Change in the length of dislocation lines in a computational cell during a numerical experiment at different energy densities q . During the simulation, the crystal surface was created along the $[1\bar{1}0]$ (a) and $[111]$ (b) directions

Возможность образования дислокации обусловлено имеющимся недостатком атомов для выстраивания идеального атомного ряда в процессе кристаллизации, так как часть частиц была эжектирована со свободной поверхности на этапе нагревания. Этим объясняется увеличение длины дислокационной линии при возрастании плотности энергии q , так как при этом увеличивается и число оторванных частиц. Тем не менее, для создания необходимых условий к образованию дислокации необходимо наличие механических напряжений. В расчетной ячейке при проведении численного эксперимента присутствуют как температурные напряжения, обусловленные применением периодических граничных условий, так и межфазные напряжения, девиаторный компонент тензора которых создает поверхностное натяжение межфазной границы. Образование дислокаций, по-видимому, возникает из-за неравномерности распределения касательных напряжений в меж-

что в рамках модели упрощает последующие оценки условий, необходимых для зарождения дислокации.

Общая протяженность формирующихся дислокационных линий увеличивается при возрастании плотности энергии имитируемого лазерного импульса, и, следовательно, увеличении температуры расчетной ячейки (см. рис.3).

фазном слое, обусловленной его кривизной. Именно искривление межфазной границы может приводить к формированию концентраторов напряжений [12-14], и как следует из рисунков 1 и 2 именно в области наибольшей кривизны начинают образовываться дислокации, что способствует релаксации касательных напряжений (см. рис.4).

Расчет напряжений, результаты которого представлены на рис.4, проводился для модели, с созданной поверхностью вдоль направления $[1\bar{1}0]$ (см. рис.1), так как в данном случае, как уже было сказано ранее, вектор Бюргера коллинеарен оси X . Вычисления осуществлялись для области расчетной ячейки, которая охватывает одновременно обе фазы. Пока доминирующей фазой является жидкость, касательное напряжение равно нулю. По мере кристаллизации напряжение начинает расти, а затем, с момента образования дислокации, наблюдается его снижение.

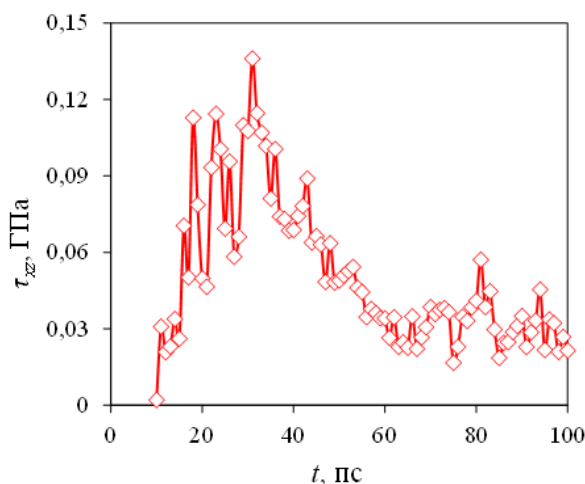


Рис.4. Изменение касательных напряжений в расчетной ячейке в ходе вычислительного эксперимента на этапе охлаждения

Fig.4. Change in tangential stresses in a computational cell during a computational experiment at the cooling stage

На рис.4 приведены изменения касательных напряжений τ_{xz} при моделируемой плотности энергии $q = 4$ МВт/см² как наиболее наглядные. При меньших рассматриваемых значениях q релаксация напряжений происходит не так интенсивно и в конце вычислительного эксперимента напряжения имеют большие значения (0,084 и 0,075 ГПа при $q = 3$ и 3,5 МВт/см² соответственно).

Напряжения, необходимые для зарождения дислокаций в численном эксперименте, результаты которого представлены на рис.2, оценить при помощи выбранного пакета моделирования не представляется возможным, так как при вычислении компонентов тензора напряжений не допускается поворот координатных осей.

При проведении численных экспериментов с различной q кривизна формирующейся межфазной границы также оказывается различна. Так как выделение границы осуществляется с применением метода триангуляционной сетки, то можно приближенно выполнить количественное сопоставление ее кривизны при различных условиях проведения моделирования. Вначале определим интервал изменения координат точек границы вдоль оси, перпендикулярной поверхности, имеющий единичную длину. Для этого вычислялись положения точек и определялись наибольшие и наименьшие значения, которые определяли границы искомого интервала значений. Далее, определяя положение точек на этом интервале, вычислялось их среднее удаление от его левой границы. Полученное

значение, отнесенное к длине интервала, принималась за меру кривизны межфазной границы (обозначим как γ). Для численного эксперимента с моделируемой плотностью энергии $q = 3$ МВт/см² расчетная величина γ получилась равной 0,099, а для $q = 4$ МВт/см² – $\gamma = 0,105$, что говорит о большей кривизне границы во втором случае. Изменение γ вдоль оси X расчетной ячейки представлено на рис.5.

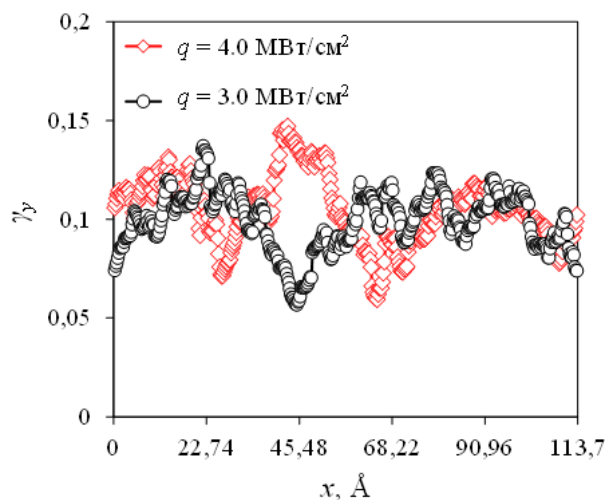


Рис.5. Изменение меры кривизны межфазной границы вдоль оси X в момент окончания этапа нагрева расчетной ячейки

Fig.5. Change in the measure of curvature of the interface along the X axis at the end of the heating stage of the computational cell

Заключение

Таким образом, в ходе проведенного численного эксперимента продемонстрировано образование дислокаций, при этом на данный процесс оказывает влияние как выбор кристаллографической плоскости, используемой в качестве свободной поверхности для моделируемого кристалла, так и величина плотности энергии имитируемого лазерного импульса, что оказывает влияние на температуру расчетной ячейки. Высказано предположение, что образованию дислокаций способствует кривизна межфазной границы, приводящей к неравномерности распределения возникающих касательных напряжений.

Список литературы

1. Yang Z., Watanabe S. Dislocation loop formation under various irradiations of laser and/or electron beams // Acta Materialia. 2013. V. 61, N 8. P. 2966–2972.

2. Volosyuk M.A. Mechanisms of micro-voids formation caused by optical breakdown in KCl single crystals under laser emission // Вопросы атомной науки и техники. 2014. Т. 92, № 4. С. 55–59.
3. Xie J., Yan J., Zhu D., He G. Atomic-level insight into the formation of subsurface dislocation layer and Its effect on mechanical properties during ultrafast laser micro/nano fabrication // Advanced Functional Materials. 2022. V. 32, N 15. 2108802.
4. Маркидонов А.В., Старостенков М.Д., Гостевская А.Н., Лубяной Д.А., Захаров П.В. Моделирование структурных изменений поверхностного слоя ОЦК-металла при кратковременном высокоэнергетическом воздействии методом молекулярной динамики // Металловедение и термическая обработка металлов. 2022. № 5(803). С. 16–21.
5. Маркидонов А.В., Гостевская А.Н., Громов В.Е., Старостенков М.Д., Зыков П.А. Моделирование структурных изменений в поверхностном слое деформированного ОЦК-кристалла при кратковременном внешнем высокоинтенсивном воздействии // Деформация и разрушение материалов. 2022. № 8. С.2–8.
6. Маркидонов А.В., Старостенков М.Д., Гостевская А.Н., Лубяной Д.А., Захаров П.В. Молекулярно-динамическое моделирование уменьшения пористости поверхностного слоя ОЦК-кристалла, вызванной воздействием лазерных импульсов // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2023. Т. 20, № 2. С. 168–175.
7. Mendeleev M.I., Han S., Srolovitz D.J., Ackland G.J., Sun D.Y., Asta M. Development of new interatomic potentials appropriate for crystalline and liquid iron // Philosophical Magazine. 2003. V. 83, N 35. P. 3977–3994.
8. XMD – Molecular Dynamics Program: [Электронный ресурс] – Режим доступа <https://xmd.sourceforge.net>. Дата обращения: 04.03.2024.
9. Stukowski A. Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO – the Open Visualization Tool // Modelling and Simulation Materials Science and Engineering. 2010. V. 18. 015012.
10. Ackland G.J., Jones A.P. Applications of local crystal structure measures in experiment and simulation // Physical Review B. 2006. V. 73, N 5. 054104.
11. Stukowski A., Albe K. Extracting dislocations and non-dislocation crystal defects from atomistic simulation data // Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering. 2010. V. 18, N 8. 085001.
12. Готовцев В.М., Шатунов А.Г., Румянцев А.Н., Сухов В.Д. Механизм формирования межфазных напряжений // Современные наукоемкие технологии. 2012. № 11. С. 45–49.
13. Греков М.А., Макаров С.Н. Концентрация напряжений на периодически искривленной межфазной поверхности // Вестник Санкт-Петербургского университета. Прикладная математика. Информатика. Процессы управления. 2008. № 1. С. 25–31.
14. Игнатъев А.А., Готовцев В.М. Модель контактного взаимодействия жидкой и твердой фаз // Транспортные сооружения. 2023. Т. 10, № 2. С. 1–22.

Информация об авторах

А. В. Маркидонов – доктор физико-математических наук, доцент, заведующий кафедрой информатики и вычислительной техники им. В.К. Буторина Кузбасского гуманитарно-педагогического института Кемеровского государственного университета; профессор кафедры прикладной математики и информатики Сибирского государственного индустриального университета.

М. Д. Старостенков – доктор физико-математических наук, главный научный сотрудник, профессор Алтайского государственного технического университета им. И.И. Ползунова.

А. Н. Гостевская – аспирант кафедры естественнонаучных дисциплин им. проф. В.М. Финкеля Сибирского государственного индустриального университета.

Д. А. Лубяной – кандидат технических наук, доцент кафедры технологии и комплексной механизации горных работ филиала Кузбасского государственного технического университета им. Т.Ф. Горбачева в г. Прокопьевске.

П. В. Захаров – доктор физико-математических наук, доцент, профессор кафедры физики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого.

References

1. Yang, Z. & Watanabe, S. (2013). Dislocation loop formation under various irradiations of laser and/or electron beams. *Acta Materialia*, 61(8), 2966–2972.
2. Volosyuk, M. A. (2014). Mechanisms of micro-voids formation caused by optical breakdown in KCl single crystals under laser emission. *Issues of atomic science and technology*, 92(4), 55–59.

3. Xie, J., Yan, J., Zhu, D. & He, G. (2022). Atomic-level insight into the formation of subsurface dislocation layer and Its effect on mechanical properties during ultrafast laser micro/nano fabrication. *Advanced Functional Materials*, 32(15), 2108802.
4. Markidonov, A. V., Starostenkov, M. D., Gostevskaya, A. N., Lubyanyoy, D. A. & Zakharov, P. V. (2022). Modeling of structural changes in the surface layer of a bcc metal under short-term high-energy exposure using the molecular dynamics method. *Metal Science and Thermal Treatment of Metals*, 803(5), 16–21. (In Russ.).
5. Markidonov, A. V., Gostevskaya, A. N., Gromov, V. E., Starostenkov, M. D. & Zykov, P. A. (2022). Modeling of structural changes in the surface layer of a deformed bcc crystal under short-term external high-intensity influence. *Deformation and destruction of materials*, (8), 2–8. (In Russ.).
6. Markidonov, A. V., Starostenkov, M. D., Gostevskaya, A. N., Lubyanyoy, D. A. & Zakharov, P. V. (2023). Molecular dynamics modeling of the reduction in the porosity of the surface layer of a bcc crystal caused by the action of laser pulses. *Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedeniya (Basic Problems of Material Science (BPMS))*, 20(2), 168–175. (In Russ.).
7. Mendeleev, M. I., Han, S., Srolovitz, D. J., Ackland, G. J., Sun, D. Y. & Asta, M. (2003). Development of new interatomic potentials appropriate for crystalline and liquid iron. *Philosophical Magazine*, 83(35), 3977–3994.
8. XMD – Molecular Dynamics Program: [Electronic resource] – Access mode <https://xmd.sourceforge.net>. Date of the application: 04.03.2024.
9. Stukowski, A. (2010). Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO – the Open Visualization Tool. *Modeling and Simulation Materials Science and Engineering*, (18), 015012.
10. Ackland, G. J. & Jones, A. P. (2006). Applications of local crystal structure measures in experiment and simulation. *Physical Review B*, 73(5), 054104.
11. Stukowski, A. & Albe, K. (2010). Extracting dislocations and non-dislocation crystal defects from atomistic simulation data. *Modeling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 18(8), 085001.
12. Gotovtsev, V. M., Shatunov, A. G., Rumyantsev, A. N. & Sukhov, V. D. (2012). Mechanism of formation of interphase stresses. *Modern science-intensive technologies*, (11), 45–49. (In Russ.).
13. Grekov, M. A. & Makarov, S. N. (2008). Stress concentration on a periodically curved interphase surface. Bulletin of St. Petersburg University. Applied Mathematics. *Computer science. Management processes*, (1), 25–31. (In Russ.).
14. Ignatiev, A. A. & Gotovtsev, V. M. (2023). Model of contact interaction of liquid and solid phases. *Transport structures*, 10(2), 1–22. (In Russ.).

Information about the authors

A. V. Markidonov – Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Associate Professor, Head of the Department of Informatics and Computer Engineering named after V.K. Butorin, Kuzbass Humanitarian Pedagogical Institute, Kemerovo State University; Professor of the Department of Applied Mathematics and Informatics, Siberian State Industrial University.

M. D. Starostenkov – Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Chief Researcher, Professor, I.I. Polzunov Altai State Technical University.

A. N. Gostevskaya – Post-Graduate Student of the Department of Natural Sciences named after prof. V.M. Finkel, Siberian State Industrial University.

D. A. Lubyanyoy – Candidate of Technical Sciences, Associate Professor of the Department of Technology and Integrated Mechanization of Mining, Branch of the Kuzbass State Technical University named after T.F. Gorbachev in Prokopyevsk.

P. V. Zakharov – Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Associate Professor, Professor of the Department of Physics, St. Petersburg Polytechnic University.

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.
The authors declare that there is no conflict of interest.

Статья поступила в редакцию 12.04.2024; одобрена после рецензирования 06.05.2024; принята к публикации 20.05.2024.

The article was received by the editorial board on 12 Apr. 24; approved after reviewing 06 May 24; accepted for publication 20 May 24.

Научная статья
1.3.8. Физика конденсированного состояния (физико-математические науки)
УДК 539.3
doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2024.02.004

ОСОБЕННОСТИ НАКОПЛЕНИЯ И ВОЗВРАТА ДЕФОРМАЦИИ ПРИ МНОГОКРАТНОМ ЦИКЛИРОВАНИИ В СПЛАВАХ С ПАМЯТЬЮ ФОРМЫ

**Владимир Александрович Плотников^{1†}, Анна Васильевна Гусева²,
Александр Сергеевич Грязнов³, Сергей Сергеевич Пругов⁴**

^{1, 2, 4} Алтайский государственный университет, пр. Ленина, 61, 656049, Барнаул, Россия
³ Алтайский государственный медицинский университет, ул. Ленина, 40, 656038, Барнаул, Россия
¹ plotnikov@phys.asu.ru[†], <https://orcid.org/0000-0001-7051-1082>
² schannavac@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-1671-1304>
³ gryaznov-as@yandex.ru, <https://orcid.org/0000-0003-0413-907X>
⁴ prugovs@mail.ru

Аннотация. Проведены исследования процесса накопления и возврата деформации при многократном циклировании мартенситных превращений в никелиде титана в условиях механического нагружения. Отмечено, что кроме обратимой деформации в каждом цикле отмечается накопление остаточной деформации. При этом, чем выше внешняя нагрузка, тем меньше величина обратимой деформации из-за накопления большой величины остаточной деформации. Накопление остаточной деформации свидетельствует о блокировке мартенситных кристаллов локальными полями механических напряжений (стабилизация мартенситной фазы), сформированными скоплениями полных дислокаций как результат фазового наклепа в сплаве на основе никелида титана. Эти мартенситные кристаллы уже не участвуют в циклах прямого и обратного превращения. Остаточная деформация ограничивает обратимый деформационный ресурс в условиях термомеханического нагружения.

Ключевые слова: никелид титана, термоупругие мартенситные превращения, эффект памяти формы, деформация.

Для цитирования: Плотников В.А., Гусева А.В., Грязнов А.С., Пругов С.С. Особенности накопления и возврата деформации при многократном циклировании в сплавах с памятью формы // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2024. Т. 21, № 2. С. 172–178. doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2024.02.004.

Original article

FEATURES OF ACCUMULATION AND RETURN OF DEFORMATION DURING MULTIPLE CYCLING IN ALLOYS WITH SHAPE MEMORY

Vladimir A. Plotnikov^{1†}, Anna V. Guseva², Alexander S. Gryaznov³, Sergey S. Prugov⁴

^{1, 2, 4} Altai State University, Lenin Pr., 61, Barnaul, 656049, Russia
³ Altai State Medical University, Lenin Str., 40, Barnaul, 656038, Russia
¹ plotnikov@phys.asu.ru[†], <https://orcid.org/0000-0001-7051-1082>
² schannavac@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-1671-1304>
³ gryaznov-as@yandex.ru, <https://orcid.org/0000-0003-0413-907X>
⁴ prugovs@mail.ru

Abstract. Studies of the process of accumulation and return of deformation during repeated cycling of martensitic transformations in titanium nickelide under mechanical loading conditions have been carried out. It is noted that in addition to reversible deformation, the accumulation of residual deformation is noted in each cycle. At the same time, the higher the external load, the smaller the amount of reversible deformation due to the accumulation of

a large amount of residual deformation. The accumulation of residual deformation indicates the blocking of martensitic crystals by local fields of mechanical stresses (stabilization of the martensitic phase) formed by clusters of complete dislocations as a result of phase hardening in an alloy based on titanium nickelide. These martensitic crystals no longer participate in the cycles of direct and reverse transformation. Residual deformation limits the reversible deformation life under thermomechanical loading conditions.

Keywords: titanium nickelide, thermoelastic martensitic transformations, shape memory effect, deformation.

For citation: Plotnikov, V. A., Guseva, A. V., Gryaznov, A. S. & Prugov, S. S. (2024). Features of accumulation and deformation during multiple cecling in alloys with shape memory. *Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedenia (Basic Problems of Material Science (BPMS))*, 21(2), 172–178. (In Russ.). doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2024.02.004.

Введение

Сплавы на основе никелида титана обладают уникальными свойствами, такими как эффект памяти формы и сверхэластичность, которые связаны с мартенситным механизмом накопления и возврата деформации в цикле термоупругих мартенситных превращений. В основе мартенситного механизма накопления и возврата деформации лежит движение мартенситных границ, представляющее собой кооперативный переход атомов из исходной фазы в конечную [1]. Этот согласованный (кооперативный) процесс перемещения атомов определяет кристаллографический обратимый деформационный ресурс, величина которого может достигать 27 %. Однако в экспериментах достигнутая величина обратимой деформации значительно ниже и составляет 9-10 %, причем наблюдается заметный недовозврат деформации [2]. Рассчитанное в [2] максимальное значение обратимой деформации обеспечено фактически деформацией формы и деформацией решетки (в работе [2] рассмотрены четыре вклада, но их можно свести к двум).

Стоит отметить, что эффект сверхэластичности будет наблюдаться при деформировании никелида титана в интервале температур прямого мартенситного превращения и разгрузке в интервале температур обратного превращения. В этом случае, при нагружении происходит накопление деформации, а при разгрузке – её возврат [3].

При нагреве материала в интервале температур обратного превращения, который был деформирован в мартенситном состоянии, будет происходить процесс возврата деформации, то есть реализуется однократный эффект памяти формы. Если осуществлять термоциклирование материала в условиях внешнего нагружения, то помимо накопления деформации при прямом $B2 \rightarrow B19'$ и ее возврата при обратном превращении будет наблюдаться ее недовоз-

врат [4]. Этот недовозврат деформации может быть связан с эффектами фазового наклепа и стабилизацией мартенситной фазы [5].

Как уже было сказано, в ходе мартенситных превращений в условиях действия внешнего напряжения происходит накопление и возврат деформации. Эта деформация (мартенситная деформация) проявляется тем отчетливее, чем менее выражены сопутствующие процессы, не связанные с самой природой мартенситных превращений (такие процессы как: пластическая деформация (пластическая релаксация напряжений)). В отличие от мартенситной деформации, которая полностью обратима в результате изотермической разгрузки или нагрева до температуры окончания обратного мартенситного превращения, пластическая деформация необратима и наследуется в цикле мартенситных превращений [6].

Целью работы является исследование закономерностей накопления и возврата деформации в ходе циклирования термоупругих мартенситных превращений в никелиде титана в условиях внешнего механического нагружения. Циклирование мартенситных превращений путем осуществления термоциклов в условиях внешней нагрузки образца никелида титана фактически является осуществлением термодинамических циклов, позволяющих проследить эволюцию структурно-фазовых состояний при изменении температуры и механического напряжения. С другой стороны, накопление и возврат деформации в силовых элементах на основе никелида титана требует учета особенностей реализации эффекта памяти формы в этих устройствах.

Материалы и методы

Для исследования деформационных особенностей был выбран образец сплава $Ti_{50}Ni_{49.9}Mo_{0.1}$ (геометрия образца: $h = 50$ мм, $a = 2,5$ мм, $b = 1$ мм), где h – длина образца, a –

высота, b – ширина). С образцом проводилось четыре серии экспериментов до 11 температурных циклов в интервале температур, содержащем температурный интервал мартенситных превращений. Перед каждым экспериментом образец отжигался при температуре 650 °С для приведения его в исходное структурное состояние. После отжига образец охлаждался до комнатной температуры и затем происходил нагрев образца до 200 °С и его нагружение для создания сдвиговой деформации и последующее охлаждение до комнатной температуры. То есть охлаждение образца до комнатной температуры под нагрузкой являлось началом первого цикла, в котором осуществлялось прямое $B2 \rightarrow B19'$ превращение. Последующий нагрев до 200 °С завершал первый цикл, в ходе которого осуществлялось $B19' \rightarrow B2$ превращение.

Результаты и их обсуждение

На рисунке 1 показан процесс накопления и возврата деформации во втором цикле термоупругих мартенситных превращений в $Ti_{50}Ni_{49,9}Mo_{0,1}$ при внешнем напряжении 86 МПа. Как видно, в полупериоде охлаждения от 200 °С идет процесс накопления деформации, обусловленный превращением $B2 \rightarrow B19'$. В полупериоде нагрева образца наблюдается возврат деформации, который происходит за счет обратного мартенситного превращения $B19' \rightarrow B2$. При этом величина обратимой деформации (3) меньше деформации, накапливаемой в полупериоде охлаждения (2) на величину прироста остаточной деформации (4).

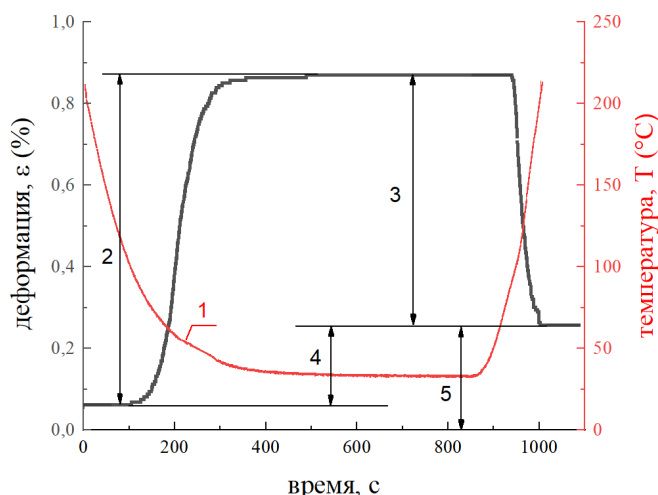


Рис.1. Накопление и возврат деформации в цикле термоупругих мартенситных превращений в $Ti_{50}Ni_{49,9}Mo_{0,1}$ при внешнем напряжении 86 МПа: 1 – температура в цикле охлаждение–нагрев образца; 2 – накопление деформации при охлаждении образца; 3 – возврат деформации при нагреве образца (обратимая деформация); 4 – прирост остаточной деформации в цикле; 5 – остаточная деформация, накопленная в циклах превращений

Fig.1. Accumulation and return of deformation in the cycle of the martensitic transformations in $Ti_{50}Ni_{49,9}Mo_{0,1}$ at an stress of 86 МПа: 1 – temperature in the cooling-heating cycle of the sample; 2 – accumulation of deformation during cooling of the sample; 3 – return of deformation during heating of the sample (reversible deformation); 4 – increase in residual deformation in the cycle; 5 – residual deformation accumulated in transformation cycles

Таким образом, в каждом цикле наблюдается накопление остаточной деформации (5), величина которой растёт от цикла к циклу на величину прироста деформации 4 в цикле.

Результаты обработки серий экспериментов представлены на рисунке 2 как зависимости деформационных мод от номера цикла.

Как видно из рисунка 2, при постоянном приложенном механическом напряжении в ходе цикла охлаждение-нагрев происходит увеличение остаточной деформации. При низких

механических напряжениях обратимая деформация сначала растёт, а затем снижается, пройдя точку максимума (цикл 5 на рис.2). При больших напряжениях наблюдается только снижение обратимой деформации, остаточная – монотонно растёт в серии циклов. Можно отметить тенденцию в поведении обратимой и остаточной деформаций – и обратимая деформация и остаточная деформация выходят на насыщение при многократном циклировании мартенситных превращений. Также стоит отме-

титель, что при низких механических нагрузках наблюдается преобладание обратимой деформации над остаточной деформацией, напротив,

в случае высоких механических нагрузок остаточная деформация превосходит обратимую деформацию.

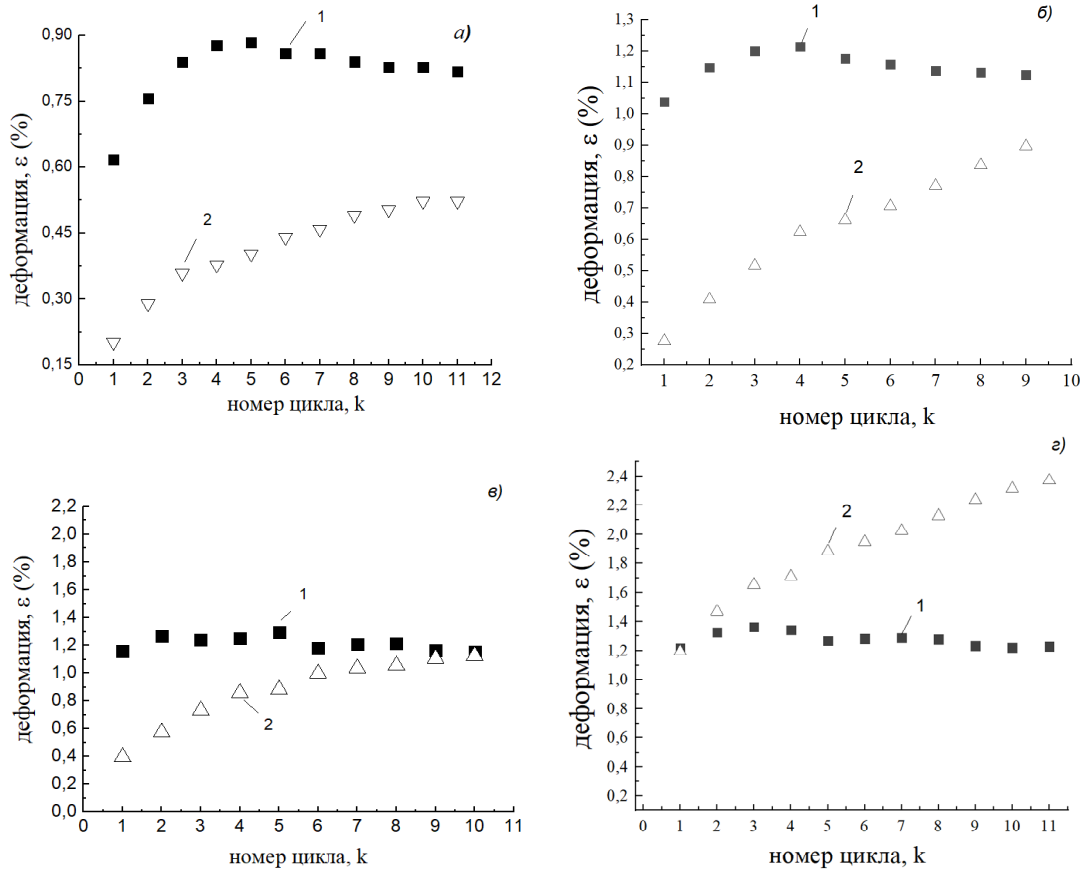
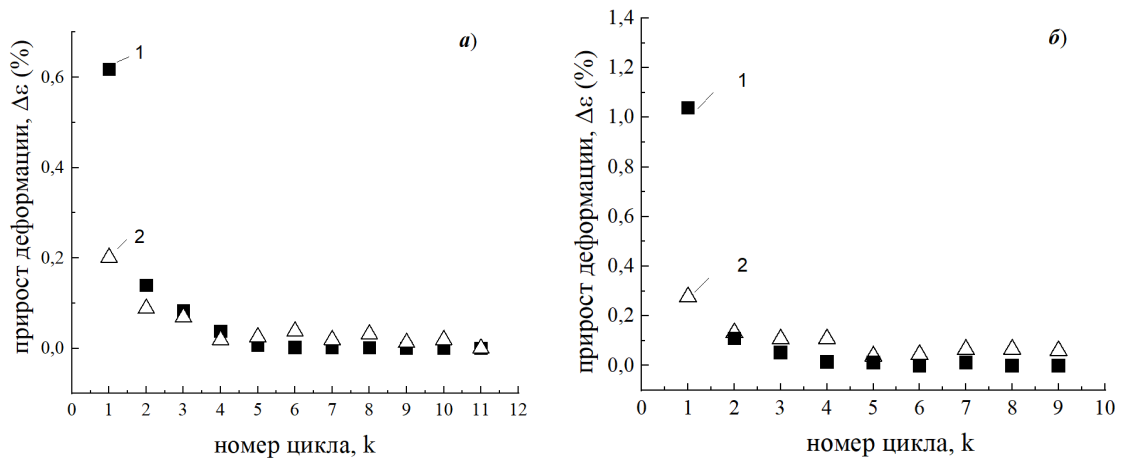


Рис.2. Зависимость деформации сплава Ti₅₀Ni_{49.9}Mo_{0.1} от номера цикла: а) при 86 МПа; б) при 119 МПа; в) при 152 МПа; г) при 252 МПа: 1 – обратимая деформация, 2 – остаточная деформация

Fig.2. Dependence of the deformation of Ti₅₀Ni_{49.9}Mo_{0.1} alloy on the cycle number: а) at 86 MPa; б) at 119 MPa; в) at 152 MPa; г) at 252 MPa: 1 – reversible deformation, 2 – residual deformation

На рисунке 3 показана зависимость прироста деформации сплава Ti₅₀Ni_{49.9}Mo_{0.1} от но-

мера цикла термоупругих мартенситных превращений.



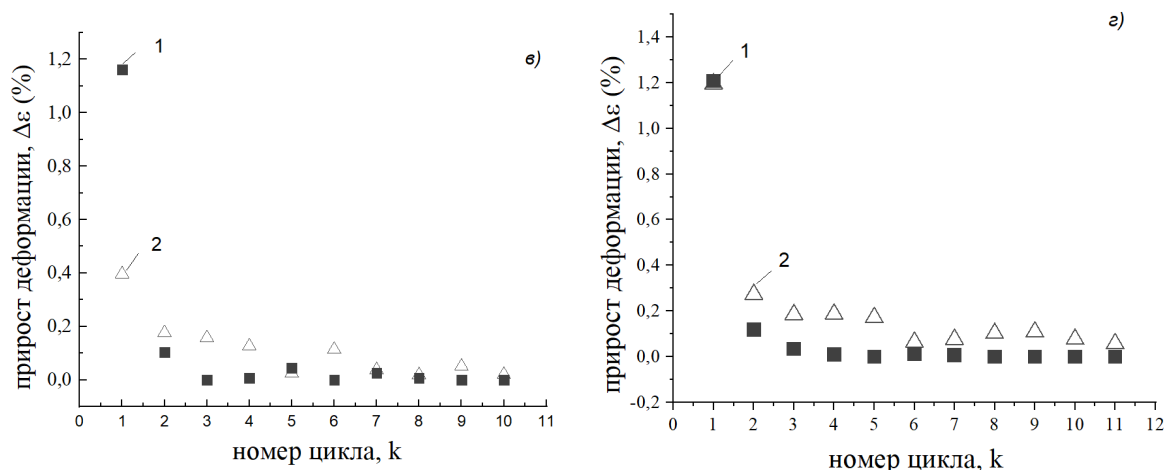


Рис.3. Зависимость прироста деформации сплава $Ti_{50}Ni_{49,9}Mo_{0,1}$ от номера цикла: а) при 86 МПа; б) при 119 МПа; в) при 152 МПа; г) при 252 МПа: 1 – обратимая деформация, 2 – остаточная деформация

Fig.3. Dependence of the increase in deformation of the $Ti_{50}Ni_{49,9}Mo_{0,1}$ on the cycle number: а) at 86 МПа; б) at 119 МПа; в) at 152 МПа; г) at 252 МПа: 1 – reversible deformation, 2 – residual deformation

Зависимость прироста деформации (обратимой и остаточной) от номера цикла проанализируем экспоненциальной функцией (1) для получения характеристик кривых:

$$\Delta \varepsilon_k = \varepsilon_0 \cdot \exp(-\beta \cdot k) + \varepsilon_n, \quad (1)$$

где ε_n – уровень насыщения прироста деформации; ε_0 – значение деформации в нулевом цикле; β – коэффициент в показателе экс-

поненты (1), характеризующий скорость снижения прироста деформации, k – номер цикла мартенситных превращений.

В таблицах 1 и 2 приведены параметры функции, аппроксимирующей зависимость прироста обратимой и остаточной деформации сплава $Ti_{50}Ni_{49,9}Mo_{0,1}$ от номера цикла.

Таблица 1. Параметры аппроксимации уравнением (1) кривых обратимой деформации

Table 1. Parameters of approximation by equation (1) of curves of reversible deformation

Сплав	Нагрузка, МПа	ε_0 , %	ε_n , %	β	R^2
$Ti_{50}Ni_{49,9}Mo_{0,1}$	86	$2,39 \pm 0,29$	$0,007 \pm 0,006$	$1,37 \pm 0,16$	0,991
	119	$9,9 \pm 1,87$	$0,009 \pm 0,008$	$2,26 \pm 0,27$	0,998
	152	$14,49 \pm 2,93$	$0,01 \pm 0,006$	$2,53 \pm 0,29$	0,998
	252	$12,35 \pm 0,93$	$0,006 \pm 0,003$	$2,33 \pm 0,31$	0,999

Таблица 2. Параметры аппроксимации уравнением (1) кривых остаточной деформации

Table 2. Parameters of approximation of residual deformation curves by equation (1)

Сплав	Нагрузка, МПа	ε_0 , %	ε_n , %	β	R^2
$Ti_{50}Ni_{49,9}Mo_{0,1}$	86	$0,41 \pm 0,07$	$0,018 \pm 0,005$	$0,82 \pm 0,47$	0,978
	119	$0,49 \pm 0,14$	$0,055 \pm 0,017$	$0,83 \pm 0,27$	0,937
	152	$0,67 \pm 0,17$	$0,047 \pm 0,023$	$0,88 \pm 0,21$	0,911
	252	$6,22 \pm 1,67$	$0,108 \pm 0,017$	$1,75 \pm 0,13$	0,98

Основной характеристикой зависимости является коэффициент β в показателе экспоненты. Как видно из таблицы 2, значения коэффициента β для остаточной деформации увеличиваются при увеличении нагрузки в сплаве $Ti_{50}Ni_{49,9}Mo_{0,1}$. Увеличение значения коэффициента в показателе экспоненты указывает на более интенсивные деформационные процессы в сплаве при повышенных нагрузках. Фазовый наклеп, как один из факторов, влияющих на деформационные процессы, может вносить свой вклад в увеличение β . Это может означать, что фазовый наклеп способствует более интенсивной деформации материала при циклических нагрузках.

Наблюдаемый прирост остаточной деформации в циклах свидетельствует о перераспределении обратимого деформационного ресурса между остаточной и обратимой деформациями в циклах мартенситных превращений в пользу остаточной, особенно заметный при высоких механических нагрузках, где прирост остаточной деформации превышает прирост обратимой. Вовлечение аккомодационных мартенситных кристаллов при увеличении напряжения в мартенситную деформацию и перераспределение ее в остаточную может быть связано с фиксацией некоторой доли мартенситных кристаллов в полях напряжений, локализованных в окрестности этих кристаллов.

В ряде работ [4, 5, 10] указано, что при совершении цикла мартенситных превращений происходит изменение кристаллической структуры материала. Это изменение сопровождается образованием структурных дефектов, таких как полные дислокации. Эти дефекты не могут полностью восстанавливаться и остаются в материале после превращений. Накопление структурных дефектов, включая полные дислокации, может привести к упрочнению сплава. Дислокации являются местами концентрации напряжений и препятствуют движению дефектов и пластической деформации. Это делает материал более прочным и устойчивым к деформации.

Очевидно, фазовый наклеп может приводить к стабилизации мартенситной фазы, то есть являться фактором, влияющим на деформационные процессы в циклах мартенситных превращений.

Заключение

В экспериментах по термомеханическому циклированию сплава $Ti_{50}Ni_{49,9}Mo_{0,1}$ для исследования закономерностей накопления и возврата деформации установлено, что кроме обратимой деформации в каждом цикле отмечается

накопление остаточной деформации, величина которой растёт от цикла к циклу на величину прироста остаточной деформации в цикле. Накопление остаточной деформации, очевидно, осуществляется как за счёт фазового наклепа, так и за счёт стабилизации мартенситных кристаллов, заблокированных структурными дефектами, генерируемыми при протекании прямого-обратного мартенситных превращений.

Фазовый наклеп связан с накоплением полных дислокаций в кристаллической структуре материала в процессе мартенситных превращений. Этот процесс приводит к накоплению необратимой деформации, которая не может быть сведена к нулевому значению даже высокотемпературным отжигом.

С другой стороны, образование структурных дефектов, таких как полные дислокации, может быть следствием неоднородности превращений внутри материала. Эти дефекты могут долговременно оставаться в материале и стать местами стабилизации мартенситных кристаллов.

Список литературы

1. Хачин В.Н., Пушин В.Г., Кондратьев В.В. Никелид титана: Структура и свойства. М.: Наука, 1992. 160 с.
2. Борисова С.Д., Монасевич Л.А., Паскаль Ю.И. Кристаллографический расчет обратимой деформации при эффектах памяти формы никелида титана // Металлофизика. 1983. Т. 5, № 2. С. 66–70.
3. Гюнтер Э.В., Ходоренко В.Н., Ясенчук Ю.Ф. и др. Никелид титана. Томск: Изд-во МИЦ, 2006. 296 с.
4. Паскаль Ю.И., Ерофеев В.Я., Монасевич Л.А. Кинетика мартенситного превращения в сплавах на основе $TiNi$ под постоянной внешней нагрузкой // Металлофизика. 1984. Т. 6, № 6. С. 36–40.
5. Плотников В.А., Монасевич Л.А., Паскаль Ю.И. Исследование фазового наклепа и его отжига в сплавах на основе $TiNi$ методом акустической эмиссии // ФММ. 1986. Т. 61, № 4. С. 769–773.
6. Плотников В.А., Грязнов А.С. Акустическая эмиссия при термоупругих мартенситных превращениях в условиях фиксированной деформации // Известия вузов. Физика. 2009. Т. 52, № 3. С. 12–18.
7. Солдатова М.И., Ходоренко В.Н., Гюнтер В.Э. Физико-механические и прочностные свойства сплавов на основе никелида титана (ТН-10, ТН-20, ТН-1В) // Известия Томского политехнического университета. 2013. Т. 322, № 2. С. 135–139.

8. Гюнтер В.Э., Ходоренко В.Н., Чекалкин Т.Л. и др. Медицинские материалы и имплантаты с памятью формы. Медицинские материалы с памятью формы. Т. 1. Томск: Изд-во МИЦ, 2011. 534 с.

9. Регистратор данных АЦП (dotScope): свид. гос. рег. прогр. ЭВМ №2008612034 / В. А. Плотников, А. С. Грязнов; заявитель и правообладатель Алтайский государственный университет. № 2008610809; заявл. 28.02.08 опубл. 23.04.2008.

10. Клопотов А.А., Ясенчук Ю.В., Голобиков Н.Н. и др. Рентгеноструктурные исследования мартенситных превращений в никелиде титана под действием внешней нагрузки // ФММ. 2000. Т. 90, № 4. С. 59–62.

Информация об авторах

В. А. Плотников – доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой общей и экспериментальной физики Алтайского государственного университета.

А. В. Гусева – аспирант кафедры общей и экспериментальной физики Алтайского государственного университета.

А. С. Грязнов – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры физики и информатики Алтайского государственного медицинского университета.

С. С. Пругов – аспирант кафедры общей и экспериментальной физики Алтайского государственного университета.

References

1. Khachin, V. N., Pushin, V. G. & Kondratiev, V. V. (1992). Titanium nickelide: Structure and properties. M.: Nauka. P. 160. (In Russ.).

2. Borisova, S. D., Monasevich, L. A. & Pascal, Yu. I. (1983). Crystallographic calculation of reversible deformation under the shape memory effects of titanium nickelide. *Metallophysics*, 5(2), 66–70. (In Russ.).

3. Gunter, E. V., Khodorenko, V. N., Yasenchuk, Yu. F. et al. (2006). Titanium nickelide. Tomsk: Publishing House of MIT. P. 296. (In Russ.).

4. Pascal, Yu. I., Yerofeev, V. Ya. & Monasevich, L. A. (1984). Kinetics of martensitic transformation in TiNi-based alloys under constant

external load. *Metallophysics*, 6(6), 36–40. (In Russ.).

5. Plotnikov, V. A., Monasevich, L. A. & Pascal, Yu. I. (1986). Investigation of phase hardening and its annealing in TiNi-based alloys by acoustic emission method. *FMM*, 61(4), 769–773. (In Russ.).

6. Plotnikov, V. A. & Gryaznov, A. S. (2009). Acoustic emission during thermoelastic martensitic transformations under fixed temperature conditions deformations. *Izvestiya vuzov. Physics*, 52(3), 12–18. (In Russ.).

7. Soldatova, M. I., Khodorenko, V. N. & Gunter, V. E. (2013). Physico-mechanical and strength properties of alloys based on titanium nickelide (TN-10, TN-20, TN-1B). *Izvestiya Tomsk Polytechnic University*, 322(2), 135–139. (In Russ.).

8. Gunter, V. E., Khodorenko, V. N., Chekalkin, T. L. et al. (2011). Medical materials and implants with shape memory. Tomsk: Publishing House of MIT. P. 534. (In Russ.).

9. Plotnikov, V. A. & Gryaznov, A. S. (2008). ADC data logger (dotScope): свид. state reg. prog. Computer No. 2008612034. *Applicant and copyright holder Altai State University*, 2008610809.

10. Klopotov, A. A., Yasenchuk, Yu. V., Golobikov, N. N. et al. (2000). X-ray diffraction studies of martensitic transformations in titanium nickelide under the action of an external load. *FMM*, 90(4), 59–62. (In Russ.).

Information about the authors

V. A. Plotnikov – Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor, Head of the Department of General and Experimental Physics of the Altai State University.

A. V. Guseva – Postgraduate Student of the Department of General and Experimental Physics of the Altai State University.

A. S. Gryaznov – Candidate of Physical and Mathematical Sciences; Associate Professor of the Department of Physics and Informatics of the Altai State Medical University.

S. S. Prugov – Postgraduate student of the Department of General and Experimental Physics of the Altai State University.

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.
The authors declare that there is no conflict of interest.

Статья поступила в редакцию 12.04.2024; одобрена после рецензирования 06.05.2024; принята к публикации 20.05.2024.

The article was received by the editorial board on 12 Apr. 24; approved after reviewing 06 May 24; accepted for publication 20 May 24.

Научная статья

1.3.8. Физика конденсированного состояния (физико-математические науки)

УДК 539.27:669.014.018:669.112.227:669.589.352

doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2024.02.005

ВЛИЯНИЕ РАЗЛИЧНЫХ ВИДОВ НАГРУЖЕНИЯ РЕЛЬСОВОЙ СТАЛИ НА ЭВОЛЮЦИЮ ТОНКОЙ СТРУКТУРЫ

Наталья Анатольевна Попова¹, Виктор Евгеньевич Громов^{2†},
Михаил Анатольевич Порфирьев³, Роман Евгеньевич Крюков⁴, Юрий Федорович Иванов⁵,
Виталий Владиславович Шляров⁶, Елена Леонидовна Никоненко⁷

^{1,7} Томский государственный архитектурно-строительный университет, пл. Соляная, 2, 634003, Томск, Россия

^{2,3,4,6} Сибирский государственный индустриальный университет, ул. Кирова, 42, 654007, Новокузнецк, Россия

⁵ Институт сильноточной электроники СО РАН, пр. Академический, 2/3, 634055, Томск, Россия

¹ natalya-popova-44@mail.ru[†], <https://orcid.org/0000-0001-8823-4562>

² gromov@physics.sibsiu.ru, <https://orcid.org/0000-0002-5147-5343>

³ mporf372@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0003-3602-5739>

⁴ rek_nzrmk@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-3394-7941>

⁵ yufi55@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0001-8022-7958>

⁶ shlyarov@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0001-8130-648X>

⁷ vilatomsk@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-0396-9541>

Аннотация. Методами просвечивающей электронной дифракционной микроскопии и рентгеноструктурного анализа проведен сравнительный количественный анализ изменения фазового состава, дефектной субструктуры и перераспределения атомов углерода рельсов доэвтектоидной стали после длительной эксплуатации и деформации сжатием. Исследования рельсов проводились на разном расстоянии от поверхности катания в головке по разным направлениям, а сжатие осуществлялось до степеней 15, 30, 50 %. Показано, что длительная эксплуатация рельсов и деформация сжатием сопровождаются фрагментацией, причем, при выбранных режимах этот процесс идет интенсивнее при сжатии, чем при длительном нагружении. При анализе процесса фрагментации цементитных пластин привлечены представления об одновременном протекании механизмов разрушения движущимися дислокациями и растворения. Из зависимостей изменения объемных долей углерода в цементите и на дефектах кристаллической решетки от выбранных условий нагружения сделано заключение о преимущественной роли деформации сжатием по сравнению с процессом длительной эксплуатации. Выявлены физические причины немоного изменения скалярной и избыточной плотности дислокаций от степени деформации при сжатии и расстояния от поверхности головки по центральной оси и радиусу скругления выкружки и более высокие значения скалярной плотности дислокаций по сравнению с избыточной плотностью.

Ключевые слова: сравнительный анализ, рельсовая сталь, сжатие, длительная эксплуатация, тонкая субструктура.

Благодарности: Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (тема № FEMN-2023-0003).

Для цитирования: Попова Н.А., Громов В.Е., Порфирьев М.А., Крюков Р.Е., Иванов Ю.Ф., Шляров В.В., Никоненко Е.Л. Влияние различных видов нагружения рельсовой стали на эволюцию тонкой структуры // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2024. Т. 21, № 2. С. 179–187. doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2024.02.005.

Original article

**EFFECT OF DIFFERENT TYPES OF RAIL STEEL LOADING
ON THE FINE STRUCTURE EVOLUTION****Nataliy A. Popova¹, Victor E. Gromov^{2†}, Mikhail A. Porfiriev³, Roman E. Kryukov⁴,
Yurii F. Ivanov⁵, Vitaliy V. Shlyarov⁶, Elena L. Nikonenko⁷**^{1,7} Tomsk State University of Architecture and Building, Solyanaya Sq., 2, Tomsk, 634003, Russia^{2,3,4,6} Siberian State Industrial University, Kirov Str., 42, Novokuznetsk, 654007, Russia⁵ Institute of High Current Electronics SB RAS, Academicheskii Pr., 2/3, Tomsk, 634055, Russia¹ natalya-popova-44@mail.ru[†], <https://orcid.org/0000-0001-8823-4562>² gromov@physics.sibsiu.ru, <https://orcid.org/0000-0002-5147-5343>³ mporf372@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0003-3602-5739>⁴ rek_nzrmk@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-3394-7941>⁵ yufi55@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0001-8022-7958>⁶ shlyarov@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0001-8130-648X>⁷ vilatomsk@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-0396-9541>

Abstract. Using the methods of transmission electron diffraction microscopy and X-ray diffraction analysis, a comparative quantitative analysis of the change in the phase composition, defective substructure and redistribution of carbon atoms of hypoeutectoid steel rails after long-term operation and compression deformation was carried out. Rails were studied at different distances from the tread surface in the head in different directions, and compression was carried out to degrees of 15, 30, 50 %. It is shown that long-term operation of rails and compressive deformation are accompanied by fragmentation, and, under the selected modes, this process is more intense under compression than under long-term loading. When analyzing the process of fragmentation of cementite plates, ideas about the simultaneous occurrence of the mechanisms of destruction by moving dislocations and dissolution are involved. From the dependences of the change in the volume fractions of carbon in cementite and on crystal lattice defects on the selected loading conditions, a conclusion was made about the predominant role of compressive deformation compared to the process of long-term operation. The physical reasons for the nonmonotonic change in the scalar and excess dislocation density depending on the degree of deformation during compression and the distance from the head surface along the central axis and fillet radius and higher values of the scalar dislocation density compared to the excess density are revealed.

Keywords: comparative analysis, rail steel, compression, long-term operation, fine substructure.

Acknowledgements: The research was carried out within the state assignment of Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation (theme No. FEMN-2023-0003).

For citation: Popova, N. A., Gromov, V. E., Porfiriev, M. A., Kryukov, R. E., Ivanov, Yu. F., Shlyarov, V. V. & Nikonenko, E. L. (2024). Effect of different types of rail steel loading on the fine structure evolution. *Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedeniya (Basic Problems of Material Science (BPMS))*, 21(2), 179–187. (In Russ.). doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2024.02.005.

Введение

При создании рельсов специального назначения (повышенной износостойкости, низкотемпературной надежности, для высокоскоростного движения) необходимо понимание природы структурно-фазовых изменений при деформационном поведении металла рельсов. Это обусловлено как научной значимостью проблемы, так и возрастанием требований к надежности рельсов в современных условиях их эксплуатации. При длительной эксплуатации на поверхности катания отмечается высокое значение микротвердости, явление деформационно-индуцированного распада цементита и других процессов, приводящих к деградации структуры и свойств и изъятию рельсов из экс-

плуатации [1, 2]. Сформированный в [3-8] банк данных об эволюции структурно-фазовых состояний и свойств длинномерных рельсов при различных сроках длительной эксплуатации можно рассматривать в качестве основы физического материаловедения рельсовой стали. Выявление наиболее общих закономерностей деформационного упрочнения сталей перлитного класса представляет значительный интерес для построения теории этого явления, с одной стороны, и выявление роли дислокационных механизмов, с другой [9-12].

При деформации рельсовой стали одноосным сжатием до степени 50 %, при которой образцы сплющиваются без разрушения, оценены вклады в упрочнение, обусловленные трением решетки матрицы, твердорастворным и суб-

структурным упрочнением, перлитной составляющей структуры стали, присутствием карбидной фазы, дислокационной субструктурой [13]. Такой учет позволил получить хорошее соответствие деформационных кривых $\sigma(\varepsilon)$, полученных экспериментально и рассчитанных теоретически. Вместе с тем ряд важных вопросов не получил надлежащего развития, в частности, выявление роли дислокационной субструктуры при деформационном упрочнении (особенно количественных её параметров), процессов фрагментации. Суммируя исследование изучения деформационного поведения рельсовой стали можно констатировать, что при активной деформации и длительной эксплуатации отмечается сложное сочетание дефектных структур на различных масштабных уровнях: от точечных, линейных до микротрещин. Однако мало информации о природе физических процессов, протекающих при их образовании. Полезным в этом отношении мог бы явиться сравнительный анализ эволюции фазового состава, тонкой субструктуры при длительной эксплуатации рельсов и деформации сжатием. Это и являлось целью настоящей работы.

Материал и методики исследования

В качестве материала исследования использовали образцы рельсовой стали Э76ХФ, свойства и элементный состав которой регламентируются ГОСТ Р 51685–2013 [14]. Деформацию одноосным сжатием образцов размерами $10 \times 5 \times 5$ мм осуществляли при комнатной температуре на испытательной машине Instron 3369 при скорости нагружения 1,2 мм/мин и автоматической записи нагрузки и размеров образца.

Структуру металла исследовали методами просвечивающей (метод тонких фольг) электронной дифракционной микроскопии (прибор JEOL JEM 2100F) [15–18]. Фольги готовили методом электролитического утонения пластинок, вырезанных электроискровым методом из центральной части столбика параллельно поверхности нагружения. Анализировали структурно-фазовое состояние стали, подвергнутой деформированию на 15, 30 и 50 %. Образцы стали Э76ХФ при испытании на сжатие не удалось довести до разрушения, поскольку они сплюснулись из-за того, что исследуемая сталь способна достаточно сильно деформироваться без разрушения.

Вторая часть экспериментов была выполнена на рельсах из той же стали после пропущенного тоннажа 1,77 млрд. тонн брутто в про-

цессе полигонных испытаний на экспериментальном кольце РЖД (г. Щербинка). Анализ проводился на расстояниях 0, 2 и 10 мм от поверхности головки по центральной оси и радиусу скругления выкружки.

Скалярную плотность дислокаций в каждой структурной составляющей определяли по методике [18] и рассчитывали по формуле:

$$\rho_i = \frac{M}{t} \left(\frac{n_1}{l_1} + \frac{n_2}{l_2} \right), \quad (1)$$

где n_1 и n_2 – число пересечений дислокациями горизонтальных и вертикальных линий длиной l_1 и l_2 соответственно; M – увеличение микрофотографии; t – толщина фольги (200 нм).

Среднюю скалярную плотность дислокаций определяли по формуле [18]:

$$\rho = \sum_{i=1}^n \rho_i V_i, \quad (2)$$

где ρ_i , V_i – скалярная плотность дислокаций в i -м типе структурной составляющей и ее объемная доля.

Избыточную плотность дислокаций рассчитывали по градиенту разориентировки [19]:

$$\rho_{\pm} = \frac{1}{b} \frac{\partial \varphi}{\partial \lambda}. \quad (3)$$

Здесь b – вектор Бюргерса; $\frac{\partial \varphi}{\partial \lambda} = \chi$ – амплитуда кривизны-кручения кристаллической решетки, где $\partial \varphi$ – угол наклона фольги в колонне микроскопа, $\partial \lambda$ – смещение контура экстинкции.

Для оценки концентрации углерода в кристаллической решетке α -Fe применяли методы рентгеноструктурного анализа (дифрактометр XRD-6000, Shimadzu).

Результаты исследования и их обсуждение

Ранее в работах [1, 2] было показано, что в структуре исходного состояния исследуемой стали по морфологическому признаку можно выделить следующие составляющие: зерна перлита пластинчатой морфологии, зерна феррито-карбидной смеси (зерна нерегулярного перлита) и зерна структурно свободного феррита (зерна феррита, в объеме которых нет частиц карбидной фазы). Основным типом структуры исследуемой стали являются зерна перлита.

Показано, что деформационное упрочнение исследуемой стали при пластической деформации одноосным сжатием приводит к разрушению перлита и сопровождается фрагментацией перлитных зерен, усиливающейся по мере увеличения степени деформации и достигающей

при $\varepsilon = 50\%$ примерно 0,4 объема материала. Фрагменты, формирующиеся в пластинах феррита, разделены малоугловыми границами. Установлено, что средние размеры фрагментов пластин феррита при увеличении степени деформации уменьшаются от ~ 250 нм ($\varepsilon = 15\%$) до 200 нм ($\varepsilon = 50\%$).

Деформация сжатием (рис.1в) приводит к интенсивной фрагментации перлита (рис.1в, кр. 3), при этом пластинчатый перлит оказывается полностью разрушенным (рис.1в, кр. 1).

В рельсах (рис.1а-б) по мере приближения к поверхности ($X = 0$) пластинчатый перлит

разрушается медленнее, но сохраняется даже на поверхности, причем от поверхности головки по центральной оси (рис.1а, кр. 1) доля сохранившегося пластинчатого перлита практически в 2 раза больше, чем по радиусу скругления выкружки (рис.1б, кр. 1). Фрагментированный перлит формируется со значительно меньшей скоростью, чем при деформации, причем от поверхности головки по центральной оси (рис.1а, кр. 3) доля сформированного фрагментированного перлита составляет лишь $\sim 5\%$.

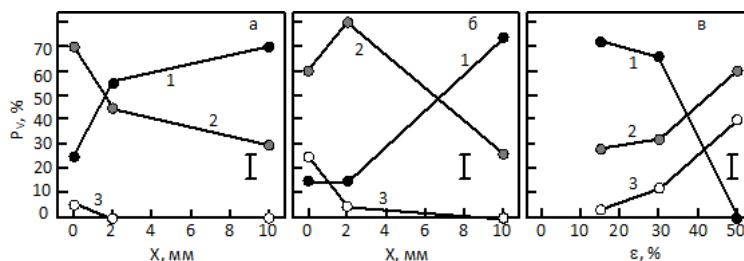


Рис.1. Влияние пропущенного тоннажа 1770 млн. т (а, б) и пластической деформации сжатием (в) на изменение объемных долей пластинчатого неразрушенного (1), разрушенного (2) и фрагментированного (3) перлита: а – от поверхности головки по центральной оси; б – по радиусу скругления выкружки

Fig.1. Influence of the passed tonnage of 1770 million tons (a, b) and plastic deformation by compression (c) on the change in the volume fractions of lamellar undestroyed (1), destroyed (2) and fragmented (3) perlite: а – from the surface of the head along the central axis ; б – along the radius of the rounding of the fillet

Выявлена фрагментация пластин цементита. Установлено, что размер фрагментов изменяется в пределах 15-20 нм и слабо зависит от степени деформации стали. Обнаружено разрушение пластин цементита, протекающее путем их растворения и разрезания подвижными дислокациями. Показано, что атомы углерода, перешедшие из кристаллической решетки цементита на дислокации, выносятся в межпластинчатое пространство и формируют частицы третичного цементита, размеры которых составляют 2-4 нм.

В рельсах разрушение цементита по мере приближения к поверхности происходит быстрее (особенно по радиусу скругления выкружки), чем при деформации.

Известно, что углерод в структуре стали может находиться в твердом растворе на основе α -железа (на позиции элементов внедрения), на дислокациях (в виде атмосфер Коттрелла и Максвелла), на межфазных (цементит- α -фаза) и внутрифазных (границы фрагментов) границах, в частицах карбидной фазы. Количество углерода в твердом растворе обычно оценивается по относительному изменению его параметра кристаллической решетки [20]. Оценку количества углерода в карбидных частицах (цементите) проводят исходя из химического состава и объемной доли частиц цементита в

стали [1, 2, 21]. Для оценки количества углерода, расположенного на дефектах, используют косвенные методы.

Если в исходном состоянии стали практически весь углерод находится в частицах цементита, то после эксплуатации рельсов местом расположения углерода, наряду с частицами цементита, являются дефекты кристаллической структуры стали (дислокации, границы фрагментов, зерен и субзерен), а в поверхностном слое стали углерод обнаруживается и в кристаллической решетке α -железа.

Из рис.3 следует, что в результате разрушения цементита углерод уходит на дефекты (дислокации и границы фрагментов), а т.к. деформация сжатием приводит к более интенсивной фрагментации, то и углерода на дефектах при $\varepsilon = 50\%$ оказывается значительно больше, чем в рельсах.

Активная пластическая деформация сжатием сопровождается преобразованием дислокационной субструктуры стали. В структуре исходной стали дислокации были распределены квазиравномерно по объему пластинчатого феррита [1, 2]. Деформация стали приводит к формированию скоплений дислокаций вокруг частиц цементита [13]. Увеличение степени деформирования сопровождается снижением скалярной плотности дислокаций, расположенных

в объеме фрагментов с $2,1 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-2}$ ($\varepsilon = 15 \%$) до $0,6 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-2}$ ($\varepsilon = 50 \%$). Это может быть обусловлено уходом дислокаций в малоугловые границы, а также их аннигиляцией. Ранее по-

добное изменение дислокационной субструктуры в формирующихся при деформации фрагментах наблюдали в работах [22, 23].

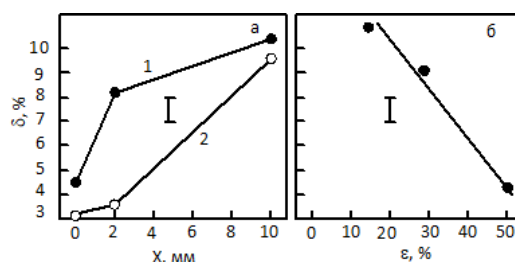


Рис.2. Влияние пропущенного тоннажа 1770 млн. т (а) и пластической деформации сжатием (б) на изменение объемной доля цементита. На (а) 1 – от поверхности головки по центральной оси; 2 – по радиусу скругления выкружки

Fig.2. Influence of the passed tonnage 1770 million tons (a) and plastic deformation by compression (b) on the change in the volume fraction of cementite. On (a) 1 – from the surface of the head along the central axis; 2 – along the fillet rounding radius

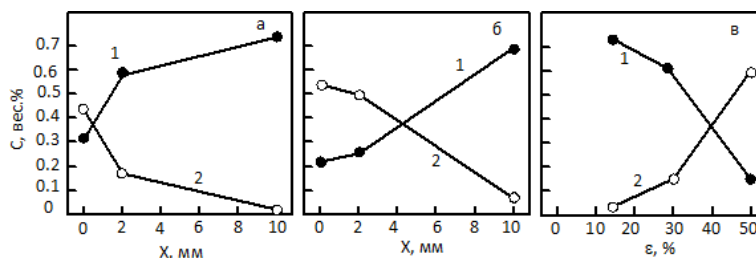


Рис.3. Влияние пропущенного тоннажа 1770 млн. т (а, б) и пластической деформации сжатием (в) на изменение объемной доли углерода, находящегося в частицах цементита (1) и на дефектах кристаллического строения (2): а – от поверхности головки по центральной оси; б – по радиусу скругления выкружки

Fig.3. Influence of the passed tonnage of 1770 million tons (a, b) and plastic deformation by compression (c) on the change in the volume fraction of carbon in cementite particles (1) and on defects in the crystalline structure (2): а – from the surface of the head along the central axes; б – along the radius of the rounding of the fillet

Анализ дефектной субструктуры деформированной стали методами просвечивающей электронной микроскопии выявил на электронно-микроскопических изображениях структуры стали изгибные экстинкционные контуры. Их наличие указывает на изгиб-кручение кристаллической решетки данной области материала, а следовательно, на внутренние поля напряжений, искривляющие тонкую фольгу и, соответственно, упрочняющие материал [1, 2]. Анализируя изгибные контуры экстинкции, можно установить источники внутренних полей напряжений, т.е. выявить концентраторы напряжений и оценить их относительную величину. В результате выполненных в настоящей работе исследований установлено, что источниками внутренних полей напряжений являются границы раздела зерен и колоний перлита, пластин цементита в зернах перлита, расположенные в объеме пластин феррита частицы второй фазы (цементита).

Значения скалярной ρ и избыточной ρ_{\pm} плотности дислокаций немонотонно убывают с

удалением от поверхности образца по радиусу скругления выкружки и по центральной оси симметрии головки (рис.4а-б). Независимо от места анализа средняя величина ρ всегда превышает среднюю величину ρ_{\pm} , что указывает на пластический характер изгиба-кручения кристаллической решетки α -матрицы стали. Величина ρ_{\pm} , измеренная в поверхностном слое вдоль центральной оси головки и вдоль радиуса скругления выкружки более, чем в 2 раза превышает эту характеристику дефектной субструктуры, выявленную в слое на глубине 10 мм. Это свидетельствует о кратном увеличении внутренних напряжений поверхностного слоя головки.

Пластическая деформация сжатием, как следует из рис.4, в, вначале приводит к слабому увеличению ρ и ρ_{\pm} , при этом оставаясь $\rho > \rho_{\pm}$, а затем к их снижению и при $\varepsilon = 50 \%$ оказывается $\rho = \rho_{\pm}$. Это объясняется, во-первых, интенсивным развитием фрагментации и, во-вторых, уходом дислокаций из объема фрагментов на их границы.

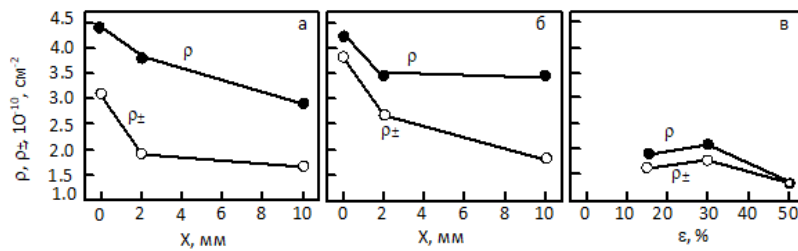


Рис.4. Влияние пропущенного тоннажа 1770 млн. т (а, б) и пластической деформации сжатием (в) на изменение средних значений скалярной ρ и избыточной ρ_{\pm} плотности дислокаций: а – от поверхности головки по центральной оси; б – по радиусу скругления выкружки

Fig.4. The influence of the passed tonnage of 1770 mln. tons (a, b) and plastic deformation by compression (c) on the change in the average values of scalar ρ and excess ρ_{\pm} dislocation density: a – from the top of the head along the central axis; b – along the radius of the fillet rounding

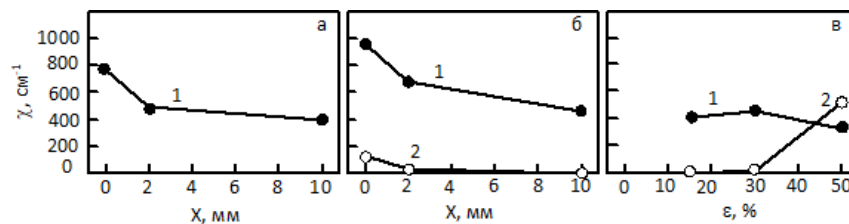


Рис.5. Влияние пропущенного тоннажа 1770 млн. т (а, б) и пластической деформации сжатием (в) на изменение амплитуды кривизны-кручения кристаллической решетки χ (1 – $\chi_{пл}$, 2 – $\chi_{упр}$): а – от поверхности головки по центральной оси; б – по радиусу скругления выкружки

Fig.5. The influence of the passed tonnage of 1770 million tons (a, b) and plastic deformation by compression (c) on the change in the amplitude of curvature-torsion of the crystal lattice χ (1 – χ_{pl} , 2 – χ_{el}): a – from the surface of the head along the central axis; b – along the radius of the fillet rounding)

Проведенные исследования показали, что в рельсах по мере приближения к поверхности головки по центральной оси (рис.5а) во всем материале изгиб-кручение кристаллической решетки χ носит чисто пластический характер, т.е. $\rho_{\pm} < \rho$. На расстоянии 10 мм от поверхности по радиусу скругления выкружки (рис.5б, кр. 1) изгиб-кручение кристаллической решетки χ также носит чисто пластический характер, т.е. также во всем объеме материала $\rho_{\pm} < \rho$. По мере приближения к поверхности образца (10 мм \rightarrow 2 мм \rightarrow 0) происходит интенсивное разрушение пластинчатого перлита, доля разрушенного перлита возрастает и начинает формироваться, хотя и слабо, фрагментированная субструктура (рис.5б, кр. 2). В этих участках структуры рассчитанное значение избыточной плотности дислокаций ρ_{\pm} оказывается больше скалярной плотности дислокаций ρ ($\rho_{\pm} > \rho$), и поэтому изгиб-кручение кристаллической решетки χ в материале носит упругопластический характер [19].

В деформированной сжатием стали интенсивная фрагментация приводит к тому, что размер фрагментов постепенно уменьшается. Дислокации «выметаются» на границы фрагментов, скалярная плотность дислокаций ρ

уменьшается, оставаясь $\rho > \rho_{\pm}$. Это означает, что дислокационная структура внутри фрагментов оказывается практически полностью поляризованной, т.е. большинство присутствующих во фрагментах дислокаций оказываются избыточными. При $\varepsilon = 50\%$ рассчитанное значение избыточной плотности дислокаций ρ_{\pm} в целом по материалу оказывается больше скалярной плотности дислокаций ρ ($\rho_{\pm} > \rho$). Поэтому амплитуда кривизны-кручения кристаллической решетки оказывается равной сумме пластической и упругой составляющей $\chi = \chi_{пл} + \chi_{упр}$ (рис.5в), причем, как видно из рисунка, при $\varepsilon = 50\%$ $\chi_{пл} < \chi_{упр}$.

Заключение

Используя методы просвечивающей электронной микроскопии выполнен сравнительный анализ эволюции фазового состава и тонкой субструктуры рельсов при длительной эксплуатации (пропущенный тоннаж 1,77 млрд. тонн брутто) и деформации сжатием до степени 50%. Показано, что при обоих видах нагружения деформация сопровождается фрагментацией перлитных зерен. Отмечено, что при длительной эксплуатации формирование фрагментов идет с меньшей скоростью по сравнению со

сжатием. При анализе фрагментации пластин цементита отмечено его разрушение путем разрезания движущимися дислокациями и растворения. Проанализированы зависимости изменения объемной доли углерода в цементите и на дефектах кристаллического строения и указана определяющая роль деформации сжатием. Выявлены источники внутренних полей напряжений при обоих способах деформирования. Дано объяснение немонотонных зависимостей скалярной и избыточной плотности дислокаций от степени деформации и расстояния от поверхности катания по разным направлениям.

Список литературы

1. Yuriev A.A., Ivanov Yu.F., Gromov V.E., Rubannikova Yu.A., Starostenkov M.D., Tabakov P.Y. Structure and properties of lengthy rails after extreme long-term operation. Millersville, PA, USA: Materials Research Forum LLC, 2021. 190 p.
2. Gromov V.E., Ivanov Yu.F., Kormyshev V.E., Yuriev A.A., Semin A.P., Rubannikova Yu.A. Change in Structural-Phase States and Properties of Lengthy Rails during Extremely Long-Term Operation // *Progress in Physics of Metals*. 2020. V. 21, N 4. P. 527–553.
3. Кормышев В.Е., Иванов Ю.Ф., Юрьев А.А., Полевой Е.В., Громов В.Е., Глезер А.М. Эволюция структурно-фазовых состояний и свойств дифференцированно закаленных 100-метровых рельсов при экстремально длительной эксплуатации. Сообщение 1. Структура и свойства рельсовой стали перед эксплуатацией // *Проблемы черной металлургии и материаловедения*. 2019. № 4. С. 50–56.
4. Громов В.Е., Кормышев В.Е., Иванов Ю.Ф., Глезер А.М. Эволюция структурно-фазовых состояний и свойств дифференцированно закаленных 100-метровых рельсов при экстремально длительной эксплуатации. Сообщение 2. Структура и свойства головки рельсов после пропущенного тоннажа 1411 млн. т // *Проблемы черной металлургии и материаловедения*. 2020. № 3. С. 53–61.
5. Кузнецов Р.В., Громов В.Е., Полевой Е.В., Рубанникова Ю.А., Кормышев В.Е. Эволюция структурно-фазовых состояний и свойств дифференцированно закаленных 100-метровых рельсов при экстремально длительной эксплуатации. Сообщение 3. Структура и свойства рельсов после пропущенного тоннажа 1,77 млрд т // *Проблемы черной металлургии и материаловедения*. 2021. № 2. С. 81–87.
6. Кузнецов Р.В., Громов В.Е., Иванов Ю.Ф., Кормышев В.Е., Шлярова Ю.А., Полевой Е.В., Юрьев А.А. Эволюция структурно-фазовых состояний и свойств дифференцированно закаленных 100-метровых рельсов при экстремально длительной эксплуатации. Сообщение 4. Формирование градиентов структурно-фазового состояния металла головки рельсов по центральной оси после пропущенного тоннажа 1770 млн. т брутто // *Проблемы черной металлургии и материаловедения*. 2021. № 3. С. 37–46.
7. Kormyshev V.E., Gromov V.E., Ivanov Yu.F., Glezer A.M., Yuriev A.A., Semin A.P., Sundeev R.V. Structural phase states and properties of rails after long-term operation // *Mater. Lett.* 2020. V. 268, No. 127499.
8. Кормышев В.Е., Иванов Ю.Ф., Громов В.Е., Юрьев А.А., Полевой Е.В. Структура и свойства дифференцированно закаленных 100-х рельсов после экстремально длительной эксплуатации // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. 2019. Т. 16, № 4. С. 538–546.
9. Pan R., Ren R., Chen C., Zhao X. Formation of nanocrystalline structure in pearlitic steels by dry sliding wear // *Materials Characterization*. 2017. V. 132. P. 397–404.
10. Vinogradov A., Estrin Y. Analytical and numerical approaches to modelling severe plastic deformation // *Progress in Materials Science*. 2018. V. 95. P. 172–242.
11. Ivanisenko Yu., Lojkowski W., Valiev R.Z., Fecht H.-J. The mechanism of formation of nano-structure and dissolution of cementite in a pearlitic steel during high pressure torsion // *Acta Materialia*. 2003. V. 51, N 18. P. 5555–5570.
12. Yahyaoui H., Sidhom H., Braham C., Baczanski A. Effect of interlamellar spacing on the elastoplastic behavior of C70 pearlitic steel: Experimental results and self-consistent modeling // *Materials & Design*. 2014. V. 55. P. 888–897.
13. Порфирьев М.А., Иванов Ю.Ф., Попова Н.А., Громов В.Е., Шлярова Ю.А. Деформационное упрочнение рельсовой стали // *Деформация и разрушение материалов*. 2023. № 2. С. 20–26.
14. ГОСТ Р 51685–2013. Рельсы железнодорожные. Общие технические условия. М.: ФГУП «Стандартинформ», 2013.
15. Egerton F.R. *Physical Principles of Electron Microscopy*. Basel: Springer International Publishing, 2016. 196 p.
16. Kumar C.S.S.R. *Transmission Electron Microscopy. Characterization of Nanomaterials*. New York: Springer, 2014. 717 p.
17. Carter C.B., Williams D.B. *Transmission Electron Microscopy*. Berlin: Springer International Publishing, 2016. 518 p.

18. Хирш П., Хови А., Николсон П., Пэшли Д., Уэлан М. Электронная микроскопия тонких кристаллов. М.: Мир, 1968. 574 с.

19. Попова Н.А., Иванов Ю.Ф., Громов В.Е., Никоненко Е.Л., Соловьева Ю.В., Никоненко А.В., Шлярова Ю.А. Внутренние напряжения в поликристаллических металлических материалах. Новокузнецк: Полиграфист, 2023. 144 с.

20. Курдюмов В.Г., Утевский Л.М., Энтин Р.И. Превращения в железе и стали. М.: Наука, 1977. 236 с.

21. Fasiska E.J., Wagenblat H. Dilatation of alpha-iron by carbon // *Trans. Met. Soc. AIME*. 1967. V. 239, N 11. P. 1818–1820.

22. Козлов Э.В., Попова Н.А., Конева Н.А. Скалярная плотность дислокаций во фрагментах с разными типами субструктур // *Письма о материалах*. 2011. Т. 1. С. 15–18.

23. Козлов Э.В., Конева Н.А., Попова Н.А. Влияние размера зерен и фрагментов на плотность дислокаций в металлических материалах // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. 2010. Т. 7, № 1. С. 64–70.

Информация об авторах

Н. А. Попова – кандидат технических наук, старший научный сотрудник Томского государственного архитектурно-строительного университета.

В. Е. Громов – доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой естественнонаучных дисциплин им. проф. В.М. Финкеля Сибирского государственного индустриального университета.

М. А. Порфирьев – научный сотрудник управления научных исследований Сибирского государственного индустриального университета.

Р. Е. Крюков – доктор технических наук, доцент кафедры металлургии черных металлов Сибирского государственного индустриального университета.

Ю. Ф. Иванов – доктор физико-математических наук, профессор, главный научный сотрудник Института Сильноточной электроники СО РАН.

В. В. Шляров – аспирант кафедры естественнонаучных дисциплин им. проф. В.М. Финкеля, научный сотрудник лабораторией электронной микроскопии и обработки изображений (ЭМиОИ) Сибирского государственного индустриального университета.

Е. Л. Никоненко – кандидат физико-математических наук, доцент Томского государственного архитектурно-строительного

университета; доцент Национального исследовательского Томского политехнического университета.

References

1. Yuriev, A. A., Ivanov, Yu. F., Gromov, V. E., Rubannikova, Yu. A., Starostenkov, M. D. & Tabakov, P. Ya. (2021). Structure and properties of lengthy rails after extreme long-term operation. Millersville, PA, USA: Materials Research Forum LLC. P. 190.

2. Gromov, V. E., Ivanov, Yu. F., Kormyshev, V. E., Yuriev, A. A., Semin, A. P. & Rubannikova, Yu. A. (2020). Change in Structural-Phase States and Properties of Lengthy Rails during Extremely Long-Term Operation. *Progress in Physics of Metals*, 21(4), 527–553.

3. Kormyshev, V. E., Ivanov, Yu. F., Yuriev, A. A., Polevoy, E. V., Gromov, V. E. & Glezer, A. M. (2019). Evolution of structural-phase states and properties of differentially hardened 100-meter rails during extremely long-term service. Communication 1. The structure and properties of rail steel before operation. *Problems of ferrous metallurgy and materials science*, 4, 50–56. (In Russ.).

4. Gromov, V. E., Kormyshev, V. E., Ivanov, Yu. F. & Glezer, A. M. (2020). Evolution of structural-phase states and properties of differentially quenched 100-m rails during extremely long-term operation. Communication 2. Structure and properties of rail heads after tonnage 1411 mln. tons. *Problems of ferrous metallurgy and materials science*, 3, 53–61. (In Russ.).

5. Kuznetsov, R. V., Gromov, V. E., Polevoy, E. V., Rubannikova, Yu.A. & Kormyshev V.E. (2021). Evolution of structural-phase states and properties of differentially hardened 100-meter rails during extremely long-term operation. Message 3. Structure and properties of rails after the transported tonnage of 1.77 billion tons. *Problems of ferrous metallurgy and materials science*, 2, 81–87. (In Russ.).

6. Kuznetsov, R.V., Gromov, V.E., Ivanov, Yu.F., Kormyshev V.E., Shliarova, Yu.A., Polevoy, E.V. & Yuriev, A.A. (2021). Evolution of structural-phase states and properties of differentially hardened 100-meter rails during extremely long-term operation. Message 4. Formation of gradients of the structural and phase state of the rail-head metal along the central axis after the transported tonnage of 1,770 billion tons. *Problems of ferrous metallurgy and materials science*, 3, 37–46. (In Russ.).

7. Kormyshev, V.E., Gromov, V.E., Ivanov, Yu.F., Glezer, A.M., Yuriev, A.A., Semin, A.P. & Sundeev, R.V. (2020). Structural phase states and

- properties of rails after long-term operation. *Mater. Lett.* 268, 127499.
8. Kormyshev, V.E., Ivanov, Yu.F., Gromov, V.E., Yuriev, A.A. & Polevoy, E.V. (2019). Structure and properties of differentially quenched 100-m rails after extremely long-term operation. *Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedenia (Basic problems of materials science (BPMS))*, 16(4), 538–546. (In Russ.).
 9. Pan, R., Ren, R., Chen, C. & Zhao, X. (2017). Formation of nanocrystalline structure in pearlitic steels by dry sliding wear. *Materials Characterization*, 132, 397–404.
 10. Vinogradov, A. & Estrin, Y. (2018). Analytical and numerical approaches to modelling severe plastic deformation. *Progress in Materials Science*, 95, 172–242.
 11. Ivanisenko, Yu., Lojkowski, W., Valiev, R.Z. & Fecht, H.-J. (2003). The mechanism of formation of nano-structure and dissolution of cementite in a pearlitic steel during high pressure torsion. *Acta Materialia*. 51(18), 5555–5570.
 12. Yahyaoui, H., Sidhom, H., Braham, C. & Baczmanski, A. (2014). Effect of interlamellar spacing on the elastoplastic behavior of C70 pearlitic steel: Experimental results and self-consistent modeling. *Materials & Design*, 55, 888–897.
 13. Porfiriev, M.A., Ivanov, Yu.F., Popova, N.A., Gromov, V.E. & Shlyarova, Yu.A. (2023). Strain hardening of rail steel. *Deformation and destruction of materials*, 2, 20-26. (In Russ.).
 14. GOST R 51685–2013. Railway rails. General specifications. M.: FSUE "Standartin-form", 2013.
 15. Egerton, F.R. (2016). Physical Principles of Electron Microscopy. Basel: Springer International Publishing. P. 196.
 16. Kumar, C.S.S.R. (2014). Transmission Electron Microscopy. Characterization of Nanomaterials. New York: Springer. P. 717
 17. Carter, C.B. & Williams, D.B. (2016). Transmission Electron Microscopy. Berlin: Springer International Publishing. P. 518.
 18. Hirsch, P., Hovey, A., Nicholson, P., Pashley, D. & Whelan, M. (1986). Electron microscopy of thin crystals. M.: Mir. P. 574.
 19. Popova, N.A. Ivanov, Yu.F., Gromov, V.E., Nikonenko, E.L., Solovyova, Yu.V., Nikonenko, A.V. & Shliarova, Yu.A. (2023). Internal stresses in polycrystalline metallic materials. Novokuznetsk: Polygraphist. P. 144.
 20. Kurdyumov, V.G., Utevsky, L.M. & Entin R.I. (1977). Transformations in iron and steel. Moscow: Nauka. P. 236. (In Russ.).
 21. Fasiska, E.J. & Wagenblat, H. (1967). Dilatation of alpha-iron by carbon. *Trans. Met. Soc. AIME*, 239(11), 1818–1820.
 22. Kozlov, Ed.V., Popova, N.A. & Koneva, N.A. (2011). Scalar dislocation density in fragments with different substructure types. *Letters on materials*, 1, 15–18.
 23. Kozlov, Ed.V., Koneva, N.A. & Popova, N.A. (2010). Influence of the size of grains and fragments on the density of dislocations in metallic materials. *Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedenia (Basic problems of materials science (BPMS))*, 7(1), 64–70.

Information about the authors

N. A. Popova – PhD, Senior Researcher of the Laboratory of Nanomaterials and Nanotechnologies of the Tomsk State University of Architecture and Building.

V. E. Gromov – Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor, Head of the Department of Natural Sciences named after prof. V.M. Finkel, Siberian State Industrial University.

M. A. Porfiriev – Researcher, Department of Scientific Research, Siberian State Industrial University.

R. E. Kryukov – Doctor of Technical Sciences, associate Professor, Department of Ferrous Metallurgy, Siberian State Industrial University.

Yu. F. Ivanov – Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor, Institute of High Current Electronics SB RAS.

V. V. Shlyarov – Post-Graduate Student of the Department of Natural Sciences named after prof. V.M. Finkel, Researcher at the Laboratory of Electron Microscopy and Image Processing (EM&OP), Siberian State Industrial University.

E. L. Nikonenko – PhD in Physics and Mathematics, Associate Professor of the Tomsk State University of Architecture and Building; Associate Professor of the National Research Tomsk Polytechnic University.

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.
The authors declare that there is no conflict of interest.

Статья поступила в редакцию 08.04.2024; одобрена после рецензирования 17.05.2024; принята к публикации 27.05.2024.

The article was received by the editorial board on 08 Apr. 24; approved after reviewing 17 May 24; accepted for publication 27 May 24.

Научная статья

1.3.8. Физика конденсированного состояния (физико-математические науки)

УДК 539.52

doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2024.02.006

**УСТОЙЧИВОСТЬ И ДЕФОРМАЦИОННОЕ ПОВЕДЕНИЕ КОМПОЗИТА НА ОСНОВЕ
ЯЧЕИСТОЙ СТРУКТУРЫ: МОЛЕКУЛЯРНАЯ ДИНАМИКА****Ильяс Илгизович Тувалев^{1†}, Рамиль Тухватович Мурзаев²**¹ Уфимский государственный нефтяной технический университет, ул. Первомайская, 14, 450000, Уфа, Россия^{1,2} Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, ул. Степана Халтурина, 39, 450001, Уфа, Россия¹ illumnus102@gmail.com[†], <https://orcid.org/0000-0002-9341-4178>² murzaevrt@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-2691-7031>

Аннотация. Композиционные материалы, состоящие из различных компонентов, объединенных физико-химическими связями, привлекают все большее внимание в связи с растущими требованиями к материалам. Поиск новых углеродных материалов, которые могли бы стать составной частью композитов, в настоящее время представляет большой интерес. В данной работе методом молекулярной динамики исследована устойчивость и деформационное поведение нового композитного материала на основе ячеистой углеродной структуры, заполненной никелем. Ячеистая углеродная структура представляет собой соты, стенки которых – это графеновые наноленты. В результате была создана атомистическая модель композита и исследованы его механические свойства при 0 К и 300 К. В частности, исследована устойчивость при сжатии и анализ прочности при растяжении. Показано как происходит перераспределение металла внутри ячеек графеновой матрицы: ГЦК решетка никеля трансформируется под действием графеновых стенок и атомы никеля укладываются слоями, повторяя «рисунок» графеновой матрицы. В процессе двухосного сжатия происходит дальнейшее изменение укладки атомов никеля внутри сотовых ячеек, что приводит к формированию слоев никеля параллельно стенкам ячеек. Одноосное растяжение проводилось для трех типов материала – чистого никеля, ячеистой структуры, заполненной никелем и композита после двухосного сжатия. Было показано, что прочность композита значительно возрастает по сравнению с чистым никелем, при этом прочность обеспечивается именно углеродной сеткой. Влияние температуры на прочность слабое, как и влияние анизотропии структуры. Полученные результаты демонстрируют новый вид композитного материала, обладающего высокой прочностью.

Ключевые слова: графен, ячеистый графен, композиты, механические свойства, молекулярная динамика.

Благодарности: Работа Тувалева И.И. поддержана Российским Научным Фондом (грант № 20-72-10112-П). Работа Мурзаева Р.Т. поддержана госзаданием молодежной лаборатории ИПСМ РАН.

Для цитирования: Тувалев И.И., Мурзаев Р.Т. Устойчивость и деформационное поведение композита на основе ячеистой структуры: молекулярная динамика // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2024. Т. 21, № 2. С. 188–198. doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2024.02.006.

Original article

**STABILITY AND DEFORMATION BEHAVIOR OF CELLULAR
GRAPHENE COMPOSITE: MOLECULAR DYNAMICS****Ilyas I. Tuvalev^{1†}, Ramil T. Murzaev²**¹ Ufa State Petroleum Technological University, Pervomaiskaya Str., 14, Ufa, 450000, Russia^{1,2} Institute for Metals Superplasticity Problems of Russian Academy of Sciences, Khalturina Str., 39, Ufa, 450001, Russia¹ illumnus102@gmail.com[†], <https://orcid.org/0000-0002-9341-4178>² murzaevrt@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-2691-7031>

Abstract. Composite materials, consisting of different components combined together by physical and chemical bonds, are attracting increasing attention due to the growing demands on new functional materials. The search for new carbon materials that could become components of composite materials is currently of great interest. In this work, the stability and deformation behavior of a new composite material based on a nickel-filled cellular carbon structure have been studied using the molecular dynamics method. Cellular carbon structure is a honeycomb aerogel combined of graphene nanoribbons. As a result, an atomistic model of the composite has been constructed and its mechanical properties have been studied at 0 K and 300 K. In particular, compressive stability and tensile strength analysis have been studied. It is shown how the redistribution of the metal occurs inside the cells of the graphene matrix: the fcc lattice of nickel is transformed under the attraction of the graphene walls and the nickel atoms are stacked in layers, repeating the «pattern» of the graphene matrix. During the process of biaxial compression, a further change in the arrangement of nickel atoms inside the honeycomb cells occurs, leading to the formation of nickel layers parallel to the cell walls. Uniaxial tensile tests have been performed on three types of materials: pure nickel, a nickel-filled cellular structure, and a composite after biaxial compression. It has been shown that the strength of the composite increases significantly compared to pure nickel, and the strength is provided by the carbon network. The effect of temperature on the strength is weak, as is the influence of structure anisotropy. The results obtained demonstrate a new type of composite material with high strength.

Keywords: graphene, cellular graphene, composites, mechanical properties, molecular dynamics.

Acknowledgements: The work of I.T. is supported by the grant of Russian Science Foundation (No. 20-72-10112). Work of R.M. is supported by the State Assignment of IMSP RAS (Young Scientist Laboratory).

For citation: Tuvalev, I. I. & Murzaev, R. T. (2024). Stability and deformation behavior of cellular graphene composite: molecular dynamics. *Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedenia (Basic Problems of Material Science (BPMS))*, 21(2), 188–198. (In Russ.). doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2024.02.006.

Введение

Недавние достижения в области композитных материалов произвели революцию в их применении в различных отраслях промышленности. Композиты позволяют сочетать свойства разнородных материалов для достижения превосходных характеристик и при этом обладают уникальными свойствами, недостижимыми для однокомпонентных материалов.

Одним из перспективных направлений исследований в последние годы стали композиты на основе металла и графена, которые демонстрируют высокую прочность, коррозионностойкость, и др. [1-2]. Графен даже в небольших концентрациях (0,1 %), в качестве компонента в композиционном материале способен существенно улучшить физико-механические свойства однокомпонентного исходного материала [3].

По данным [4] значительное улучшение механических свойств графенового композита было достигнуто даже при низком содержании графена. Улучшение прочности на разрыв на 150 % и увеличение модуля Юнга почти в 10 раз были достигнуты при добавлении 1,8 об. % графена. Работа [5] показывает систематические тенденции в изменении механической жесткости композита в зависимости от концентрации наполнителя, его размера и формы, а также прочности взаимодействия между матрицей и наполнителем. Результаты показывают слабую зависимость увеличения жесткости

структуры при добавлении фуллеренов разного размера, но существенную зависимость жесткости от размера графена. Это свидетельствует о потенциале применения графена для создания композитов с улучшенными механическими характеристиками. Более подробное обсуждение возможностей применения графена для упрочнения композитов было рассмотрено в работе [6].

Графен сам по себе является одним из самых прочных из когда-либо созданных человеком материалов [7-8], при этом он обладает уникальной способностью к изгибу и растяжению без потери устойчивости. Однако его применение ограничено проблемами, такими как высокая стоимость синтеза и отсутствие эффективных методов массового производства. Очень большое значение имеет появление дефектов в графене, наличие которых приводит к уменьшению его прочности [9]. При этом использование графена в композитах имеет несомненное преимущество: его использование в составе композита не требует фиксации двумерной геометрии. Более того, на основе графена могут быть разработаны новые двумерные материалы.

В 2016 впервые были получены новые углеродные сотовые структуры. В данных работах сообщают об исключительно устойчивом аллотропе углерода, который представляет собой графеновые соты, полученного осаждением сублимированного в вакууме графита [10]. Данные аллотропные структуры получены на осно-

ве данных низкотемпературной электронографии и электронной микроскопии. Эти структуры могут быть как периодическими, так и случайными и строятся из sp^2 -связанных атомов углерода. Подобные структуры можно рассматривать как трехмерный графен. Они демонстрируют хорошее поглощение различных газов, недостижимые в других формах углерода, таких как фуллериты или нанотрубки. Эти сотовые конструкции можно использовать не только для хранения различных газов и жидкостей, но и в качестве матрицы для новых композитов [11], о чем прямо говорили экспериментаторы в своих работах.

При изучении новых материалов, синтезировать которые на практике затруднительно или пока невозможно, роль молекулярной динамики (МД) неопределима. Эта точка зрения отражена в работах группы Старостенкова М.Д., где метод МД применяют для изучения различных аспектов материаловедения [12-14]. Например, в исследовании [15] показана эффективность МД в моделировании сложного поведения материала в уникальных условиях, таких как воздействие лазерного импульса. Эта работа не только подчеркивает адаптивность метода МД в различных сценариях, но и его точность в анализе сложных физических явлений на молекулярном уровне. Анализ возможности моделирования композитов на основе графена и металла представлен в работе [16].

Целью данной работы является исследование устойчивости и механических свойств нанокompозита на основе никеля и ячеистой графеновой структуры. В работе посредством молекулярной динамики исследована прочность такого композита при сжатии и растяжении.

Методика моделирования

Для проведения МД моделирования использовался программный пакет LAMMPS (Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator) [21-23] широко распространенный и хорошо зарекомендовавший себя в сообществе вычислителей как универсальное и гибкое программное обеспечение для МД-моделирования.

В данной работе было подготовлено две исходные структуры: кристалл чистого никеля и композит – углеродная сотовая структура, заполненная никелем. Для сопоставления результатов композит и кристалл никеля создавались таким образом, чтобы их размеры были максимально приближенными. Далее композитная структура на основе ячеистой графеновой сет-

ки, заполненной никелем будет называться для простоты просто композитом.

Была использована собственная программа для создания исходной структуры композита [17]. Исходная ячеистая структура композита создавалась из графеновых нанолент, соединенных ковалентными связями под углом 120° . Подобные углеродные структуры (“honeycomb graphene aerogel”) были ранее неоднократно изучены и получены экспериментально [18-20]. Полости данной ячеистой структуры были заполнены кристаллами никеля таким образом, чтобы расстояние между стенкой графеновой ячейки и ближним слоем металла было не менее 1.8 \AA . При соблюдении данного расстояния наблюдается минимальное напряжение между атомами углерода и никеля. Полученная структура имела размеры $147 \times 149 \times 63 \text{ \AA}$ в плоскости X-Y-Z. Содержание углерода составило 34.9 % от общего числа атомов в структуре. Проекция полученного композита на плоскость XY показана на рис.1.

Подобно графену, ячеистая графеновая структура имеет два основных направления – зигзаг (вдоль оси Y) и кресло (вдоль оси X).

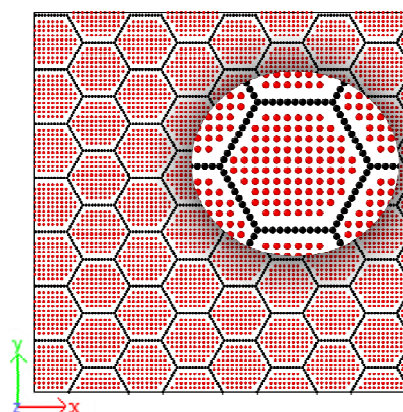


Рис.1. Композит на основе ячеистого графена, заполненного никелем в проекции на плоскость XY

Fig.1. Composite based on cellular graphene filled with nickel in projection onto the XY plane

В данной работе были использованы эмпирические потенциалы из библиотеки LAMMPS. Взаимодействие между атомами углерода определял парный потенциал AIREBO. Для взаимодействий никель – никель использовался EAM-FS потенциал Менделеева [24]. Взаимодействие между атомами углерода и никеля определялось парным эмпирическим потенциалом Морзе.

На всех этапах компьютерного эксперимента использовалась расчетная ячейка с периодическими граничными условиями во всех

трех направлениях. Для всех расчетов при моделировании использовался временной шаг 1 фс.

Для подготовки структур к дальнейшим испытаниям на растяжение исходные структуры подверглась процессу глубокой релаксации при температуре 0 К до достижения минимальных напряжений на стенках расчетной ячейки.

Для моделирования растяжения применена одноосная деформация со скоростью $5 \cdot 10^{-3} \text{ пс}^{-1}$. Во время моделирования растяжения применялся изотермически-изобарический ансамбль для поддержания температуры равной 0 или 300 К и давления равным 0 Па на стенах ячейки моделирования.

Результаты исследования

Релаксация структуры

На первоначальных этапах релаксации наблюдается изменение в укладке атомов никеля, заполняющих ячеистую углеродную структуру. Пример показан на рис.2, где представлена в увеличенном виде часть ячейки моделирования. Черным показаны атомы углерода, красным – атомы металла.

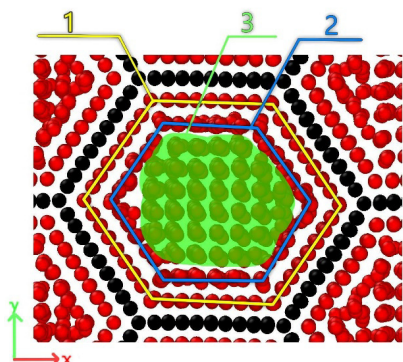


Рис.2. Часть расчетной ячейки в увеличенном виде после глубокой релаксации. Черным показаны атомы углерода, красным – атомы металла. Линии укладки атомов в разных слоях отмечены линиями разного цвета. Зеленым показана область, где атомы никеля сохранили первоначальное состояние

Fig.2. Part of the calculation cell in an enlarged form after deep relaxation. Carbon atoms are shown in black color, metal atoms are shown in red color. The lines of arrangement of atoms in different layers are marked with lines of different colors. Green color shows the area where the nickel atoms have retained their original state

В процессе релаксации меняется укладка слоев никеля вблизи стенок углеродной ячейки-

стой структуры. Желтый шестигранник 1 на рисунке выделяет атомы никеля, которые в процессе релаксации укладываются параллельно ближайшей графеновой стенке. Синий шестигранник 2 на рисунке выделяет атомы никеля, которые выстраиваются вблизи атомов шестигранника 1 в переходное аморфное состояние. И, наконец, область 3 выделяет атомы никеля, которые сохраняют свою изначальную укладку.

Таким образом, релаксация в основном меняет укладку атомов никеля лишь вблизи стенок углеродной структуры.

Деформация сжатия

После релаксации было исследовано деформационное поведение композита в условиях двусосного сжатия вдоль осей X и Y. В процессе сжатия решетка никеля продолжала меняться. Пример показан на рис.3, где представлена в увеличенном виде часть ячейки моделирования после сжатия до 10%.

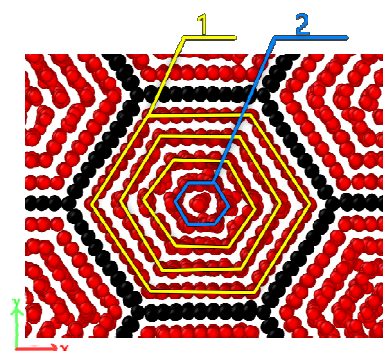


Рис.3. Часть расчетной ячейки в увеличенном виде после двусосного сжатия на 10 % вдоль X и Y. Черным показаны атомы углерода, красным – атомы металла. Линии укладки атомов в разных слоях отмечены линиями

Fig.3. Part of the calculation cell in an enlarged form after biaxial compression by 10 % along X and Y. Carbon atoms are shown in black color, metal atoms are shown in red color. The stacking lines of atoms in different layers are marked with lines

В процессе сжатия происходит дальнейшее изменение укладки слоев никеля внутри шестигранников. Желтыми линиями показана область 1, где слои никеля укладывались в шестигранники, постепенно упорядочиваясь, слой за слоем. Видно, что теперь большая часть вставленного в углеродную соту никеля имеет определенную укладку, следующую форме углеродной соты. Лишь в центре остается область 2, где атомы не уложены в столь идеальные слои,

однако видна тенденция к формированию еще одного уложенного в шестигранники слоя.

Полученный после сжатия композит снова релаксировался при 0 К. В результате структура не утратила устойчивости, и сформировавшаяся укладка слоев никеля сохранилась. Таким образом, сжатие на 10 % по оси X и Y позволяет упорядочить атомы никеля внутри углеродной сетки и управлять структурой композита.

Одноосное растяжение

Три структуры были исследованы на одноосное растяжение:

1. чистый кристалл никеля;
2. композит после релаксации (см. рис.2);
3. композит после сжатия с атомами никеля, уложенными в слои вдоль углеродных стенок (см. рис.3).

Каждая из рассматриваемых структур была предварительно отрелаксирована до достиже-

ния состояния с минимумом потенциальной энергии и минимальными напряжениями. Растяжение проводилось вдоль хиральности кресло графеновой стенки (ось X) в первом случае и вдоль хиральности зигзаг графеновой сетки (ось Y) во втором случае.

На рис.4 изображены графики зависимости напряжения от деформации для трех исследуемых структур для растяжения вдоль направления кресло (а) и зигзаг (б). Черной линией показана кривая напряжение-деформация для чистого никеля, красной линией – для структуры композита после релаксации, синей линией – для структуры композита, растянутой после сжатия. Кривая во всех трех случаях меняется нелинейно до предела текучести.

На рис.5 и 6 показана структура, полученная в процессе растяжения вдоль двух направлений при $\varepsilon = 0,55$ и вид при разрушении соответственно.

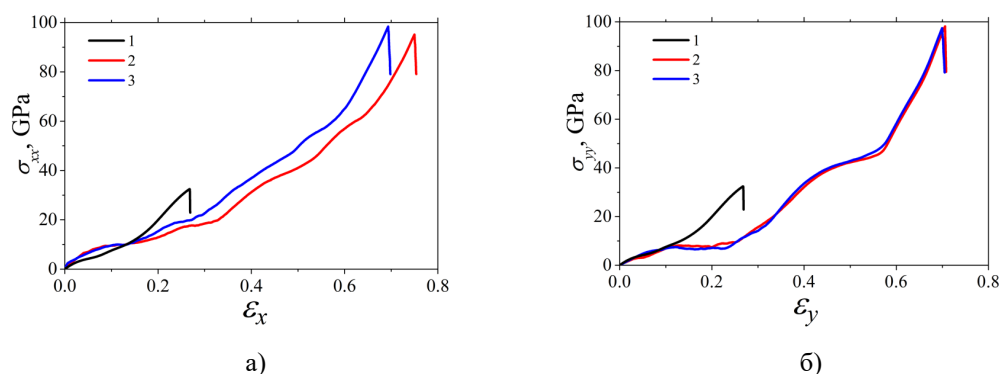


Рис.4. Зависимость напряжения от деформации при растяжении (а) вдоль направления кресло (X), и (б) вдоль направления зигзаг (Y) для трех исследуемых структур

Fig.4. Dependence of stress on tensile strain (a) along the chair direction (X), and (b) along the zigzag direction (Y) for the three structures under study

Из рис. 4а видно, что предварительное сжатие уменьшает деформацию разрыва композита (красная кривая лежит дальше, чем синяя) при растяжении вдоль направления кресло. При этом при растяжении в направлении зигзаг такого отличия не наблюдается. Кроме того, анизотропия структуры сама по себе на прочность практически не влияет. На всех кривых виден небольшой линейный участок до $\varepsilon = 0,05$, где происходит упругая деформация. Изменения наклона кривых объясняется изменением углеродной ячеистой структуры в процессе деформации.

Следует отметить наличие плато на кривой от $\varepsilon = 0,1$ до $\varepsilon = 0,15$ при растяжении в направлении кресло и от $\varepsilon = 0,1$ до $\varepsilon = 0,25$ при растя-

жении в направлении зигзаг. Это объясняется изменением решетки ячеистого графена, которое на первых этапах деформирования происходит относительно легко, что также ранее было описано на примере чистой ячеистой структуры.

На рисунке 5 показан композит во время растяжения вдоль оси X (а) и вдоль оси Y (б) при $\varepsilon = 0,55$. При растяжении вдоль направления кресло, ячеистая решетка трансформируется, происходит вытягивание сотовых ячеек вдоль направления растяжения. Часть атомных плоскостей металла укладывается вдоль стенок сот, а часть – в плоские слои в центре углеродной соты.

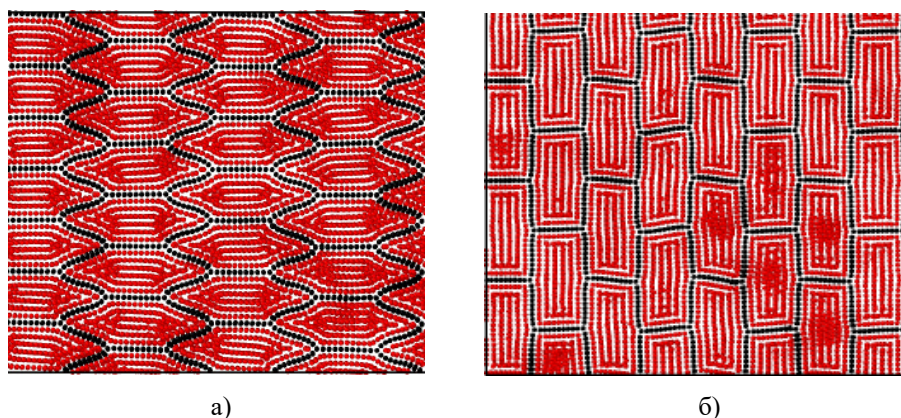


Рис.5. Проекция структуры на плоскость XY при растяжении при $\varepsilon = 0.55$ (а) вдоль направления кресло (X), (б) вдоль направления зигзаг (Y). Черным показаны атомы углерода, красным – атомы никеля

Fig.5. Projection of the structure onto the XY plane under tension at $\varepsilon = 0.55$ (a) along the chair direction (X), (b) along the zigzag direction (Y). Carbon atoms are shown in black color, nickel atoms are shown in red color

Как видно, при растяжении вдоль направления зигзаг атомы никеля укладывались в полосы вдоль направления растяжения и параллельно стенкам графеновой структуры, которые в свою очередь образовывали прямоугольники вместо шестигранников. На кривой напряжение-деформация (рис.4б) в промежутке относительного удлинения от 0,1 до 0,2, и в промежутке относительного удлинения от 0,45 до 0,55 рост напряжений замедляется. Но по завершению структурных изменений наступает период, для которого характерно ускоренное, по сравнению с предыдущим, увеличение напряжений без перестроек в промежутке относительного удлинения от 0,6 до 0,7. Сформированная структура уже является неравновесной, сильнонапряженной. В центре некоторых углеродных ячеек формируются зоны аморфного

металла. У композита при растяжении вдоль направления кресло поведение прямой отличается, поскольку у ячеистой структуры вдоль хиральности кресло меньший потенциал к перестроению. Подобное явление, когда различается характер растяжения в зависимости от хиральности, вдоль которой происходит растяжение, уже наблюдалось в статье [25], где исследовалось деформационное поведение углеродных сотовых структур без включений никеля.

Превышение напряжений ведет к формированию в композите трещин и дислокаций, после чего начинается резкое падение напряжения и разрушение графеновых пластин, что показано на рис.6. Разрыв в обоих случаях происходит вдоль направления растяжения на самых напряженных участках графеновой сетки.

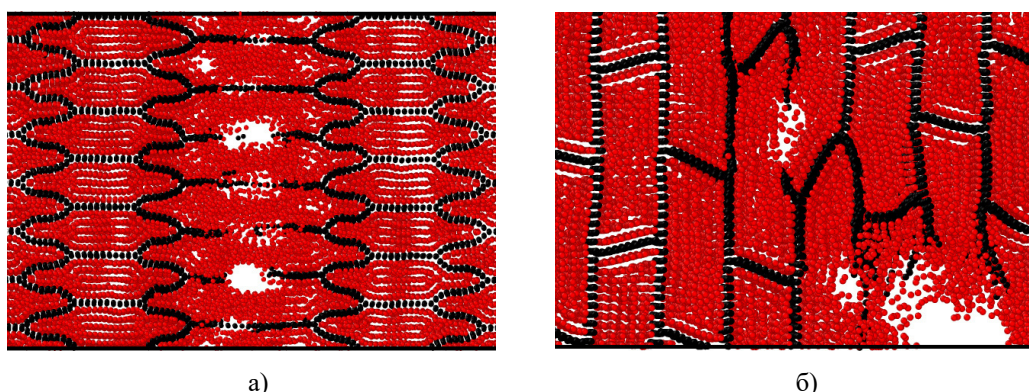


Рис.6. Композит в момент разрушения при растяжении а) вдоль направления кресло (ось X), б) вдоль направления зигзаг (ось Z). Черным показаны атомы углерода, красным – атомы никеля.

Показана часть расчетной ячейки

Fig.6. Composite at the moment of fracture in tension a) along the chair direction (X axis), b) along the zigzag direction (Z axis). Carbon atoms are shown in black color, nickel atoms are shown in red color. Part of the calculation cell is shown

Одноосное растяжение при 300 К

Для анализа влияния температуры на прочность композита проводились численные испытания на растяжения трех структур при комнатной температуре 300 К.

Предварительно отрелаксированные структуры подвергались выдержке при 300 К с последующей минимизацией энергий. После этого проводилось испытание на растяжение, при изотермически-изобарическом ансамбле, который поддерживал температуру 300 К, а давление на стенках расчетной ячейки нулевым. Далее представлены результаты одноосного растяжения при 300 К.

На рисунке 7 красной линией 1 изображена кривая напряжений для структуры без предварительного сжатия. Синяя линия 2 показывает напряжение для структуры с предварительным сжатием. Черная линия 3 изображает напряжения для никеля. Пунктирными линиями пока-

заны для сравнения кривые напряжение-деформация, полученные при температуре 0 К. Как видно, температура слабо влияет на ход кривых напряжение-деформация при растяжении композита. Тем не менее, предел прочности понижается на 15-20 ГПа по сравнению с пределом прочности при 0 К. Из важных отличий следует отметить, что если кривые напряжение-деформация для растяжения вдоль направления зигзаг при 0 К полностью совпадали, то при растяжении при 300 К наблюдается отличие в величине деформации разрыва. То есть, тепловые флуктуации приводят к тому, что сжатая структура становится более равновесной, менее напряженной и выдерживает большие растягивающие деформации. При этом, повышение температуры понижает деформацию, при которой происходит разрыв для предварительно несжатого композита.

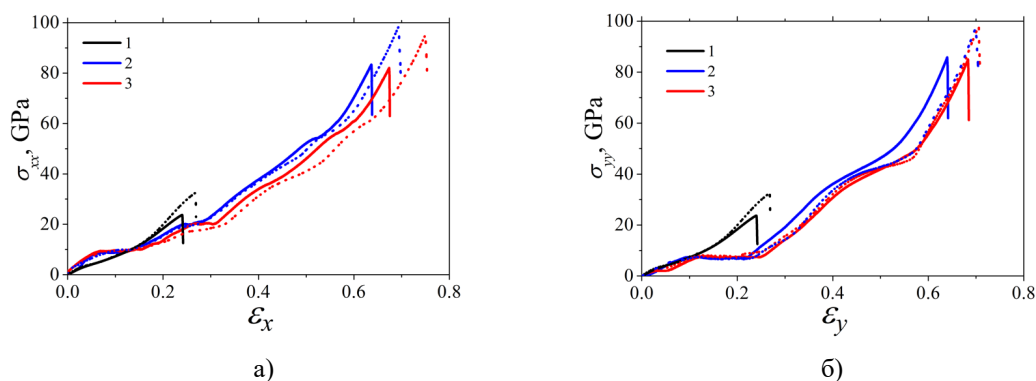


Рис.7. Зависимость давления от относительной деформации при 300К (а) при растяжении вдоль направления кресло (ось X) и (б) при растяжении вдоль направления зигзаг (ось Y) (сплошные линии). Пунктирной линией показаны кривые напряжение-деформация, полученные при температуре 0 К

Fig.7. Dependence of pressure on relative strain at 300K (a) when stretched along the chair direction (X-axis) and (b) when stretched along the zigzag direction (Y-axis) (solid lines). The dotted line shows the stress-strain curves obtained at 0 K

Структура в процессе растяжения при 300 К демонстрирует тот же характер деформации, что и при 0 К. Разрушение композита происходит аналогично тому, как это показано на рис.6 для растяжения при 0 К.

Обсуждение результатов

Начальные стадии релаксации демонстрируют способность никеля к структурной адаптации. Исходная ГЦК-решетка никеля меняется, и атомные слои укладываются параллельно стенкам ячейки структуры. В центре ячейки этот порядок укладки атомов никеля нарушен.

Данное явление, можно объяснить высокой энергией взаимодействия атомов никеля и графеновых стенок. Кристалл никеля в остальном не претерпевал изменений, как и графеновые стенки, что свидетельствует о том, что они находятся в стабильном состоянии устойчивого равновесия. Такое поведение предполагает высокую степень адаптивности композита в ответ на внешние условия. При двухосном сжатии еще больше атомов никеля укладываются параллельно стенкам графеновых ячеек.

Результаты одноосного растяжения показывают значительное улучшение механических характеристик композита над однокомпонент-

ным материалом, что можно увидеть из таблицы 1. Наблюдается некоторая разница в растяжении вдоль направления кресло и зигзаг. Однако наличие металла понижает анизотропию структуры по сравнению с чистой графеновой сеткой.

Хотя характер деформации при одноосном растяжении остается постоянным при 0 и

300 К, общая прочность композита снижается при температуре 300 К. Это понижение можно объяснить повышенной подвижностью дефектов и дислокаций при более высоких температурах. Предположительно, при дальнейшем увеличении температуры прочностные характеристики структуры продолжат снижаться.

Таблица 1. Критические значения деформации разрыва и прочность на разрушение

Table 1. Critical values of tensile strain and fracture strength

Структура	Направление растяжения	Деформация разрушения	Прочность на разрушение σ , ГПа
Никель	—	0,24	23,70
Композит после релаксации	кресло	0,74981	95,13023
	зигзаг	0,70	97,44
Композит после сжатия	кресло	0,69343	98,35553
	зигзаг	0,71	98,15

Выводы

Методом молекулярной динамики исследована устойчивость и прочность нового композитного материала на основе ячеистой углеродной структуры, заполненной никелем.

Результаты данного исследования показывают, что решетка никеля перестраивается при взаимодействии со стенками углеродной сотовой структуры. После релаксации структура находится в равновесном состоянии, что свидетельствует о том, что композит устойчив.

Композит демонстрирует существенное превосходство механических характеристик над однокомпонентным кристаллом никеля, а поведение структуры в процессе деформации сопоставимо с работами [25-29], где исследовалась прочность чистой углеродной ячеистой структуры.

Повышение температуры отрицательно влияет на механические характеристики композита.

Список литературы

1. Chen X., Fu K., Li Y. A theoretical modeling of strengthening mechanism in graphene-metal nanolayered composites // *International Journal of Engineering Science*. 2024. V. 195. 103988.

2. Zhang Q., Yang J., Dong S. Review on 3D-printed graphene-reinforced composites for structural applications // *Composites Part A: Applied Science and Manufacturing*. 2023. V. 167. 107420.

3. Rafiee J., Wang Z., Song H., Yu Z.-Z., Koratkar N. Enhanced mechanical properties of nanocomposites at low graphene content // *ACS Nano*. 2009. V. 3, N 12. P. 3884–3890.

4. Zhao X., Zhang Q., Chen D., Lu P. Enhanced mechanical properties of graphene-based poly (vinyl alcohol) composites // *Macromolecules*. 2010. V. 43, N5. P. 2357–2363.

5. Weerasinghe A., Maroudas D., Ramasubramaniam A. Mechanical Properties of Graphene-Polymer Nanocomposites // *APS March Meeting Abstracts*. 2017. N 31735. P. 1–9.

6. Kumar A., Sharma K., Dixit A.R. A review on the mechanical properties of polymer composites reinforced by carbon nanotubes and graphene // *Carbon Letters*. 2021. V. 31, N 2. P. 149–165.

7. Lee C., Wei X., Kysar J.W., Hone J. Measurement of the elastic properties and intrinsic strength of monolayer graphene // *Science*. 2008. V. 321, N 5887. P. 385–388.

8. Dmitriev S.V., Baimova J.A., Savin A.S., Kivshar Yu.S. Ultimate strength, ripples, sound velocities, and density of phonon states of strained graphene // *Computational Materials Science*. 2012. V. 53, N 1. P. 194–203.

9. Baimova J.A., Bo L., Dmitriev S.V., Zhou K., Nazarov A. Effect of Stone-Thrower-Wales defect on structural stability of graphene at zero and finite temperatures // *Europhysics Letters*. 2013. V. 103, N 4. 46001
10. Krainyukova N.V., Zubarev E.N. Carbon honeycomb high capacity storage for gaseous and liquid species // *Physical review letters*. 2016. V. 116, N 5. 055501.
11. Yu C., Youn J.R., Song Y.S. Reversible thermo-electric energy harvesting with phase change material (PCM) composites // *J. Polym. Res.* 2021. V. 28. P. 279.
12. Yankovskaya U.I., Zakharov P.V., Markidonov A.V., Starostenkov M.D., Korznikova E.A. Mechanical properties of CNT-reinforced Pt under compression: molecular dynamics simulation // *Materials Physics and Mechanics*. 2023. V. 51, N 3. P. 167–174.
13. Markidonov A.V., Starostenkov M.D., Gostevskaya A.N., Lubyanyoy D.A., Zakharov P.V. Modeling by a Molecular Dynamics Method of Structural Changes of a BCC Metal Surface Layer with Short-Term High-Energy External Action // *Metal Science and Heat Treatment*. 2022. V. 64. P. 258–263
14. Cherednichenko A.I., Zakharov P.V., Starostenkov M.D., Eremin A.M., Dong G. Analysis of the EAM and MEAM Potentials for Modeling Localized States of the Ni₃Al and Pt₃Al Crystals // *Technical Physics Letters*. 2022. V. 48, N 6. P. 245–249.
15. Markidonov A.V., Starostenkov M.D., Gostevskaya A.N., Lubyanyoy D.A., Zakharov P.V. Molecular Dynamics Simulation of Reduction of the Surface Layer Porosity in a BCC Crystal Induced by Laser Pulses // *Physics of the Solid State*. 2023. V. 65. P. 53–57.
16. Safina L.R., Krylova K.A., Baimova J.A. Molecular dynamics study of the mechanical properties and deformation behavior of graphene/metal composites // *Materials Today Physics*. 2022. V. 28. 100851.
17. Сафина Л.Р., Тувалев И.И., Полякова П.В., Баймова Ю.А., Мурзаев Р.Т. Создание ячеистой сотовой структуры из листов графена с возможностью внедрения наночастиц металлов. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2023686248, 05 декабря 2023 г.
18. Baimova J.A., Shcherbinin S.A. Strength and Deformation Behavior of Graphene Aerogel of Different Morphologies // *Materials*. 2023. V. 16, N 23. 7388.
19. Zhang Z., Kutana A., Yang Y., Krainyukova N.V., Penev E.S., Yakobson B.I. Nanomechanics of carbon honeycomb cellular structures // *Carbon*. 2017. V. 113. P. 26–32.
20. Pang Z., Gu X., Wei Y., Yang R., Dresselhaus M.S. Bottom-up Design of Three-Dimensional Carbon-Honeycomb with Superb Specific Strength and High Thermal Conductivity // *Nano Lett.* 2016. V. 17, N 1. P. 179–185.
21. LAMMPS Molecular Dynamics Simulator: [Электронный ресурс] – Режим доступа <https://www.lammps.org>. Дата обращения: 09.04.2024.
22. Plimpton S. Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics // *Journal of computational physics*. 1995. V. 117, N 1. P. 1–19.
23. Thompson A.P., Aktulga H.M., Berger R., Bolintineanu D.S., Brown W.M. et al. LAMMPS—a flexible simulation tool for particle-based materials modeling at the atomic, meso, and continuum scales // *Computer Physics Communications*. 2022. V. 271. 108171.
24. Mendeleev M.I., Kramer M.J., Hao S.G., Ho K.M., Wang C.Z. Development of interatomic potentials appropriate for simulation of liquid and glass properties of NiZr₂ alloy // *Philosophical Magazine*. 2012. V. 92, N 35. P. 4454–4469.
25. Greshnyakov V.A., Pavlik V.V. Calculations of the structure and properties of autointercalated graphyne layers // *Letters on Materials*. 2023. V. 13, N 4. P. 323–328.
26. Safina L.R., Baimova J.A., Mulyukov R.R. Nickel nanoparticles inside carbon nanostructures: Atomistic simulation // *Mechanics of Advanced Materials and Modern Processes*. 2019. V. 5, N 1. P. 1–11.
27. Sozykin S.A., Bartashevich E.V. The adsorption modeling of bisphenol A derivatives on the surface of carbon materials // *Letters on Materials*. 2022. V. 12, N 4. P. 316–320.
28. Katin K.P., Kaya S., Maslov M.M. Graphene nanoflakes and fullerenes doped with aluminum: features of Al–C interaction and adsorption characteristics of carbon shell // *Letters on Materials*. 2022. V. 12, N 2. P. 148–152.

Информация об авторах

И. И. Тувалев – магистрант Уфимского государственного нефтяного технического университета; стажер-исследователь лаборато-

рии Института проблем сверхпластичности металлов РАН.

Р. Т. Мурзаев – кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник Института проблем сверхпластичности металлов РАН.

References

1. Chen, X., Fu K. & Li, Y. (2024). A theoretical modelling of strengthening mechanism in graphene-metal nanolayered composites. *International Journal of Engineering Science*, 195, 103988.
2. Zhang, Q., Yang, J. & Dong, S. (2023). Review on 3D-printed graphene-reinforced composites for structural applications. *Composites Part A: Applied Science and Manufacturing*, 167, 107420.
3. Rafiee, J., Wang, Z., Song, H., Yu, Z.-Z. & Koratkar, N. (2009). Enhanced mechanical properties of nanocomposites at low graphene content. *ACS Nano*, 3(12), 3884–3890.
4. Zhao, X., Zhang, Q., Chen, D. & Lu, P. (2010). Enhanced mechanical properties of graphene-based poly (vinyl alcohol) composites. *Macromolecules*, 43(5), 2357–2363.
5. Weerasinghe, A., Maroudas, D. & Ramasubramaniam, A. (2017). Mechanical Properties of Graphene-Polymer Nanocomposites. *APS March Meeting Abstracts*, (31735), 1–9.
6. Kumar, A., Sharma, K. & Dixit, A. R. (2021). A review on the mechanical properties of polymer composites reinforced by carbon nanotubes and graphene. *Carbon Letters*, 31(2), 149–165.
7. Lee, C., Wei, X., Kysar, J. W. & Hone, J. (2008). Measurement of the elastic properties and intrinsic strength of monolayer graphene. *Science*, 321(5887), 385–388.
8. Dmitriev, S. V., Baimova, J. A., Savin, A. S. & Kivshar, Yu. S. (2012). Ultimate strength, ripples, sound velocities, and density of phonon states of strained graphene. *Computational Materials Science*, 53(1), 194–203.
9. Baimova, J. A., Bo, L., Dmitriev, S. V., Zhou, K. & Nazarov, A. (2013). Effect of Stone-Thrower-Wales defect on structural stability of graphene at zero and finite temperatures. *Europhysics Letters*, 103(4), 46001
10. Krainyukova, N. V. & Zubarev, E. N. (2016). Carbon honeycomb high capacity storage for gaseous and liquid species. *Physical Review Letters*, 116(5), 055501.
11. Yu, C., Youn, J. R. & Song, Y. S. (2021). Reversible thermo-electric energy harvesting with phase change material (PCM) composites. *J. Polym. Res.*, 28, 279.
12. Yankovskaya, U. I., Zakharov, P. V., Markidonov, A. V., Starostenkov, M. D. & Korznikova, E. A. (2023). Mechanical properties of CNT-reinforced Pt under compression: molecular dynamics simulation. *Materials Physics and Mechanics*, 51(3), 167–174.
13. Markidonov, A. V., Starostenkov, M. D., Gostevskaya, A. N., Lubyanyoy, D. A. & Zakharov, P. V. (2022). Modeling by a Molecular Dynamics Method of Structural Changes of a BCC Metal Surface Layer with Short-Term High-Energy External Action. *Metal Science and Heat Treatment*, 64, 258–263
14. Cherednichenko, A. I., Zakharov, P. V., Starostenkov, M. D., Eremin, A. M. & Dong, G. (2022). Analysis of the EAM and MEAM Potentials for Modeling Localized States of the Ni₃Al and Pt₃Al Crystals. *Technical Physics Letters*, 48(6), 245–249.
15. Markidonov, A. V., Starostenkov, M. D., Gostevskaya, A. N., Lubyanyoy, D. A. & Zakharov, P. V. (2023). Molecular Dynamics Simulation of Reduction of the Surface Layer Porosity in a BCC Crystal Induced by Laser Pulses. *Physics of the Solid State*, 65, 53–57.
16. Safina, L. R., Krylova, K. A. & Baimova, J. A. (2022). Molecular dynamics study of the mechanical properties and deformation behavior of graphene/metal composites. *Materials Today Physics*, 28, 100851.
17. Safina, L. R., Tuvalev, I. I., Polyakova, P. V., Baimova, Yu. A. & Murzayev, R. T. Sozdaniye yacheistoy sotovoy struktury iz listov grafena s vozmozhnost'yu vnedreniya nanochastiits metallo. Svidetel'stvo o gosudarstvennoy registratsii programmy dlya EVM № 2023686248, 05.12.2023. (In Russ.).
18. Baimova, J. A. & Shcherbinin, S. A. (2023). Strength and Deformation Behavior of Graphene Aerogel of Different Morphologies. *Materials*, 16(23), 7388.
19. Zhang, Z., Kutana, A., Yang, Y., Krainyukova, N. V., Penev, E. S. & Yakobson, B. I. (2017). Nanomechanics of carbon honeycomb cellular structures. *Carbon*, 113, 26–32.
20. Pang, Z., Gu, X., Wei, Y., Yang, R. & Dresselhaus, M. S. (2016). Bottom-up Design of Three-Dimensional Carbon-Honeycomb with Su-

perb Specific Strength and High Thermal Conductivity. *Nano Lett.*, 17(1), 179–185.

21. LAMMPS Molecular Dynamics Simulator: [Electronic resource] – Access mode <https://www.lammps.org>. Date of the application: 09.04.2024.

22. Plimpton, S. (1995). Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics. *Journal of computational physics*, 117(1), 1–19.

23. Thompson, A. P., Aktulga, H. M., Berger, R., Bolintineanu, D. S. & Brown, W. M. et al. (2022). LAMMPS—a flexible simulation tool for particle-based materials modeling at the atomic, meso, and continuum scales. *Computer Physics Communications*, 271, 108171.

24. Mendeleev, M. I., Kramer, M. J., Hao, S. G., Ho, K. M. & Wang, C. Z. (2012). Development of interatomic potentials appropriate for simulation of liquid and glass properties of NiZr₂ alloy. *Philosophical Magazine*, 92(35), 4454–4469.

25. Greshnyakov, V. A. & Pavlik, V. V. (2023). Calculations of the structure and properties of autointercalated graphyne layers. *Letters on Materials*, 13(4), 323–328.

26. Safina, L. R., Baimova, J. A. & Mulyukov, R. R. (2019). Nickel nanoparticles inside carbon nanostructures: Atomistic simulation. *Mechanics of Advanced Materials and Modern Processes*, 5(1), 1–11.

27. Sozykin, S. A. & Bartashevich, E. V. (2022). The adsorption modeling of bisphenol A derivatives on the surface of carbon materials. *Letters on Materials*, 12(4), 316–320.

28. Katin, K. P., Kaya, S. & Maslov, M. M. (2022). Graphene nanoflakes and fullerenes doped with aluminum: features of Al–C interaction and adsorption characteristics of carbon shell. *Letters on Materials*, 12(2), 148–152.

Information about the authors

I. I. Tuvalev – Undergraduate Student, Ufa State Petroleum Technological University; Research intern at the Institute for Metals Superplasticity Problems of the Russian Academy of Sciences.

R. T. Murzaev – Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Senior Researcher at the Institute for Metals Superplasticity Problems of the Russian Academy of Sciences.

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.
The authors declare that there is no conflict of interest.

Статья поступила в редакцию 09.04.2024; одобрена после рецензирования 17.05.2024; принята к публикации 27.05.2024.

The article was received by the editorial board on 09 Apr. 24; approved after reviewing 17 May 24; accepted for publication 27 May 24.

Научная статья

1.3.8. Физика конденсированного состояния (физико-математические науки)

УДК 541.65.654

doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2024.02.007

ВРАЩЕНИЯ ПЛОСКОСТИ ПОЛЯРИЗАЦИИ СВЕТОВОГО ИЗЛУЧЕНИЯ В НЕМАТИЧЕСКИХ ЖИДКИХ КРИСТАЛЛАХ

Мухтор Хасанович Эгамов

Худжандский научный центр Национальной Академии наук Таджикистана, Северо-восточная пром. зона, 735714, Худжанд, Республика Таджикистан
egamov62@mail.ru, <https://orcid.org/0009-0003-2319-3677>

Аннотация. Мягким материям характерно существования эффекта двулучепреломления, который легко контролируется внешними факторами. Названный эффект позволяет моделировать светового излучение оптического диапазона по ряду волновых параметров, поскольку он непосредственно связан с анизотропией показателя преломления. Последний аргумент позволяет изменять ориентацию плоскости поляризации прошедшего через образец светового излучения. При введении последних в ЖК среде, анизотропия показателя преломления (Δn) сильно меняется. Для улучшения оптических характеристик жидкокристаллических ячеек, такие как: яркости, контраста и быстродействия, применяются специальные ориентирующие поверхности с заранее выбранной морфологии, а их объем заполняется наночастицами или поверхностно-активными веществами (ПАВ). Однако, введения таких частиц вызывает рассеяние светового излучения, сопровождающий снижения степени поляризации прошедших излучений. Поэтому с целью снижения нежелательных потерь интенсивности моделируемого светового излучения, необходимо решать задачу согласования ЖК элементов с оптической схемой устройства по положению плоскости поляризации. Нами исследовано влияние ПАВ в виде цетилтриметил аммоний бромида (ЦТАБ) в нематических жидкокристаллических ячейках типа 4-пентил-4'-цианобифенила 5СВ. В результате приложении электрического поля показали, что для исходного НЖК 5СВ и ячейки с концентрацией 0,05 % ЦТАБ-а световые излучения, прошедшие через ячейки, можно воспринимать как поляризованным, так как отношение I_{ox}/I_{oy} больше 100; в ячейках, содержащие НЖК 5СВ и концентрации 0,1 и 0,3 вес. % ЦТАБ-а, световые излучения можно считать линейно поляризованным, когда выполняется условия $10 < I_{ox}/I_{oy} < 100$; а ячейка с содержанием 0,5 вес. % ПАВ-а служит средством для получения эллиптической поляризации света. В последнем случае имеет место условия I_{ox}/I_{oy} меньше 100. Для интерпретации полученных результатов мы учитывали влияние ПАВ ЦТАБ на положения директора НЖК 5СВ Установлена взаимосвязь между концентрациями вводимого ПАВ и углом поворота плоскости поляризации. Указаны четкие границы линейной и эллиптической поляризации прошедшего через ячейку света в зависимости от концентрации ПАВ ЦТАБ. Предложены возможные применения таких материалов в полупроводниковой и твердотельной лазерной технике, и дисплейных технологиях.

Ключевые слова: поверхностно-активное вещество, жидкий кристалл, светопропускания, ориентация, оптическая анизотропия, плоскость поляризации.

Благодарности: Работа выполнена в рамках проекта «Исследование структуры, механические и оптические свойства новых оптоэлектронных элементов на основе полимерно-жидкокристаллических композитов» на 2021-2025 гг., за № 0121TJ1107 от 10.03.2021 г. и финансируемой из госбюджета Республики Таджикистана.

Для цитирования: Эгамов М.Х. Вращения плоскости поляризации светового излучения в нематических жидких кристаллах // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2024. Т. 21, № 2. С. 199–204. doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2024.02.007.

Original article

ROTATION OF THE PLANE POLARIZATION OF LIGHT RADIATION IN NEMATIC LIQUID CRYSTALS

Mukhtor Kh. Egamov

Khujand Scientific Center of the National Academy of Sciences of Tajikistan. Nord-East Prom. Zone, Khujand, 735714, Tajikistan
egamov62@mail.ru, <https://orcid.org/0009-0003-2319-3677>

Abstract. Soft materials are characterized by the existence of a birefringence effect, which is easily controlled by external factors. This effect makes it possible to simulate the light emission of the optical range by a number of wave parameters, since it is directly related to the anisotropy of the refractive index. The last argument allows you to change the orientation of the polarization plane of the light radiation transmitted through the sample. When the latter are introduced into the LCD medium, the anisotropy of the refractive index (Δn) varies greatly. To improve the optical characteristics of liquid crystal cells, such as brightness, contrast and speed, special orienting surfaces with a pre-selected morphology are used, and their volume is filled with nanoparticles or surfactants. However, the introduction of such particles causes scattering of light radiation, accompanying a decrease in the degree of polarization of the transmitted radiation. Therefore, in order to reduce undesirable intensity losses of the simulated light radiation, it is necessary to solve the problem of matching LCD elements with the optical circuit of the device according to the position of the polarization plane. We investigated the effect of surfactants in the form of cetyltrimethyl ammonium bromide (CTAB) in nematic liquid crystal cells of type 4-pentyl-4'-cyanobiphenyl 5CB. As a result, the application of an electric field showed that for the initial 5CB NLC and cells with a concentration of 0.05 % CTAB-a, the light radiation passing through the cells can be perceived as polarized, since the I_{ox}/I_{oy} ratio is greater than 100; in cells containing 5CB NLC and concentrations of 0.1 and 0.3 wt. % CTAB-a, light emissions can be considered linearly polarized when the conditions $10 < I_{ox}/I_{oy} < 100$ are met; and a cell with a content of 0.5 wt. % surfactant-a serves as a means to obtain elliptical polarization of light. In the latter case, the I_{ox}/I_{oy} condition is less than 100. To interpret the results obtained, we took into account the effect of the CTAB surfactant on the positions of the director of the NLC 5CB, the relationship between the concentrations of the introduced surfactant and the angle of rotation of the polarization plane was established. The clear boundaries of the linear and elliptical polarization of the light transmitted through the cell are indicated, depending on the concentration of CTAB surfactants. Possible applications of such materials in semiconductor and solid-state laser technology and display technologies are proposed.

Keywords: surface-active substance, liquid crystal, light transmission, orientation, optical anisotropy, polarization plane.

Acknowledgements: The work was carried out within the framework of the project «Study of the structure, mechanical and optical properties of new optoelectronic elements based on polymer-liquid crystalline composites» for 2021-2025 years, for No. state registration 0121TJ1107 dated 10.03.2021 and funded from the state budget of the Republic of Tajikistan.

For citation: Egamov, M. Kh. (2024). Rotation of the plane polarization of light radiation in nematic liquid crystals. *Fundamental'nye problemy sovremennoy materialovedeniya (Basic Problems of Material Science (BPMS))*, 21(2), 199–204. (In Russ.). doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2024.02.007.

Введение

Хотя за последние полувек достигнуты ощутимые успехи в исследовании структуры и свойства жидких кристаллов (ЖК), относящиеся к оптической электронике, голографии и информационной технологии [1-3], некоторые вопросы в этом аспекте все еще остаются до конца не решенными. К таким проблемам можно отнести взаимосвязи ориентационного порядка в нематиках в присутствии катионных поверхностно активных веществ (ПАВ). В сущности, данная задача довольно многогранна и ее решения во многом определяется разнообразностью введенных в объем нематика мик-

рочастицы в качестве примеси, их природой, а также ряда внешних дестабилизирующих факторов [4]. В мягких материях наблюдается эффект двулучепреломления, который легко контролируется внешними факторами (электрическим, магнитным, световым, звуковым или механическим полями). Такой эффект позволяет моделировать светового излучение оптического диапазона по ряду волновых параметров [5]. При исследовании нематических жидких кристаллах (НЖК) в отсутствие внешних сил, за счет анизотропии показателя преломления (Δn) можно изменять ориентацию плоскости поляризации светового излучения, перпендикулярно падающий на ЖК ячейку. Соответственно, они

могут применяться как среда для элементов оптического фазовращателя или служить как заменитель для жидких растворов на основе глюкозы или полупроводниковым элементам [5, 6].

Существует аналогичный способ разработки ЖК элементы, предназначенные для поляризации светового излучения под действием электрического поля, либо при их отсутствии. Для этого с целью улучшения ряда оптических характеристик, такие как: яркости, контраста и быстродействия, применяются специальные ориентирующие поверхности с заранее выбранной морфологией [7], а объем ячейки ЖК заполняется наночастицами или поверхностно-активными веществами (ПАВ). При введении последних в ЖК среде, анизотропия показателя преломления (Δn) сильно меняется. Следовательно, ПАВ или наночастица приводит к изменению положения плоскости поляризации между падающим и прямо прошедшим через ЖК-ячейку лучами

$$\Delta\varphi = \frac{2\pi d}{\lambda} \cdot \Delta n = \frac{2\pi d}{\lambda} \cdot (n_e - n_o), \quad (1)$$

где d – толщина жидкокристаллического слоя; n_o – показатель преломления для обыкновенного луча; n_e – показатель преломления для необыкновенного луча. В уравнении (1) величина n_o является постоянной величиной для исследуемого ЖК материала, а n_e строго зависит от степени ориентации директора (преимущественная направления ориентации молекул НЖК вдоль главной оптической оси). Изменения плоскости поляризации $\Delta\varphi$ в уравнении (1) отрицательно влияет на работу жидкокристаллических устройств как в отсутствии, так и в присутствии электрического поля. Поэтому с целью снижения нежелательных потерь интенсивности моделируемого светового излучения, необходимо решать задачу согласования ЖК элементов с оптической схемой устройства по положению плоскости поляризации. Данная работа посвящена решению именно такого рода задачи.

Методика исследования

Для решения указанной задачи исследовались влияния концентрации поверхностно-активных сред (ПАВ) в виде наночастиц из катионного сурфактанта – цетилтриметиламмоний бромид (ЦТАБ) на величину изменения плоскости поляризации света в нематическом жидком кристалле (НЖК) 4-пентил-4'-цианобифениле (5СВ). Это позволяет согласовывать по степени ориентации плоскости поляризации жидкокристаллическую ячейку и по-

ляризатор не только за счет толщины слоя, но и за счет концентрации ЦТАБ [8]. Жидкокристаллическая ячейка была создана в конфигурации твист-нематика, состоящая из двух параллельно расположенных стеклянных пластин, с одной стороны которых были нанесены проводящие металлические покрытия на основе оксидов индия-олова (ITO). Последние имели толщину ~ 200 мкм с тройным содержанием 74 % (In), 18 % (O₂) и 8 % (Sn) по весу. В тонких слоях покрытия ITO становится прозрачным и бесцветным, поэтому в ИК области спектра действует, как металлическое стекло. Тонкие пленки ITO осаждали на поверхности стеклянных подложек посредством физического осаждения из паровой фазы [9]. Для подготовки и перемешивания ЖК смеси использовали магнитную мешалку со скоростью вращения 3500 об/мин. Толщину ЖК слоя регулировали тефлоновыми прокладками. Для определения вращения плоскости поляризации использовался Ge-Ne лазер с длиной волны $\lambda = 0,633$ нм при комнатной температуре. Первоначальное положение поляризатора и анализатора выбирали таким способом, чтобы при размещении двух противоположно расположенных стеклянных пластинок с толщиной ЖК ячейки 8-10 мкм выполнялся максимальное пропускание света. Прошедший сигнал через ячейку регистрировались на фотоприемнике ФД-10-ГБ.

Результаты и их обсуждения

Результаты наблюдений показали, что конфигурации исследуемых нами ячеек при введении ПАВ, состоит из совокупности двух составляющих: за счет концентрации ПАВ и изменения плоскости поляризации в боковых ограничивающих плоскостях. Последнее почти не вносит вклад на исследуемый нами эффект, поэтому их можно не учитывать. На рис.1 иллюстрированы зависимости коэффициента светопропускания ЖК ячеек 5СВ с различными концентрациями ПАВ от угла поворота образцов по отношению к анализатору и поляризатору. Экспериментальная установка для определения зависимости коэффициента светопропускания ЖК ячеек с разными концентрациями от взаимного расположения между анализатором и поляризатором [6] собирали таким способом, чтобы максимальная пропускания наблюдалась между 0° и 180° , а минимальная пропускания наблюдали при 90° и 270° . Тогда можно выявить положение максимумов коэффициентов пропускания на основе закона Малюса. Эти сдвиги хорошо прослеживаются при анализе значений, приведенные в таблице 1.

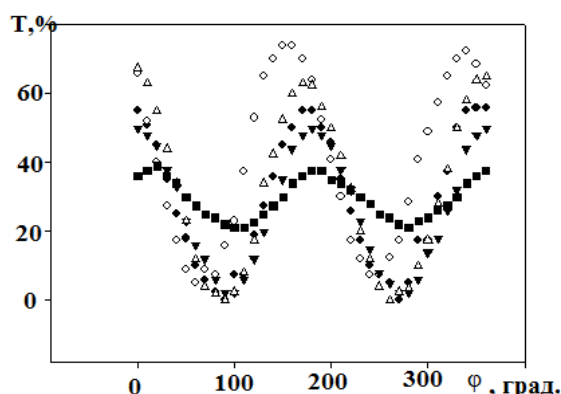


Рис.1. Зависимость светопропускания НЖК 5СВ ячеек от угла вращения поляризатора: (■) – исходный; (◆) – 0,05 вес. %; (◇) – 0,1 вес. %; (▼) – 0,3 вес. %; (△) – 0,5 вес. %

Fig.1. The dependence of the light transmission of NLC 5CB cells on the angle of rotation of the polarizer: (■) – the original; (◆) – 0.05 wt. %; (◇) – 0.1 wt. %; (▼) – 0.3 wt. %; (△) – 0.5 wt. %

Таблица 1. Изменения плоскости поляризации в ЖК ячейки

Table 1. Change in the plane of polarization in the LC of the cell

Положение экстремума коэффициента пропускания	Концентрация ЦТАБ в составе НЖК 5 СВ, вес. %				
	0	0,05	0,1	0,3	0,5
90°	86,1	85,7	66,4	94,8	101,5
180°	173,8	174,3	155,0	181,9	186,6
270°	266,1	266,0	245,4	172,1	279,8
360°	255,5	353,4	338,1	361,8	375,5

Как видно, с ростом концентрации ПАВ ЦТАБ наблюдается сдвиг всех максимумов, кроме образцов, содержащие 0, 1 % ЦТАБ, по отношению к максимуму коэффициента светопропускания для исходного НЖК 5СВ. Причем, среднее отклонение положения экстремумов по отношению к исходному НЖК 5СВ для концентрации 0,05 и 0,1 % отрицательно (соответственно на $-0,5^\circ$ и $-19,2^\circ$), а для концентраций 0,3 % и 0,5 % положительно (соответственно на $7,3^\circ$ и $15,5^\circ$). В [8] показано, что концентрация 0,1 % соответствует концентрационному условию, при котором выполняется переход из нематического состояния к смектическому. В нашем же случае такой переход проявляется в изменении поляризационных свойств исследуемых пленок.

Из рис.1 можно определить отношение амплитуд интенсивности излучения, прошедшие через ЖК ячейки относительно оси Ox и Oy . Основным условием для определения амплитуды интенсивности излучения по оси Ox коэффициент пропускания должен быть максимальным, а по оси Oy – наоборот, минимальным. Тогда, используя сдвиг экстремумов $\Delta\varphi$ и отношения I_{ox}/I_{oy} можно определить азимутальный угол α и эллиптический угол ε , которые

объясняют излучение при эллиптической поляризации [9]:

$$\operatorname{tg}(2\alpha) = \frac{2\sqrt{\frac{I_{ox}}{I_{oy}}}}{1 - \left(\frac{I_{ox}}{I_{oy}}\right)} \cdot \cos(\Delta\varphi) \quad (2)$$

$$\sin(2\varepsilon) = \frac{2\sqrt{\frac{I_{ox}}{I_{oy}}}}{1 + \left(\frac{I_{ox}}{I_{oy}}\right)} \cdot \sin(\Delta\varphi) \quad (3)$$

Оказалось, что для исходного НЖК 5СВ и ячейки с концентрацией 0,05 % ЦТАБ-а световые излучения, прошедшие через ячейки, можно воспринимать как поляризованным, так как отношение I_{ox}/I_{oy} больше 100; в ячейках, содержащие НЖК 5СВ и концентрации 0,1 и 0,3 вес. % ЦТАБ-а, световые излучения можно считать линейно поляризованным, ибо выполняется условия $10 < I_{ox}/I_{oy} < 100$; а ячейка с содержанием 0,5 вес. % ПАВ-а служит средством для получения эллиптической поляризации света. В последнем случае имеет место условия I_{ox}/I_{oy} меньше 100. Для интерпретации получен-

ных результатов мы учитывали влияние ПАВ ЦТАБ на положения директора НЖК 5СВ [10]. Для этого выбирали оси Oz так, чтобы выполнялась условия перпендикулярности к плоскости стеклянной подложки. В таком случае зависимость показателя преломления (n_e) от угла смещения θ экстремумов записывается выражением

$$n_e(\theta) = \frac{n_{\perp} n_{\parallel}}{\sqrt{n_{\perp}^2 (\cos \theta(z))^2 + n_{\parallel}^2 (\sin \theta(z))^2}}. \quad (4)$$

Здесь при пассивном режиме (при отсутствии внешнего поля) ячейки, где, а при активном режиме (т.е. при присутствии внешнего электрического поля) – $n_e = n_{\perp}$, где $\Delta n = n_{\perp} - n_0$. Это означает, что под действием внешнего электрического поля наблюдается переориентация директора НЖК 5СВ и локальные флуктуации диполей в объеме капли жидкого кристалла относительно вводимых ПАВ ЦТАБ [11, 12]. Полученные результаты также можно объяснить с изменением анизотропии показателя преломления (n_e) и находятся в хорошем согласии с результатами работ [9], где были исследованы аналогичные параметры по быстрдействию ЖК ячеек.

Выводы и рекомендации

Проанализировав экспериментальные данные по изменению состояния плоскости поляризации в ячейках из НЖК 5СВ и концентрацией ПАВ ЦТАБ выдвигаются следующие выводы.

При концентрациях ПАВ ЦТАБ 0,3 и 0,5 вес. % можно изменять положение плоскости поляризации по отношению к исходному ячейку НЖК 5СВ соответственно на 7,3 и 15,5°. Аналогичные результаты можно получить при концентрациях 0,1 вес. % на величину 19,2°, а для 0,05 вес. % всего лишь на 0,5°, которое мы связываем с погрешностью измерительных аппаратур и незначительным флуктуациям оптических свойств, концентрированных НЖК по отношению к исходным ячейкам.

Изменения концентрации ЦТАБ способствует не изменять толщины ЖК ячеек и не прибегать к применению дополнительных механизмов и устройств типа вращателей плоскости поляризации для согласования НЖК элементов с внешними оптическими схемами. Данный факт имеет ценный практический интерес для дисплейных технологий, так как можно интегрировать композит НЖК с добавкой ПАВ ЦТАБ, с улучшенными спектральными и дина-

мическими характеристиками, установить в корпус устройства фиксации толщины. Исследуемые ЖК композиты могут использоваться как пассивные вращатели плоскости поляризации, величина вращения которых перестраивается за счет изменения концентрации ПАВ ЦТАБ и толщины слоя ячейки [13]. Для лазерной техники данная взаимосвязь выгодно в тех условиях, когда не имеется возможности изменить толщину слоя или же невозможно изменения положения поляризатора.

Список литературы

1. Gennes de P.G., J. Prost. The Physics of Liquid Crystals. Clarendon Press, Oxford. 1993. 597 p.
2. Хасанов Т. Поляризующая способность линейных поляризаторов // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2010. Т. 7, № 3. С. 57–63.
3. Вальков А.Ю., Романов В.П., Шалагинов А.Н. Флуктуации и рассеяния света в жидких кристаллах // УФН. 1994. Т. 164, Вып. 2. С. 149–193.
4. Egamov M.Kh. The structural transformation of polymer dispersed liquid crystalline films in external deformation field // Journal of Physics: Conference Series. 2018. P. 012013.
5. Попов В.А., Гилев В.Г., Захлевных А.Н. Влияние слабого сцепления на магнитный переход Фредерикса в ферронематическом жидком кристалле // Физика твердого тела. 2018. Т. 60, Вып. 7. С. 1445–1450.
6. Эгамов М.Х. Анизотропия светорассеяния полимерно-жидкокристаллических композиционных систем при одноосном растяжении // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2012. Т. 9, № 4–2. С. 675–680.
7. Krizhanovskii D.N., Sanvitto D., Shelykh I.A., Glazov M.M., Malpucchi G. et al. Rotation of the plane of polarization of light in a semiconductor microcavity // Phys. Rev. B. 2006. V. 93, N 7. P. 073303.
8. Egamov M.Kh., Gerasimov V.P., Krakhalev M.N., Prishchepa O.O., Zyryanov V.Ya., Loiko V.A. Polarizing properties of a stretched film of a polymer-dispersed liquid crystal with a surfactant dopant // Journal of Optical Technology. 2014. V. 81, N 7. P. 414–417.
9. Chausov D.N., Kurilov A.D., Kucherov R.N., Simakin A.V., Gudkov S.V. Electro-optical performance of nematic liquid crystals doped with gold nanoparticles // J. Phys.: Condens. Matter. 2020. V. 32, N 39. P. 395102.

10. Egamov M.Kh., Maksudov B.I., Faizulloev I.Kh. Hysteresis phenomena and the effect reorientation in a polymer-liquid crystal system under the influence of laser radiation and uniaxial deformation // *Journal of Physics: Conference Series*. 2022. V. 2270. P. 012011.

11. Калитаевский Н.И. Волновая оптика. Учеб. пособие для университетов. Изд. 2-е, испр. и доп. М.: Высшая школа, 1978. 383 с.

12. Хасанов Т. Измерение оптических постоянных подложек на основе отражения // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. 2011. Т. 8, № 3. С. 62–71.

13. Maksudov B.I., Egamov M.Kh., Faizulloev I.Kh. Optical hysteresis in composites based on polymer-nematic liquid crystal under uniaxial deformation // *Russian Physics Journal*. 2022. V. 65, N 3. P. 488–492.

Информация об авторах

М. Х. Эгамов – кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник лаборатории физики Худжандского научного центра Национальной Академии наук Таджикистана.

References

1. Gennes de P. G. & Prost J. (1993). *The Physics of Liquid Crystals*. Clarendon Press, Oxford. P. 597. (In Russ.).

2. Khasanov, T. (2010). Polarizing ability of linear polarizer's. *Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedenia (Basic Problems of Material Science (BPMS))*, 7(3), 57–63. (In Russ.).

3. Valkov, A. Yu., Romanov, V. P. & Shalaginov, A. N. (1994). Fluctuations and scattering of light in liquid crystals. *UFN*, 164(2), 149–193. (In Russ.).

4. Egamov, M. Kh. (2018). The structural transformation of polymer dispersed liquid crystal-line films in external deformation field. *Journal of Physics: Conference Series*, 012013.

5. Popov, V. A., Gilev, V. G. & Zakhlevnykh, A. N. (2018). Effect of weak coupling on the Fredericks magnetic transition in a ferro-nematic liquid crystal. *Solid State Physics*, 60(7), 1445–1450. (In Russ.).

6. Egamov, M. Kh. (2012). Anisotropy of light scattering of polymer-liquid crystal composite systems under uniaxial tension. *Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedenia (Basic Problems of Material Science (BPMS))*, 9(4–2), 675–680. (In Russ.).

7. Krizhanovskii, D. N., Sanvitto, D., Shelykh, I. A., Glazov, M. M. & Malpucchi, G. et al. (2006). Rotation of the plane of polarization of light in a semiconductor microcavity. *Phys. Rev. B*, 93(7), 073303.

8. Egamov, M. Ch., Gerasimov, V. P., Krakhalev, M. N., Prishchepa, O. O., Zyryanov, V. Ya. & Loiko, V. A. (2014). Polarizing properties of a stretched film of a polymer-dispersed liquid crystal with a surfactant dopant. *Journal of Optical Technology*, 81(7), 414–417.

9. Chausov, D. N., Kurilov, A. D., Kucherov, R. N., Simakin, A. V. & Gudkov, S. V. (2020). Electro-optical performance of nematic liquid crystals doped with gold nanoparticles. *J. Phys.: Condens. Matter.*, 32(39), 395102.

10. Maksudov, B. I., Faizulloev, I. Kh. & Egamov, M. Kh. (2022). Hysteresis phenomena and the effect reorientation in a polymer-liquid crystal system under the influence of laser radiation and uniaxial deformation. *Journal of Physics: Conference Series*, 2270, 012011.

11. Kaliteevsky, N. I. (1978). *Wave optics. Study guide for universities*. Publ. 2-th, Corrected and expanded. M.: High School. P. 383. (In Russ.).

12. Khasanov, T. (2011). Measurement of optical permanent substrates based on reflection. *Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedenia (Basic Problems of Material Science (BPMS))*, 8(3), 62–71. (In Russ.).

13. Maksudov, B. I., Egamov, M. Kh. & Faizulloev, I. Kh. (2022). Optical hysteresis in composites based on polymer-nematic liquid crystal under uniaxial deformation. *Russian Physics Journal*, 65(3), 488–492.

Information about the authors

M. Kh. Egamov – candidate of physical and mathematical sciences, senior researcher of the laboratory of Physics of the Khujand Scientific Center of the National Academy of Sciences of Tajikistan.

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.
The authors declare that there is no conflict of interest.

Статья поступила в редакцию 03.04.2024; одобрена после рецензирования 22.04.2024; принята к публикации 06.05.2024.

The article was received by the editorial board on 03 Apr. 24; approved after reviewing 22 Apr. 24; accepted for publication 06 May 24.

РАЗДЕЛ 2. МЕТАЛЛОВЕДЕНИЕ И ТЕРМИЧЕСКАЯ ОБРАБОТКА МЕТАЛЛОВ И СПЛАВОВ

Научная статья

2.6.1. Металловедение и термическая обработка металлов и сплавов (технические науки)

УДК 669.017; 620.186

doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2024.02.008

ВЛИЯНИЕ ТЕМПЕРАТУРЫ НАГРЕВА ЗАГОТОВКИ ПЕРЕД ТЕПЛОЙ ПРОКАТКОЙ НА СТРУКТУРУ И СВОЙСТВА ТИТАНОВОГО СПЛАВА VT22

Екатерина Юрьевна Классман^{1†}, Рамиль Яватович Лутфуллин²

^{1,2} Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, ул. Степана Халтурина, 39, 450001 Уфа, Россия

¹ klassman@mail.ru[†], <https://orcid.org/0000-0003-1984-5137>

² lutfullin.ramil@imsp.ru, <https://orcid.org/0000-0003-4638-3206>

Аннотация. Комплексно-легированный титановый сплав VT22 является высокопрочным сплавом, из которого изготавливают ответственные изделия авиакосмического назначения. Как правило, этот сплав используют в крупнозернистом состоянии и проблемными вопросами являются низкая технологическая пластичность и высокая нестабильность механических свойств материала в изделиях. Наиболее заметно эти проблемы проявляются при изготовлении тонкостенных полых конструкций. Последние можно успешно изготовить сверхпластической формовкой из листовых заготовок с мелко- или ультрамелкозернистой (УМЗ) структурой. УМЗ структура в листовых заготовках сплава VT22 может быть получена в результате изотермической прокатки. Однако изотермическая прокатка существенно удорожает производство, делая его экономически непривлекательным. В этой связи исследовали возможность получения УМЗ листов титанового сплава VT22 теплой прокаткой на холодных валках при температурах нагрева исходных заготовок в интервале температур 600–750 °С. Результаты проведенных исследований показывают, что листовая прокатка заготовок нагретых до температуры 600 °С позволяет получить УМЗ состояние в титановом сплаве VT22 с параметрами зеренно-субзеренной структуры менее 300 нм. Микротвердость полученных листовых заготовок выше на 20 % по сравнению с крупнозернистым сплавом VT22. Вытянутость зерен сплава вдоль плоскости прокатки уменьшается со снижением температуры нагрева заготовок перед прокаткой в исследованном интервале температур. Полученные данные могут быть полезными, в частности, для оптимизации условий получения тонких листов с УМЗ или нанокристаллической структурой.

Ключевые слова: титановые сплавы, микроструктура, листовая прокатка, микротвердость.

Благодарности: Все микроструктурные исследования и механические испытания проводились на базе ЦКП ИПСМ РАН «Структурные и физико-механические исследования материалов» в рамках Госзадания ИПСМ РАН № НИОКТР 122011900474-5.

Для цитирования: Классман Е.Ю., Лутфуллин Р.Я. Влияние температуры нагрева заготовки перед теплой прокаткой на структуру и свойства титанового сплава VT22 // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2024. Т. 21, № 2. С. 205–211. doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2024.02.008.

Original article

EFFECT OF HEATING TEMPERATURE OF THE BILLET BEFORE WARM ROLLING ON THE MICROSTRUCTURE AND PROPERTIES OF VT22 TITANIUM ALLOY

Ekaterina Yu. Klassman^{1†}, Ramil Ya. Lutfullin²

^{1,2} Institute for Metals Superplasticity Problems of Russian Academy of Sciences, Khalturina Str., 39, Ufa, 450001, Russia

¹ klassman@mail.ru[†], <https://orcid.org/0000-0003-1984-5137>

² lutfullin.ramil@imsp.ru, <https://orcid.org/0000-0003-4638-3206>

Abstract. Complex-alloyed VT22 titanium alloy is a high-strength alloy to made critical aerospace products. This alloy is usually used in a coarse-grained state, and the problems are low technological plasticity and high instability of mechanical properties of the material in products. These problems are most apparent in the manufacture of thin-walled hollow-core construction, which can be successfully produced by superplastic forming from sheet blanks with a fine- or ultrafine-grained (UFG) microstructure. The UFG microstructure in sheet blanks of VT22 alloy can be obtained as a result of isothermal rolling. However, isothermal rolling significantly increases the cost of production, making it economically unprofitable. In this regard, we investigated the possibility of producing UFG sheets of titanium alloy VT22 by warm rolling on cold rollers at the temperature range of 600-750 °C. The results of the studies show that sheet rolling of billets heated to a temperature of 600 °C makes it possible to obtain a UFG state in VT22 titanium alloy with grain-subgrain microstructure parameters of less than 300 nm. The microhardness of the obtained sheet blanks is 20 % higher compared to the coarse-grained VT22 alloy. Grain elongation along the rolling plane decreases as the heating temperature of the workpieces prior to rolling is reduced in the temperature range studied. Such results can be particularly useful in optimizing the conditions for obtaining thin sheets with UFG or nanocrystalline structure.

Keywords: titanium alloys, microstructure, sheet rolling, microhardness.

Acknowledgements: The present work was accomplished in terms of the state assignment of the Institute for Metals Superplasticity Problems of the Russian Academy of Sciences No 122011900474-5. Microstructural studies and mechanical tests were carried out on the facilities of shared services center of IMSP RAS «Structural and Physical-Mechanical Studies of Materials».

For citation: Klassman, E. Yu. & Lutfullin, R. Ya. (2024). Effect of heating temperature of the billet before warm rolling on the microstructure and properties of VT22 titanium alloy. *Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedeniya (Basic Problems of Material Science (BPMS))*, 21(2), 205–211. (In Russ.). doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2024.02.008.

Введение

Титановый сплав VT22 (аналог зарубежного сплава Ti-55531) – высокопрочный сплав с повышенными усталостными характеристиками, широко используемый в аэрокосмической области [1, 2]. Механические свойства титановых сплавов тесно связаны с их микроструктурой [3, 4]. В целом титановые сплавы с мелкозернистой структурой имеют лучшие механические характеристики, чем сплавы с крупнозернистой структурой [5, 6].

Наиболее широко используемый промышленный метод измельчения зерна – ковка, а параметры деформации, такие как температура, скорость и степень деформации, играют определяющую роль [6-8]. В то же время, для широкого внедрения металлических материалов в промышленности есть необходимость в проведении дополнительной обработки, например, методом прокатки, придавая заготовкам форму листа [8-10]. Однако после деформации сплава в нем может возникнуть металлографическая и/или кристаллографическая текстура [11, 12]. В тоже время, наличие, например, металлографической текстуры в материале может оказаться востребованным для получения многослойных композиционных материалов из титановых сплавов [10].

Применительно к комплексно-легированному титановому сплаву VT22 имеются работы, где, например, показано, что винтовая прокатка в диапазоне температур 850-750 °C приводит к образованию ультрамелкозернисто-субзернистой структуры, характеризующейся размером элементов ~ 500 нм и мелкими частицами α -фазы размером ~ 300 нм [13]. Кроме того, снижение температуры деформации до 600 °C замедляет процессы динамического восстановления в β -фазе, приводит к более глубокому измельчению матрицы, а также значительно снижает газонасыщение заготовок [14, 15]. Энергоемкая изотермическая прокатка полуфабрикатов из комплексно-легированного титанового сплава VT22 при пониженных температурах позволяет получить тонкие листы со средним размером зеренно-субзеренной структуры 300 нм без металлографической текстуры [16].

Следует отметить, что в литературе практически отсутствуют исследования применительно к высоколегированным титановым сплавам, деформация которых производится методом плоской теплой прокатки в обычных, неизотермических условиях при температурах ниже 800 °C, что и является целью исследования.

Материал и методики исследования

Объектом исследования был комплексно-легированный титановый сплав VT22 стандартного химического состава по ГОСТ 19807-91. Температура полного полиморфного превращения, определенная методом пробных закалок, соответствовала $T_{\text{п.п}} = 860 \pm 10$ °С. Исходная микроструктура сплава представлена ти-

пично пластинчатыми выделениями α - и β -фаз с размером пластин до 10 мкм (рис.1). Микротвердость по Виккерсу при этом составила $HV_{0,98} = 346 \pm 15$.

Микротвердость измеряли методом Виккерса при нагрузке 100 г в продольном сечении прокатанного образца на приборе МНТ-10 Microhardness Tester.

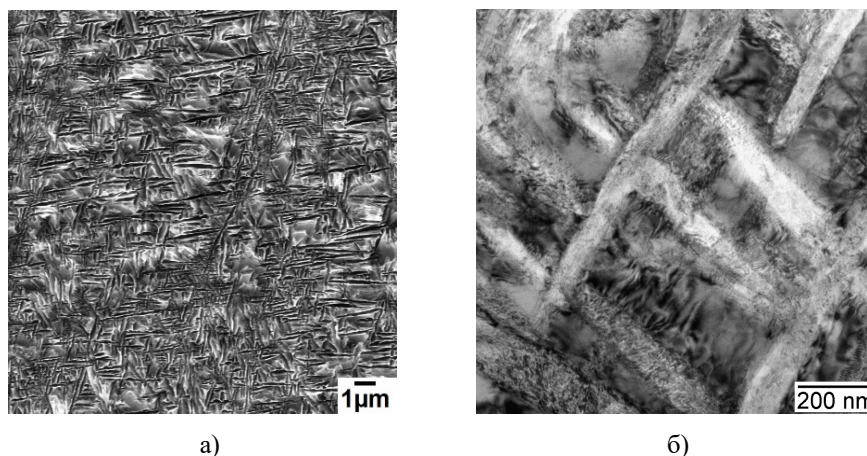


Рис.1. Исходная микроструктура образца из сплава VT22: а – растровая электронная микроскопия (РЭМ), б – просвечивающая электронная микроскопия (ПЭМ)

Fig.1. Initial microstructure of the VT22 alloy sample: a – scanning electron microscopy (SEM), b – transmission electron microscopy (TEM)

Прокатку для получения листовых заготовок проводили на лабораторном стане ДУО-300 в холодных валках со скоростью деформации $\sim 10^{-1} \text{ с}^{-1}$ с суммарной степенью обжатия 83 %. Температура нагрева заготовок перед прокаткой составила 750-600 °С. Микроструктуру изучали методом растровой и просвечивающей электронной микроскопии с использованием соответственно микроскопов Mira 3LMH (TESCAN) и JEM-2000EX. Средние размеры структурных элементов $d_{\text{ср}}$ в продольном и поперечном направлениях измерялись по соответствующим микрофотографиям методом секущей. Для оценки вытянутости зерен был введен коэффициент вытянутости $K = d_{\text{ср.в}}/d_{\text{ср.п}}$, где $d_{\text{ср.в}}$ и $d_{\text{ср.п}}$ – средний размер структурных элементов в продольном и поперечном направлениях, соответственно.

Результаты и обсуждение

Тонкая структура листов сплава VT22 после прокатки, наблюдаемая в просвечивающем электронном микроскопе показана на рис.2.

Для всех исследованных температур после деформации в изготовленных листах в плоскости прокатки наблюдаются вытянутые зерна в направлении прокатки (рис.2а). При этом встречаются как области с сильно вытянутыми вдоль направления прокатки зернами, так и области с относительно равноосными зернами (рис.2а,г,д), что может быть связано с неравномерностью распределения деформации. Например, в толстом листе в результате локализации, средняя скорость деформации на поверхности составляет $1,9 \cdot 10^{-2} \text{ с}^{-1}$ и уменьшается к середине листа до $5,3 \cdot 10^{-3} \text{ с}^{-1}$. Известно [17], что в толстом листе деформация растянута по времени за счет большей ширины очага деформации. Некоторые зерна имеют повышенную плотность дислокаций, отмеченные стрелкой (рис.2). Вытянутая форма зерен по направлению прокатки, может в дальнейшем вносить некоторый вклад в анизотропию механических свойств [18, 19]. Коэффициент вытянутости вдоль направления прокатки в зависимости от температуры нагрева заготовок увеличивается от 1,8 при $T = 600$ °С до 2,8 при $T = 750$ °С (табл.1).

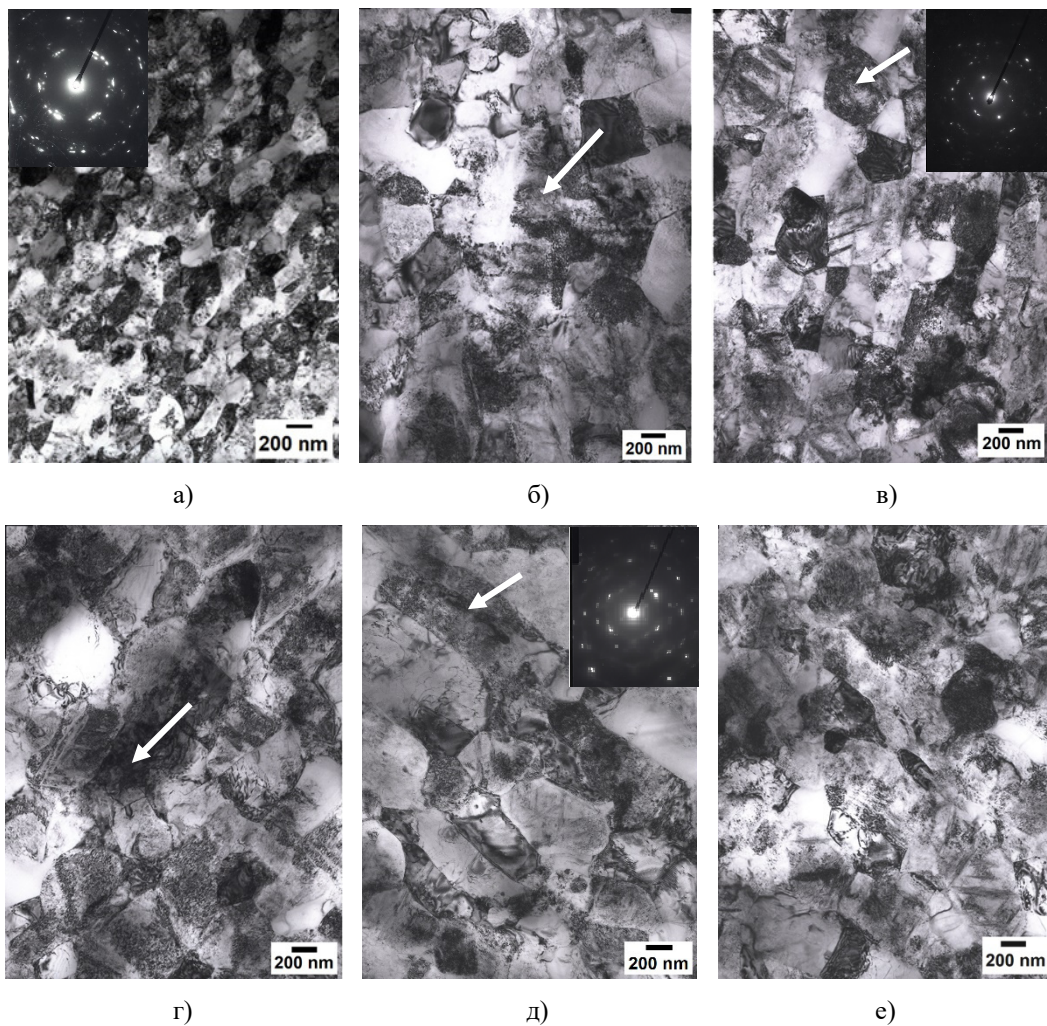


Рис.2. Тонкая структура сплава VT22 после прокатки с предварительным нагревом исходных заготовок до: а – 600 °С вдоль направления прокатки, б – 600°С поперек направления прокатки, в – 650 °С, г – 700 °С, д – 750 °С – вдоль направления прокатки, е – 750°С поперек направления прокатки. Стрелкой указаны зерна с повышенной плотностью дислокаций

Fig.2. Fine structure of the VT22 alloy after rolling with preheating of the initial blanks to: a – 600 °C along the rolling direction, b – 600 °C across the rolling direction, c – 650 °C, d – 700 °C, e – 750 °C – along rolling direction, f – 750 °C across the rolling direction. The arrow indicates grains with an increased dislocation density

Таблица 1. Зависимость коэффициента вытянутости зерен по направлению прокатки от температуры нагрева заготовки перед прокаткой

Table 1. Dependence of the grain elongation coefficient in the rolling direction on the heating temperature of the workpiece before rolling

Температура нагрева заготовки перед прокаткой, °С	600 °С	650 °С	700 °С	750 °С
Коэффициент вытянутости, К	1,8	2,2	2,3	2,8

Поперек направления прокатки наблюдается относительно равноосная форма зерен (рис.2б,е). Средний размер равноосных субзерен колеблется от 244 до 551 нм. Такая сложная микроструктура, состоящая из зерен и субзерен, типична для материалов, обработанных

методом интенсивной пластической деформации (ИПД) [19, 20].

Фактически, при нагреве заготовки до 600 °С были получены листы с параметрами микроструктуры аналогичными как при изотермической прокатке [16].

На дифракционных картинах во всех случаях наблюдались многочисленные отдельные рефлексы, равномерно расположенные по окружности (рис.2а). Подобные дифракционные картины характерны для УМЗ металлических образцов, изготовленных методом ИПД, что

позволяет предположить о формировании наблюдаемых зерен с большеугловыми границами [19].

Измеренные значения микротвердости листов сплава BT22 представлены в таблице 2.

Таблица 2. Зависимость микротвердости от температуры нагрева заготовки перед прокаткой

Table 2. Dependence of microhardness on the heating temperature of the workpiece before rolling

Температура нагрева заготовки перед прокаткой, °С	600 °С	650 °С	700 °С	750 °С
Микротвердость, HV _{0,98}	414 ± 8	408 ± 16	381 ± 18	363 ± 13

С учетом погрешности измерений, прослеживается тенденция к росту микротвердости с понижением температуры нагрева заготовок перед деформацией. Для листов, полученных из заготовок, нагретых при температуре 600 °С, она увеличивается до HV_{0,98} = 414 ± 8. Одной из вероятных причин увеличения микротвердости, может быть, увеличение доли межфазных и межзеренных границ в структуре сплава BT22 после теплой прокатки заготовок, нагретых до более низких температур в исследованном температурном интервале. Другой возможной причиной этого явления может быть наличие нановыделений избыточных фаз с ОЦК решеткой, отмеченных авторами статьи [21] на технически чистом титане 4 класса, содержащим значительные примеси железа. Однако последняя гипотеза требует дальнейших, более глубоких структурных исследований и электронно-микроскопического анализа.

Заключение

Таким образом, при использовании теплой прокатки на стане ДУО-300 со скоростью деформации $\sim 10^{-1} \text{ с}^{-1}$ успешно получен листовой прокат из титанового сплава BT22 со средним размером зерна/субзерна менее 300 нм, что сопоставимо с результатами после использования изотермической прокатки. При этом, предложенный нами технологический вариант является менее энергозатратным. Микротвердость материала листов по сравнению с исходными заготовками сплава BT22 увеличилась на 20 %. Полученные данные могут быть информативно полезными для разработки технологии теплой прокатки листовых полуфабрикатов из высоколегированных титановых сплавов.

Список литературы

1. Хорев А.И. Перспективы применения титановых сплавов // Технология машиностроения. 2022. № 2. С. 5–7.
2. Kolli R.P., Devaraj A. A Review of Metastable Beta Titanium Alloys // Metals. 2018. V. 8, N 7. 506.
3. Wang M., Wang Y., He Q., Wei W., Guo F., Su W. A strong and ductile pure titanium // Materials Science and Engineering: A. 2022. V. 833. 142534.
4. Estrin Y., Vinogradov A. Extreme grain refinement by severe plastic deformation: A wealth of challenging science // Acta Materialia. 2013. V. 61, N 3. P. 782–817.
5. Bézi Z., Krállics G., El-Tahawy M., Pekker P., Gubicza J. Processing of ultrafine-grained titanium with high strength and good ductility by a combination of multiple forging and rolling // Materials Science and Engineering: A. 2017. V. 688, P. 210–217.
6. Zhrebtsov S., Kudryavtsev E., Kostjuchenko S., Malysheva S., Salishchev G. Strength and ductility-related properties of ultrafine grained two-phase titanium alloy produced by warm multi-axial forging // Materials Science and Engineering: A. 2012. V. 536. P. 190–196.
7. Мулюков Р.Р., Имаев Р.М., Назаров А.А. и др. Сверхпластичность ультрамелкозернистых сплавов: эксперимент, теория, технологии. М.: Наука, 2014. 284 с.
8. Djavanroodi F., Janbakhsh M. Formability Characterization of Titanium Alloy Sheets. From the edited volume Titanium Alloys. Edited by Jan Sieniawski and Waldemar Ziaja. 2013. 158 p.
9. Shagiev M.R., Kruglov A.A., Rudenko O.A., Murzinova M.A. Superplastic forming of ti-

tanium alloys at 700 °C // *Letters on Materials*. 2022. V. 12, N 4. P. 332–335.

10. Sarkeeva A.A., Kruglov A.A., Lutfullin R.Ya., Gladkovskiy S.V., Zhilyaev A.P. et al. Corrigendum to “Characteristics of the mechanical behavior of Ti–6Al–4V multilayer laminate under impact loading” [*Compos B* 187 (2020) 107838] // *Composites Part B: Engineering*. 2020. V. 200. 108390.

11. Fan J., Huang H., Xue X., Zhang W., Wang Y. et al. Hot Rolled Ti6321 Alloy Sheets With Different Initial Microstructures: Microstructure, Mechanical Properties, and Anisotropy Characteristics // *Structural Materials*. 2020. V. 7. 110.

12. Chen W., Lv Y., Zhang X., Chen C., Lin Y.C. et al. Comparing the evolution and deformation mechanisms of lamellar and equiaxed microstructures in near β -Ti alloys during hot deformation // *Materials Science and Engineering: A*. 2019. V. 758. P. 71–78.

13. Naydenkin E.V., Ratochka I.V., Mishin I.P., Lykova O.N. Evolution of the Structural-Phase State of a VT22 Titanium Alloy During Helical Rolling and Subsequent Aging // *Russian Physics Journal*. 2015. V. 58. P. 1068–1073.

14. Zherebtsov S.V., Murzinova M.A., Klimova M.V., Salishchev G.A., Popov A.A. et al. Microstructure evolution during warm working of Ti–5Al–5Mo–5V–1Cr–1Fe at 600 and 800 °C // *Materials Science and Engineering: A*. 2013. V. 563. P. 168–176.

15. Классман Е.Ю., Астанин В.В., Лутфуллин Р.Я. Газонасыщение поверхности листовых полуфабрикатов из титанового сплава VT22 // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. 2021. Т. 18, № 2. С. 203–209.

16. Классман Е.Ю., Астанин В.В. Низкотемпературная сверхпластичность титанового сплава VT22 // *Письма о материалах*. 2020. Т. 10, № 1(37). С. 10–15.

17. Классман Е.Ю., Астанин В.В. Получение тонких листов из титанового сплава методом изотермической прокатки // *В сб. трудов XII Всероссийского съезда по фундаментальным проблемам теоретической и прикладной механики*. 2019. Т. 3. С. 318–320.

18. Pippin R., Scheriau S., Taylor A., Hafok M., Hohenwarter A. et al. Saturation of Fragmentation During Severe Plastic Deformation // *Annual Review of Materials Research*. 2010. V. 40. P. 319–343.

19. Sabirov I., Perez-Prado M.T., Molina-Aldareguia J.M., Semenova I.P., Salimgareeva

G.Kh. et al. Anisotropy of mechanical properties in high-strength ultra-fine-grained pure Ti processed via a complex severe plastic deformation route // *Scripta Materialia*. 2011. V. 64, N 1. P. 69–72.

20. Edalati, K., Bachmaier, A., Beloshenko, V. & Beygelzimer Y. et al. Nanomaterials by severe plastic deformation: review of historical developments and recent advances // *Materials Research Letters*. 2022. V. 10, No. 4. P. 163–256.

21. Rezyapova L.R., Valiev R.R., Sitdikov V.D., Valiev R.Z. Study of second phase precipitates in nanostructured commercially pure titanium // *Letters on Materials*. 2021. V. 11, No. 3. P. 345–350.

Информация об авторах

Е. Ю. Классман – аспирант, инженер Института проблем сверхпластичности металлов РАН.

Р. Я. Лутфуллин – доктор технических наук, главный научный сотрудник Института проблем сверхпластичности металлов РАН.

References

1. Khorev, A. I. (2022). Prospects for the use of titanium alloys. *Mechanical engineering technology*, (2), 5–7. (In Russ.).

2. Kolli, R. P. & Devaraj, A. (2018). A Review of Metastable Beta Titanium Alloys. *Metals*, 8(7), 506.

3. Wang, M., Wang, Y., He, Q., Wei, W., Guo, F. & Su, W. (2022). Chongxiang Huang A strong and ductile pure titanium. *Materials Science and Engineering: A*, 833, 142534.

4. Estrin, Y. & Vinogradov, A. (2013). Extreme grain refinement by severe plastic deformation: A wealth of challenging science. *Acta Materialia*, 61(3), 782–817.

5. Bézi, Z., Krállics, G., El-Tahawy, M., Pekker, P. & Gubicza, J. (2017). Processing of ultrafine-grained titanium with high strength and good ductility by a combination of multiple forging and rolling. *Materials Science and Engineering: A*, 688, 210–217.

6. Zherebtsov, S., Kudryavtsev, E., Kostjuchenko, S., Malysheva, S. & Salishchev, G. (2012). Strength and ductility-related properties of ultrafine grained two-phase titanium alloy produced by warm multiaxial forging. *Materials Science and Engineering: A*, 36, 190–196.

7. Mulyukov, R. R., Imayev, R. M. & Nazarov, A. A. et al. (2014). Superplasticity of ul-

- trafine-grained alloys: Experiment, theory, technologies. Moscow, Nauka. P. 284. (In Russ.).
8. Djavanroodi, F. & Janbakhsh, M. (2013). Formability Characterization of Titanium Alloy Sheets. The edited volume Titanium Alloys. Edited by Jan Sieniawski and Waldemar Ziaja. P. 158.
9. Shagiev, M. R., Kruglov, A. A., Rudenko, O. A. & Murzinova, M. A. (2022). Superplastic forming of titanium alloys at 700 °C. *Letters on Materials*, 12(4), 332–335.
10. Sarkeeva, A. A., Kruglov, A. A., Lutfullin, R. Ya., Gladkovskiy, S. V. & Zhilyaev, A. P. et al. (2020). Corrigendum to “Characteristics of the mechanical behavior of Ti–6Al–4V multilayer laminate under impact loading” [Compos B 187 (2020) 107838]. *Composites Part B: Engineering*, 200, 108390.
11. Fan, J., Huang, H., Xue, X., Zhang, W. & Wang, Y. et al. (2020). Hot Rolled Ti6321 Alloy Sheets With Different Initial Microstructures: Microstructure, Mechanical Properties, and Anisotropy Characteristics. *Structural Materials*, 7, 110.
12. Chen, W., Lv, Y., Zhang, X., Chen, C. & Lin, Y. C. et al. (2019). Comparing the evolution and deformation mechanisms of lamellar and equiaxed microstructures in near β -Ti alloys during hot deformation. *Materials Science and Engineering: A*, 758, 71–78.
13. Naydenkin, E. V., Ratochka, I. V., Mishin, I. P. & Lykova, O. N. (2015). Evolution of the Structural-Phase State of a VT22 Titanium Alloy During Helical Rolling and Subsequent Aging. *Russian Physics Journal*, 58, 1068–1073.
14. Zherebtsov, S. V., Murzinova, M. A., Klimova, M. V., Salishchev, G. A. & Popov, A. A. et al. (2013). Microstructure evolution during warm working of Ti–5Al–5Mo–5V–1Cr–1Fe at 600 and 800 °C. *Materials Science and Engineering: A*, 563, 168–176.
15. Klassman, E. Yu., Astanin, V. V. & Lutfullin R. Ya. (2021). Gas saturation of the surface of sheet semi-finished products from titanium alloy VT22. *Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedeniya (Basic Problems of Material Science (BPMS))*, 18(2), 203–209. (In Russ.).
16. Klassman, E. Yu. & Astanin, V. V. (2020). Low-temperature superplasticity of titanium alloy VT22. *Letters on Materials*, 10(1), 10–15. (In Russ.).
17. Klassman, E. Yu. & Astanin, V. V. (2019). Production of thin sheets from titanium alloy by isothermal rolling. *V sb. trudov XII Vserossiyskogo s'yezda po fundamental'nyim problemam teoreticheskoy i prikladnoy mekhaniki*, 3, 318–320. (In Russ.).
18. Pippan, R., Scheriau, S., Taylor, A., Hafok M. & Hohenwarter, A. et al. (2010). Saturation of Fragmentation During Severe Plastic Deformation. *Annual Review of Materials Research*, 40, 319–343.
19. Sabirov, I., Perez-Prado, M. T., Molina-Aldareguia, J. M., Semenova, I. P. & Salimgareeva, G. Kh. et al. (2011). Anisotropy of mechanical properties in high-strength ultra-fine-grained pure Ti processed via a complex severe plastic deformation route. *Scripta Materialia*, 64(1), 69–72.
20. Edalati, K., Bachmaier, A., Beloshenko, V. & Beygelzimer, Y. et al. (2022). Nanomaterials by severe plastic deformation: review of historical developments and recent advances. *Materials Research Letters*, 10(4), 163–256.
21. Rezyapova, L. R., Valiev, R. R., Sitdikov, V. D. & Valiev, R. Z. (2021). Study of second phase precipitates in nanostructured commercially pure titanium. *Letters on Materials*, 11(3), 345–350.

Information about the authors

E. Yu. Klassman – Post-Graduate Student, Engineer at the Institute for Metals Superplasticity Problems of the Russian Academy of Sciences.

R. Ya. Lutfullin – Doctor of Technical Sciences, Chief Researcher at the Institute for Metals Superplasticity Problems of the Russian Academy of Sciences.

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.
The authors declare that there is no conflict of interest.

Статья поступила в редакцию 04.04.2024; одобрена после рецензирования 29.04.2024; принята к публикации 02.05.2024.

The article was received by the editorial board on 04 Apr. 24; approved after reviewing 29 Apr. 24; accepted for publication 02 May 24.

Научная статья

2.6.1. Металловедение и термическая обработка металлов и сплавов (технические науки)

УДК 669.1, 621.78

doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2024.02.009

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ТЕРМОДИФФУЗИОННОГО БОРОХРОМИРОВАНИЯ НА СТРУКТУРУ И СВОЙСТВА СТАЛЕЙ AISI H12 И ASTM L6

Цюань Чжэн^{1†}, Михаил Алексеевич Гурьев², Шунчи Мэй³, Евгения Владимировна Черных⁴, Бурьял Дондокович Лыгденов⁵, Алексей Михайлович Гурьев⁶, Елена Алексеевна Кошелева⁷

^{1, 2, 3, 5, 6} Уханьский текстильный университет, ул. Фангжи, 1, 430073, Ухань, КНР

^{1, 2, 4, 6, 7} Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова, пр. Ленина, 46, 656038, Барнаул, Россия

² Чжэцзян Бриллиант Холодильное Оборудование Ко., ООО, Руао Промышленный парк, Синчан, провинция Чжэцзян, 312500, КНР

¹ 361870277@qq.com[†], <https://orcid.org/0000-0002-4596-1302>

² gurievma@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-9191-1787>

³ 1533876320@qq.com

⁴ jane_5@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-1128-8471>

⁵ lygdenov59@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-3580-6165>

⁶ gurievam@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-7570-8877>

⁷ kosheleva_ea@mail.ru

Аннотация. В статье рассматривается широкое применение инструментальных сталей AISI H12 и ASTM L6 в промышленном секторе, а также требования к обработке их поверхности. Для увеличения твердости и износостойкости инструментальных сталей, а также решения проблемы недостаточной прочности соединения боридного слоя с основным материалом, предложен метод комплексного насыщения бором и хромом. Борохромирование улучшает твердость и пластичность боридного слоя, а также решает проблему его скалывания и низкой термостойкости. С помощью сканирующего электронного микроскопа (SEM) были исследованы микроструктуры борохромированного слоя и его высокотемпературная устойчивость. Результаты показали, что при увеличении содержания Cr₂O₃ до 2 %, слой становится более плотным, толщина слоя AISI H12 и ASTM L6 увеличивается до 55,4 мкм и 33,4 мкм соответственно и увеличивает разгаростойкость поверхности. Это исследование предоставляет важные указания и рекомендации для улучшения свойств сталей для штампового инструмента горячего деформирования и увеличения его срока службы.

Ключевые слова: борирование, диффузия, горячештамповые стали, структура, жаростойкость.

Благодарности: Металлографические исследования выполнены в Центре коллективного пользования АлтГТУ.

Для цитирования: Чжэн Ц., Гурьев М.А., Мэй Ш., Черных Е.В., Лыгденов Б.Д., Гурьев А.М., Кошелева Е.А. Исследование влияния термодиффузионного борохромирования на структуру и свойства сталей AISI H12 и ASTM L6 // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2024. Т. 21, № 2. С. 212–219. doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2024.02.009.

Original article

THE EFFECT OF THERMODIFFUSION BOROCHROMIZING ON THE STRUCTURE AND PROPERTIES OF AISI H12 AND ASTM L6 STEEL

Quan Zheng^{1†}, Mikhail A. Guryev², Shunqi Mei³, Evgeniya V. Chernykh⁴, Buryal D. Lygdenov⁵, Alexey M. Guryev⁶, Elena A. Kosheleva⁷

^{1, 2, 3, 5, 6} Wuhan Textile University, Fangzhi Av., 1, Wuhan, 430200, China

^{1, 2, 4, 6, 7} I. I. Polzunov Altai State technical University, Lenin Pr., 46, Barnaul, 656038, Russia

² Zhejiang Brilliant Refrigeration Equipment Co., Ltd., Ruao Industry Park, Xingchang, Zhejiang Province, 312500, China

¹ 361870277@qq.com[†], <https://orcid.org/0000-0002-4596-1302>

² gurievma@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-9191-1787>

³ 1533876320@qq.com

⁴ jane_5@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-1128-8471>

⁵ lygdenov59@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-3580-6165>

⁶ gurievam@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-7570-8877>

⁷ kosheleva_ea@mail.ru

Abstract. The paper explores the extensive applications of AISI H12 and ASTM L6 tool steels in the industrial sector, along with their surface treatment requirements. To enhance the hardness and wear resistance of tool steels and address the insufficient bonding strength between boride layers and substrates, the paper proposes a boron-chromium saturation diffusion strengthening method. This method involves simultaneous infusion of boron and chromium to form a boron-chromium layer, improving the performance and bonding strength of boride layers while addressing their brittleness and low high-temperature oxidation resistance. The microstructure and high-temperature oxidation resistance of boride layers were studied using scanning electron microscopy (SEM). The results indicate that when the Cr_2O_3 content increases to 2 %, a dense structure forms in the diffusion layer, leading to thickness increases in AISI H12 and ASTM L6 tool steels to 55.4 μm and 33.4 μm , respectively, with ASTM L6 steel exhibiting notable high-temperature oxidation resistance. This study provides significant references and guidance for enhancing the performance and prolonging the service life of tool steels.

Keywords: boriding, diffusion, hot-stamp steels, structure, heat resistance.

Acknowledgments: The metallographic research was carried out at the AltSTU Shared Use Center.

For citation: Zheng, Q., Guryev, M. A., Mei, S., Chernykh, E. V., Lygdenov, B. D., Guryev, A. M. & Kosheleva, E. A. (2024). The effect of thermodiffusion borochromizing on the structure and properties of AISI H12 and ASTM L6 steel. *Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedeniya (Basic Problems of Material Science (BPMS))*, 21(2), 212–219. (In Russ.). doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2024.02.009.

Введение

Инструментальные стали, такие как AISI H12 (4X4BMФC(ДИ22)) и ASTM L6 (5XHM) широко применяются в промышленности благодаря своей высокой износостойкости, термо- и разгаростойкости. Основная область применения этих сталей – штампы горячего деформирования металлов и сплавов, а также пресс-формы машин для литья под давлением цветных металлов и их сплавов [1-4]. При эксплуатации оснастка и инструмент из этих сталей в основном выходит из строя в результате поломок, вызванных образованием разгарных трещин [5-6]. Поэтому поверхность инструментальных сталей AISI H12 и ASTM L6 должна обладать высокой термостойкостью, износостойкостью и коррозионной стойкостью.

Процесс борирования является распространенным методом поверхностной обработки инструментальных сталей. Он заключается в внедрении бора в поверхность стали при высокой температуре и формирования боридного слоя, что увеличивает твердость и износостойкость материала [7-10]. После борирования инструментальные стали обладают износостойкостью, что делает их подходящими для длительной работы в условиях высокой нагрузки, увеличивая срок службы и снижая затраты на обслуживание. Однако процесс борирования инструментальных сталей также имеет свои проблемы, например, недостаточную прочность соединения боридного слоя с основным материалом, что может привести к отслаиванию при высоких напряжениях.

Для дальнейшего улучшения свойств боридного слоя и решения проблем с его скалыванием и низкой термостойкостью, применяют комплексное борирование совместно с другими металлическими элементами, что показало хорошие результаты [11-15]. Одним из распространенных методов является использование комплексного борохромирования, то есть одновременное внедрение бора и хрома [15-18]. Это не только повышает твердость, разгаростойкость и износостойкость, но также улучшает прочность соединения боридного слоя с основным материалом, уменьшая риск отслаивания и улучшая общие характеристики и срок службы инструментальных сталей.

Методика и материалы

В данном исследовании использовались стали AISI H12 и ASTM L6, химические составы которых приведены в таблице 1. Перед нанесением бора поверхность образцов была зачищена наждачной бумагой зернистостью 800-1000 и очищена ультразвуком в спирте.

В качестве насыщающей среды использовали оригинальные составы, состоящие из следующих компонентов: 70 % B_4C , 5% KBF_4 , 10 % C , 12-13 % бентонита и 1-2 % Cr_2O_3 . Борировочный агент смешивали с водой для получения пасты и равномерно наносили на поверхность стали слоем толщиной около 5 мм. Образцы помещали в камерную печь типа СНОЛ и подвергали борированию при температуре 950 °С в течение 4 ч. После термообработки образцы охлаждали с печью.

Таблица 1. Химический состав использованных в работе сталей

Table 1. Chemical composition of steels used in the work

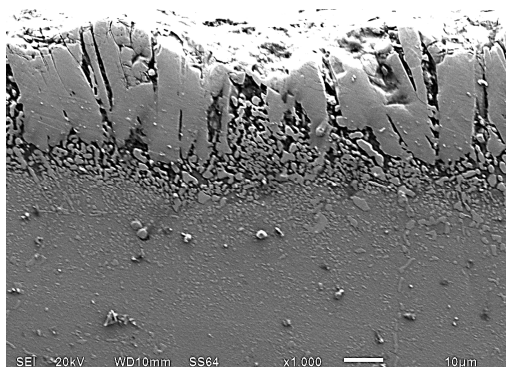
Марка стали	Элементный состав, масс. %									
	C	Si	Mn	Cr	Mo	V	Ni	W	P	S
5XHM (AISI L6)	0,50- 0,60	0,10- 0,40	0,50- 0,80	0,50- 0,80	0,15- 0,30	–	1,40- 1,80	–	≤0,030	≤0,030
4X4BMФC(ДИ22) AISI H12	0,37- 0,44	0,60- 1,00	0,20- 0,50	3,20- 4,00	1,20- 1,50	0,60- 0,90	≤0,60	0,80- 1,20		

Микроструктуру борированного слоя изучали с помощью сканирующей электронной микроскопии (СЭМ) на микроскопе TESCAN MIRA LMS. Исследования на жаростойкость борированных сталей производили путем помещения их в камерную при температуре 800 °С с выдержкой при этой температуре в течение 6 ч. Микроструктура окисленных поверхностей и поперечных сечений образцов после окисления была проанализирована с помощью СЭМ. Пробоподготовку образцов для проведения металлографических исследований осуществляли по методикам, описанным в [19-21].

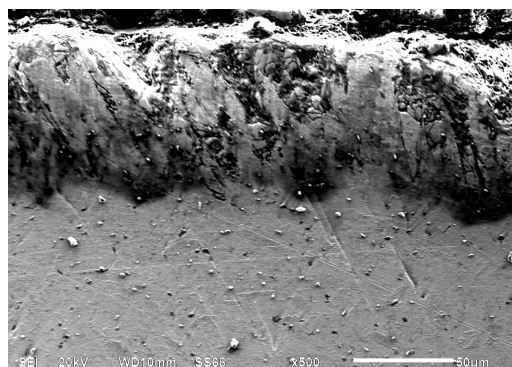
Результаты и обсуждение

На рисунке 1 изображены микроструктуры диффузионных многокомпонентных слоев на основе бора на стали 4X4BMФC (ДИ22, AISI H12) при различных содержаниях в насыщающей пасте Cr_2O_3 . Содержание Cr_2O_3 в данном случае принимали равным 1 и 2 масс. % (рис.1). Диффузионный слой имеет среднюю толщину,

равную 32,7 мкм при содержании Cr_2O_3 1 % (рис.1а), но обладает многочисленными порами. При увеличении содержания Cr_2O_3 до 2 %, диффузионный слой образует плотную структуру, а его толщина увеличивается до 55,4 мкм (рис.1б). При этом микроструктура диффузионного слоя претерпевает значительные изменения: при большем содержании Cr_2O_3 в насыщающей смеси, боридный слой уплотняется настолько, что его игольчатое строение не определяется явно. Кроме того, микроструктура переходной зоны не имеет явных отличий от микроструктуры основного материала. Тогда как при 1 масс. % содержания Cr_2O_3 в насыщающей смеси боридный слой имеет характерное игольчатое строение с закругленными концами боридных игл, под слоем имеется явно выраженная переходная зона, определяемая по нодулярным выделениям комплексных соединений железа, бора и углерода, дополнительно легированных хромом, вольфрамом и молибденом.



а)



б)

Рис.1. Микроструктура диффузионных многокомпонентных слоев на основе бора на стали 4X4BMФC (ДИ22, AISI H12) при различных содержаниях Cr_2O_3 : (а) 1 %, (б) 2 %

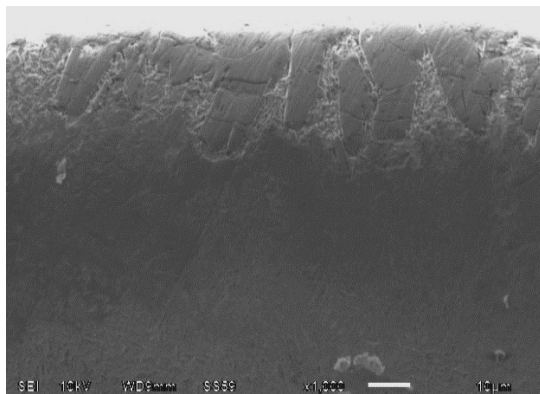
Fig.1. Microstructure of diffusion multi-component layers based on boron on steel 4X4BMFC (DI22, AISI H12) at different Cr_2O_3 contents: (a) 1 %, (b) 2 %

На рисунке 2 изображены микроструктуры диффузионных многокомпонентных слоев на основе бора на стали ASTM L6 при содержании

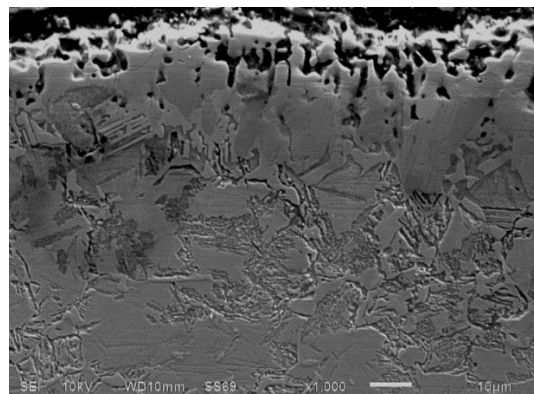
в насыщающей пасте Cr_2O_3 в количестве 1 и 2 масс. % (рис.2) увеличение содержания Cr_2O_3 более 2 масс. %, в этом случае приводит к фор-

мированию пористых, хрупких слоев, имеющих тенденцию к самопроизвольному скалыванию. Диффузионный слой имеет среднюю толщину, равную 29,6 мкм при содержании Cr_2O_3 1 % (рис.2а), но представлен разрозненными единичными иглами, имеющими закругленные концы. При увеличении содержания Cr_2O_3 до

2 %, диффузионный слой образует более плотную структуру, а его толщина увеличивается до 33,4 мкм (рис.2б). В верхней части боридного слоя наблюдаются многочисленные поры, имеющие открытый характер и протяженность в направлении нормали к поверхности.



а)



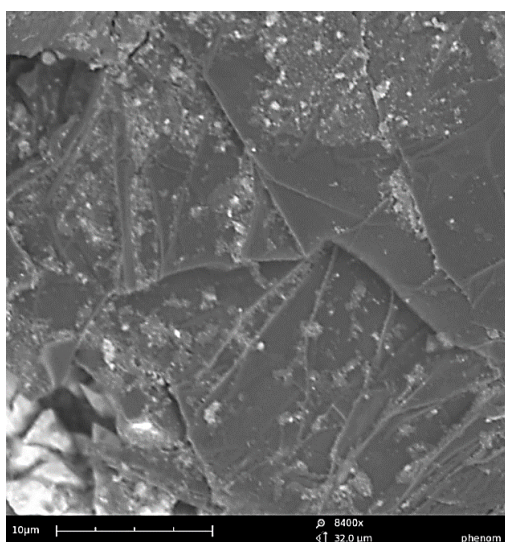
б)

Рис.2. Микроструктура диффузионных многокомпонентных слоев на основе бора на стали ASTM L6 при различных содержаниях Cr_2O_3 : (а) 1 %, (б) 2 %

Fig.2. Microstructure of boron-based diffusion multicomponent layers on ASTM L6 steel at different Cr_2O_3 contents: (a) 1 %, (b) 2 %

Исследования поверхности диффузионных покрытий на стали ASTM L6, показали, что введение 1 и 2 масс. % Cr_2O_3 в борлирующую смесь приводят к изменению морфологии поверхности боридного слоя (рис.3): в случае введения 1 масс. % Cr_2O_3 поверхность боридно-

го слоя имеет гладкую морфологию, тогда как при введении 2 масс. % Cr_2O_3 морфология поверхности боридного слоя меняется на складчатую, что в свою очередь, выглядит на поперечных шлифах диффузионного слоя как пористость.



а)



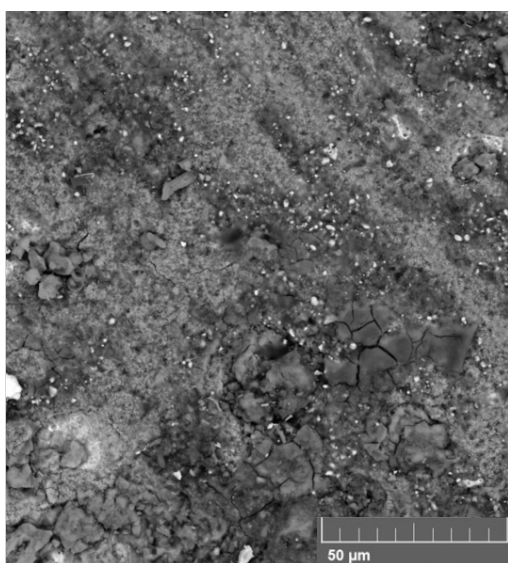
б)

Рис.3. Морфология поверхности боридного слоя на стали ASTM L6 при различных содержаниях Cr_2O_3 : (а) 1 %, (б) 2 %

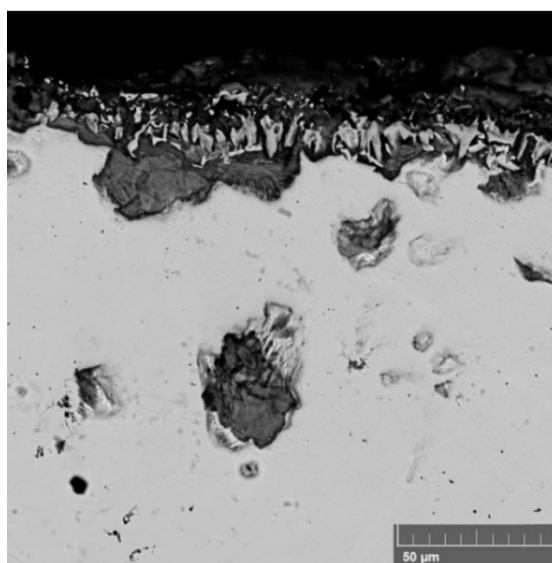
Fig.3. Surface morphology of the boride layer on ASTM L6 steel at various Cr_2O_3 contents: (a) 1 %, (b) 2 %

Как видно из рисунка 4, после высокотемпературного окисления на поверхности окисленного боридного слоя на стали ASTM L6 наблюдаются точечные очаги интенсивной коррозии с характерными повреждениями в виде трещин (рис.4а). На поперечном сечении диффузионного слоя после испытаний на высокотемпературную коррозию видно, что окислению подвергся как сам боридный слой, так и переходная зона под ним (рис.4б). Исходя из строения диффузионного покрытия стали ASTM L6 после высокотемпературного окисления при 800 °С в течение 6 ч, столь интен-

сивная коррозия диффузионного покрытия по сравнению со сталью AISI H12 наблюдается в силу того, что сталь AISI H12 имеет большее содержание легирующих элементов, среди которых имеется также и кремний, который значительно повышает стойкость сталей к высокотемпературному окислению. При этом содержание хрома в самой стали AISI H12 также несколько выше по сравнению со сталью ASTM L6, что также положительно сказывается на повышении стойкости упрочняющего слоя к высокотемпературному окислению.



а)



б)

Рис.4. Поперечное сечение боридного слоя на стали ASTM L6 после высокотемпературного окисления при 800 °С в течение 6 ч

Fig.4. Cross section of boride layer on ASTM L6 steel after high temperature oxidation at 800 °C for 6 h

Заключение

В данной работе предложен метод одно-временной диффузии насыщения бора и хрома в инструментальную сталь, а также проанализированы микроструктура и стойкость боридного слоя к высокотемпературному окислению. Результаты исследования показывают, что:

1) при увеличении содержания Cr_2O_3 в боридирующей смеси с 1 до 2 масс. %, диффузионный слой образует плотную структуру на стали AISI H12, а его толщина увеличивается до 55,4 мкм. Кроме того, микроструктура переходной зоны не имеет явных отличий от микроструктуры основного материала. Аналогичным образом, диффузионный слой стали ASTM L6 образует более плотную структуру, а его толщина увеличивается до 33,4 мкм;

2) в верхней части боридного слоя на стали ASTM L6 наблюдаются многочисленные поры, имеющие открытый характер и протяженность в направлении нормали к поверхности. После высокотемпературного окисления на поверхности окисленного боридного слоя на стали ASTM L6 наблюдаются точечные очаги интенсивной коррозии с характерными повреждениями в виде трещин.

Список литературы

1. Лыгденов Б.Д., Гурьев А.М., Чжен Ц., Самаев Ж.В., Кошелева Е.А. Некоторые аспекты формирования диффузионного слоя при комплексном борировании инструментальной стали // Ползуновский альманах. 2021. № 3. С. 67–71.
2. Володин Т.В., Карасев А.В., Володин

- В.Л. Повышение прочностных и эксплуатационных свойств инструментальных сталей и инструмента импульсным высокоэнергетическим методом воздействия // Проблемы машиностроения и надежности машин. 2004. № 6. С. 56–61.
3. Guryev A.M., Ivanov S.G. Guryev M.A., Chernykh E.V. Structural Factors of Hardening of U8A Carbon Tool Steel under Cyclic Heat Exposure // *Technical Physics*. 2023. V. 68, N 8. P. 171–176.
4. Гурьев А.М., Ворошнин Л.Г., Хараев Ю.П., Лыгденев Б.Д., Черных Е.В. Циклическое тепловое воздействие при термической и химико-термической обработке инструментальных сталей // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. 2005. Т. 2, № 3. С. 37–45.
5. Choi J., Choi J., Lee K., Nahmkeon H., Naksoo K. Fatigue Life Prediction Methodology of Hot Work Tool Steel Dies for High-Pressure Die Casting Based on Thermal Stress Analysis // *Metals*. 2022. V. 12, N 10. P. 1744.
6. Wu L., Das S., Gridin W., Leuders S., Kahlert M. et al. Hot work tool steel processed by laser powder bed fusion: A review on most relevant influencing factors // *Advanced Engineering Materials*. 2021. V. 23, N 7. P. 2100049.
7. Emamverdian A.A., Sun Y., Cao C., Pruncu C., Wang Y. Current failure mechanisms and treatment methods of hot forging tools (dies)-a review // *Engineering Failure Analysis*. 2021. V. 129. P. 105678.
8. Иванов С.Г., Гурьев А.М., Лыгденев Б.Д., Гурьев М.А. Морфология и фазовый состав диффузионного боридного слоя на основе металлографического анализа стали 45 // *Вестник Сибирского государственного промышленного университета*. 2023. Т. 43, № 1. С. 59–65.
9. Власова О.А., Иванов С.Г., Гурьев М.А., Кошелева Е.А., Гурьев А.М. Повышение прочности диффузионных карбоборидных покрытий термоциклированием в процессе их получения // В сборнике материалов IV Всероссийской научно-технической конференции студентов, аспирантов и молодых ученых «Наука и молодежь – 2007» (НиМ–2007). 2007. С. 110–112.
10. Gur'ev A.M., Gur'ev M.A., Ivanov S.G., Chernykh E.V. Diffusion Hardening of Sintered Ceramic W–Co Materials by Simultaneous Diffusion Saturation with Boron, Chromium, and Titanium // *Technical Physics*. 2022. V. 67, N 10. P. 692–695.
11. Гармаева И.А., Гурьев А.М., Иванова Т.Г., Гурьев М.А., Иванов С.Г. Сравнительное исследование насыщающей способности борированных сред различного состава // *Письма о материалах*. 2016. Т. 6, № 4(24). С. 262–265.
12. Гурьев А.М., Иванов С.Г., Гурьев М.А., Деев В.Б., Логинова М.В. Влияние состава борсодержащей активной среды в виде обмазки на структуру и свойства диффузионного слоя деталей из титана // *Известия высших учебных заведений. Цветная металлургия*. 2022. Т. 28, № 1. С. 60–66.
13. Гурьев М.А., Иванов С.Г., Гурьев А.М., Лыгденев Б.Д. Формирование диффузионного слоя на стали 45 при одновременном насыщении бором, хромом и титаном // *Ползуновский вестник*. 2021. № 2. С. 218–224.
14. Türkmen İ., Yalamaç E. Effect of alternative boronizing mixtures on boride layer and tribological behaviour of boronized SAE 1020 steel // *Metals and Materials International*. 2022. P. 1–15.
15. Иванов С.Г., Гурьев М.А., Иванов А.Г., Гурьев А.М. Влияние добавок легирующих элементов в обмазку на процессы комплексного многокомпонентного диффузионного насыщения стали // *Современные наукоемкие технологии*. 2010. № 7. С. 170–172.
16. Zheng Q., Mei Sh., Xiao Zh., Yang J., Chen Z. et al. Effect of cooling methods on the tribological, oxidation and corrosion properties of CeO₂ composite boronizing coatings on 4Cr5MoSiV1 steel // *Journal of Materials Research and Technology*. 2024. V. 30. P. 3807–3821.
17. Zheng Q., Mei Sh., Xiao Zh. Tribological, oxidation and corrosion properties of ceramic coating on AISI H13 steel by rare earth-Cr composite boronizing // *Ceramics International*. 2024. V. 50, N 6. P. 8760–8776.
18. Mei S., Zhang Y., Zheng Q., Fan Y., Lygdenov B. et al. Compound Boronizing and Its Kinetics Analysis for H13 Steel with Rare Earth CeO₂ and Cr₂O₃ // *Applied Sciences (Switzerland)*. 2022. V. 12, N 7. 3636.
19. Иванов С.Г., Гурьев М.А., Гурьев А.М., Романенко В.В. Фазовый анализ боридных комплексных диффузионных слоев на углеродистых сталях при помощи цветного травления // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. 2020. Т. 17, № 1. С. 74–77.
20. Иванов С.Г., Гурьев А.М., Земляков С.А., Гурьев М.А., Романенко В.В. Особенности методики подготовки образцов для автоматического анализа карбидной фазы стали Х12Ф1 после цементации в вакууме с применением программного комплекса "ТНХОМЕТ PRO" // *Ползуновский вестник*. 2020. № 2. С. 165–168.

21. Иванов С.Г., Гурьев А.М., Земляков С.А., Гурьев М.А. Методика пробоподготовки образцов высоколегированных сталей для автоматического анализа карбидной фазы // Ползуновский вестник. 2020. № 3. С. 102–105.

Информация об авторах

Ц. Чжэн – аспирант Уханьского текстильного университета, Алтайского государственного технического университета им. И.И. Ползунова.

М. А. Гурьев – кандидат технических наук, доцент, Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова, Уханьский текстильный университет, Чжэцзян Бриллиант Холодильное Оборудование Ко., ООО.

Ш. Мэй – доктор технических наук, профессор Уханьского текстильного университета.

Е. В. Черных – кандидат физико-математических наук, доцент Алтайского государственного технического университета им. И.И. Ползунова.

Б. Д. Лыгденов – доктор технических наук, профессор Уханьского текстильного университета.

А. М. Гурьев – доктор технических наук, профессор, заведующий кафедрой Алтайского государственного технического университета им. И.И. Ползунова, профессор Уханьского текстильного университета.

Е. А. Кошелева – кандидат технических наук, доцент Алтайского государственного технического университета им. И.И. Ползунова.

References

- Lygdenov, B. D., Gur'yev, A. M., Zheng, Q., Samayev Zh. V. & Kosheleva, E. A. (2021). Nekotoryye aspekty formirovaniya diffuzionnogo sloya pri kompleksnom borirovaniy instrumental'noy stali. *Polzunovskiy al'manakh*, (3), 67–71. (In Russ.).
- Volodin, T. V., Karasev, A. V. & Volodin, V. L. (2004). Povysheniye prochnostnykh i ekspluatatsionnykh svoystv instrumental'nykh staley i instrumenta impul'snym vysokoenergeticheskim metodom vozdeystviya. *Problemy mashinostroyeniya i nadezhnosti mashin*, (6), 56–61. (In Russ.).
- Guryev, A. M., Ivanov, S. G. Guryev, M. A. & Chernykh, E. V. (2023). Structural Factors of

Hardening of U8A Carbon Tool Steel under Cyclic Heat Exposure. *Technical Physics*, 68(8), 171–176.

4. Gur'yev, A. M., Voroshnin, L. G., Kharayev, Yu. P., Lygdenov, B. D. & Chernykh, E. V. (2005). Tsiklicheskiye teplovoye vozdeystviye pri termicheskoy i khimiko-termicheskoy obrabotke instrumental'nykh staley. *Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedeniya (Basic Problems of Material Science (BPMS))*, 2(3), 37–45. (In Russ.).

5. Choi, J., Choi, J., Lee, K., Nahmkeon, H. & Naksoo, K. (2022). Fatigue Life Prediction Methodology of Hot Work Tool Steel Dies for High-Pressure Die Casting Based on Thermal Stress Analysis. *Metals*, 12(10), 1744.

6. Wu, L., Das, S., Gridin, W., Leuders, S. & Kahlert, M. et al. (2021). Hot work tool steel processed by laser powder bed fusion: A review on most relevant influencing factors. *Advanced Engineering Materials*, 23(7), 2100049.

7. Emamverdian, A. A., Sun, Y., Cao, C., Pruncu, C. & Wang, Y. (2021). Current failure mechanisms and treatment methods of hot forging tools (dies)-a review. *Engineering Failure Analysis*, 129, 105678.

8. Ivanov, S. G., Gur'yev, A. M., Lygdenov, B. D. & Gur'yev, M. A. (2023). Morfologiya i fazovyy sostav diffuzionnogo boridnogo sloya na osnove metallograficheskogo analiza stali 45. *Vestnik Sibirskogo gosudarstvennogo industrial'nogo universiteta*, 43(1), 59–65. (In Russ.).

9. Vlasova, O. A., Ivanov, S. G., Gur'yev, M. A., Kosheleva, E. A. & Gur'yev, A. M. (2007). Povysheniye prochnosti diffuzionnykh karboridnykh pokrytiy termotsiklirvaniyem v protsesse ikh polucheniya. *V sbornike materialov IV Vserossiyskoy nauchno-tekhnicheskoy konferentsii studentov, aspirantov i molodykh uchennykh «Nauka i molodezh' – 2007» (NiM-2007)*, 110–112. (In Russ.).

10. Gur'ev, A. M., Gur'ev, M. A., Ivanov, S. G. & Chernykh, E. V. (2022). Diffusion Hardening of Sintered Ceramic W–Co Materials by Simultaneous Diffusion Saturation with Boron, Chromium, and Titanium. *Technical Physics*, 67(10), 692–695.

11. Garmayeva, I. A., Gur'yev, A. M., Ivanova, T. G., Gur'yev, M. A. & Ivanov, S. G. (2016). Sravnitel'noye issledovaniye nasyshchayushchey sposobnosti boriruyushchikh sred razlichnogo sostava. *Pis'ma o materialakh*, 6(4(24)), 262–265. (In Russ.).

12. Gur'yev, A. M., Ivanov, S. G., Gur'yev, M. A., Deyev, V. B. & Loginova, M. V. (2022). Vliyaniye sostava borsoderzhashchey aktivnoy sredy v vide obmazki na strukturu i svoystva

diffuzionnogo sloya detaley iz titana. *Izvestiya vysshikh uchebnykh zavedeniy. Tsvetnaya metallurgiya*, 28(1), 60–66. (In Russ.).

13. Gur'yev, M. A., Ivanov, S. G., Gur'yev, A. M. & Lygdenov, B. D. (2021). Formirovaniye diffuzionnogo sloya na stali 45 pri odnovremennom nasyshchenii borom, khromom i titanom. *Polzunovskiy vestnik*, (2), 218–224. (In Russ.).

14. Türkmen, İ. & Yalamaç, E. (2022). Effect of alternative boronizing mixtures on boride layer and tribological behaviour of boronized SAE 1020 steel. *Metals and Materials International*, 1–15.

15. Ivanov, S. G., Gur'yev, M. A., Ivanov, A. G. & Gur'yev, A. M. (2010). Vliyaniye dobavok legiruyushchikh elementov v obmazku na protsessy kompleksnogo mnogokomponentnogo difuzionnogo nasyshcheniya stali. *Sovremennyye naukoymkiye tekhnologii*, (7), 170–172. (In Russ.).

16. Zheng, Q., Mei, Sh., Xiao, Zh., Yang, J. & Chen, Z. et al. (2024). Effect of cooling methods on the tribological, oxidation and corrosion properties of CeO₂ composite boronizing coatings on 4Cr5MoSiV1 steel. *Journal of Materials Research and Technology*, (30), 3807–3821.

17. Zheng, Q., Mei, Sh. & Xiao, Zh. (2024). Tribological, oxidation and corrosion properties of ceramic coating on AISI H13 steel by rare earth-Cr composite boronizing. *Ceramics International*, 50(6), 8760–8776.

18. Mei, S., Zhang, Y., Zheng, Q., Fan, Y. & Lygdenov, B. et al. (2022). Compound Boronizing and Its Kinetics Analysis for H13 Steel with Rare Earth CeO₂ and Cr₂O₃. *Applied Sciences (Switzerland)*, 12(7), 3636.

19. Ivanov, S. G., Gur'yev, M. A., Gur'yev, A. M. & Romanenko, V. V. (2020). Fazovyy analiz boridnykh kompleksnykh diffuzionnykh sloyev na uglerodistykh stalyakh pri pomoshchi tsvetnogo travleniya. *Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedeniya (Basic Problems of Material Science (BPMS))*, 17(1), 74–77. (In

Russ.).

20. Ivanov, S. G., Gur'yev, A. M., Zemlyakov, S. A., Gur'yev, M. A. & Romanenko, V. V. (2020). Osobennosti metodiki podgotovki obratstov dlya avtomaticheskogo analiza karbidnoy fazy stali KH12F1 posle tsementatsii v vakuume s primeneniyyem programmnoy kompleksa "THIXOMET PRO". *Polzunovskiy vestnik*, (2), 165–168. (In Russ.).

21. Ivanov, S. G., Gur'yev, A. M., Zemlyakov, S. A. & Gur'yev, M. A. (2020). Metodika probopodgotovki obratstov vysokolegirovannykh staley dlya avtomaticheskogo analiza karbidnoy fazy. *Polzunovskiy vestnik*, (3), 102–105. (In Russ.).

Information about the authors

Q. Zheng – Post-Graduate Student, Wuhan Textile University, I.I. Polzunov Altai State Technical University.

M. A. Guryev – Candidate of Technical Sciences, Assistant Professor, I.I. Polzunov Altai State Technical University, Wuhan Textile University, Zhejiang Brilliant Refrigeration Equipment Co., Ltd.

S. Mei – PhD, Professor, Wuhan Textile University.

E. V. Chernykh – Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Assistant Professor, I.I. Polzunov Altai State Technical University.

B. D. Lygdenov – Doctor of Technical Sciences, Professor, Wuhan Textile University.

A. M. Guryev – Doctor of Technical Sciences, Professor, Head of department, I.I. Polzunov Altai State Technical University, Wuhan Textile University.

E. A. Kosheleva – Candidate of Technical Sciences, Assistant Professor, I.I. Polzunov Altai State Technical University.

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.
The authors declare that there is no conflict of interest.

Статья поступила в редакцию 12.04.2024; одобрена после рецензирования 06.05.2024; принята к публикации 20.05.2024.

The article was received by the editorial board on 12 Apr. 24; approved after reviewing 06 May 24; accepted for publication 20 May 24.

Научная статья

2.6.1. Металловедение и термическая обработка металлов и сплавов (технические науки)

УДК 621.762; 537.523.4

doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2024.02.010

ОСАЖДЕНИЕ ПОРОШКА ДИСИЛИЦИДА ВОЛЬФРАМА НА ТИТАНОВЫЙ СПЛАВ Ti6Al4V МЕТОДОМ ЭИЛ

Александр Анатольевич Бурков¹, Мария Андреевна Кулик^{2†}, Александра Юрьевна Быцюра³

^{1, 2, 3} Хабаровский федеральный исследовательский центр ДВО РАН, ул. Тихоокеанская, 153, 680042, Хабаровск, Россия

¹ burkovalex@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-5636-4669>

² marijka80@mail.ru[†], <https://orcid.org/0000-0002-4857-1887>

³ alex_btsr@mail.ru, <https://orcid.org/0009-0005-4750-7970>

Аннотация. Покрyтия на основе Ti–WSi способны обеспечить жаростойкость конструкционных материалов, а также устойчивость к коррозии и изнашиванию. Методом электроискрового легирования титанового сплава Ti6Al4V в анодной смеси из титановых гранул с добавлением 2, 6 и 10 об. % порошка дисилицида вольфрама получены металлокерамические Ti–WSi покрытия. Структуру покрытий изучали методами рентгенофазового анализа, растровой электронной микроскопии и микрорентгеноспектрального анализа. Испытания на жаростойкость проводились при температуре 900 °С в течении 100 часов. Износостойкость покрытий исследовались в условиях сухого трения при нагрузке 25 Н. По данным рентгенофазового анализа в составе покрытий присутствуют низкотемпературный WSi₂, αTi, Ti₅Si₃ и высокотемпературный WSi₂. С ростом содержания WSi₂ в анодной смеси микротвердость покрытий монотонно возрастала с 11,93 до 13,24 ГПа. Средние значения коэффициента трения покрытий находились в диапазоне от 0,75 до 0,86. По результатам испытаний, износостойкость покрытий была от 3 до 7 раз выше, чем у сплава Ti6Al4V. Применение электроискровых Ti–WSi покрытий позволяет повысить жаростойкость титанового сплава Ti6Al4V от 7 до 14 раз.

Ключевые слова: дисилицид вольфрама, Ti–WSi покрытие, сплав Ti6Al4V, электроискровое легирование, жаростойкость, твердость, коррозия, коэффициент трения, износ.

Благодарности: Работа выполнена в рамках государственного задания № 075-01108-23-02.

Для цитирования: Бурков А.А., Кулик М.А., Быцюра А.Ю. Осаждение порошка дисилицида вольфрама на титановый сплав Ti6Al4V методом ЭИЛ // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2024. Т. 21, № 2. С. 220–229. doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2024.02.010.

Original article

DEPOSITION OF TUNGSTEN DISILICIDE POWDER ON TITANIUM ALLOY Ti6Al4V BY ESD TECHNIQUE

Alexander A. Burkov¹, Marija A. Kulik^{2†}, Alexandra Yu. Bytsura³

^{1, 2, 3} Khabarovsk Federal Research Center FEB RAS, Tikhookeanskaya Str., 153 Khabarovsk, 680042, Russia

¹ burkovalex@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-5636-4669>

² marijka80@mail.ru[†], <https://orcid.org/0000-0002-4857-1887>

³ alex_btsr@mail.ru, <https://orcid.org/0009-0005-4750-7970>

Abstract. Ti–WSi-based coatings can provide thermal stability of structural materials, their resistance to oxidation and corrosion, as well as resistance to abrasive wear. Ti–WSi₂ coatings were obtained using the electrospark deposition method on titanium alloy Ti6Al4V in an anode mixture of titanium granules with the addition of 2, 6, 10 vol. % tungsten disilicide powder. The structure of the coatings was studied by X-ray phase analysis, scanning electron microscopy and micro-X-ray spectral analysis. Oxidation resistance tests were carried out at a temperature of 900 °C for 100 hours. The wear resistance of the coatings was studied under dry friction conditions at a load of 25 N. According to X-ray phase analysis, the composition of the coatings contains low-temperature WSi₂, αTi,

Ti₅Si₃, and high-temperature WSi₂. With increasing WSi₂ content in the anode mixture, the microhardness of the coatings increased from 11.93 to 13.24 GPa. The average values of the coefficient of friction of the coatings ranged from 0.75 to 0.86. According to test results, the wear resistance of the coatings was from 3 to 7 times higher than that of the Ti6Al4V alloy. The use of electrospark deposition Ti–WSi coatings makes it possible to increase the oxidation resistance of titanium alloy Ti6Al4V from 7 to 14 times.

Keywords: tungsten disilicide, Ti–WSi coating, Ti6Al4V alloy, electrospark deposition, oxidation resistance, hardness, corrosion, coefficient of friction, wear.

Acknowledgements: The work was carried out within the framework of state assignment No. 075-01108-23-02.

For citation: Burkov, A. A., Kulik, M. A. & Bytsura, A. Yu. (2024). Deposition of tungsten disilicide powder on titanium alloy Ti6Al4V by ESD technique. *Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedeniya (Basic Problems of Material Science (BPMS))*, 21(2), 220–229. (In Russ.). doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2024.02.010.

Введение

Дисилицид вольфрама (WSi₂) является электропроводной керамикой, обладающей высокой твердостью (13 ГПа) [1], высокой температурой плавления (2160°C), коррозионной устойчивостью и высокой жаропрочностью [2]. Высокая жаростойкость WSi₂ обусловлена, образующейся на его поверхности самовосстанавливающейся защитной пленкой SiO₂ [3]. Кроме того, WSi₂ обладает ценными термоэлектрическими свойствами [4]. В настоящее время силициды вольфрама вызывают большой интерес благодаря широкому спектру высокотемпературных применений: нагревательные элементы и газовые горелки [5], компоненты горячей секции турбинных авиационных двигателей и автомобилестроение [6, 7]. Благодаря высокой твердости и жаростойкости, перспективно наносить защитные металлокерамические (МК) покрытия из WSi₂, способные обеспечить стойкость к высокотемпературному окислению и коррозии, а также сопротивляемость к изнашиванию. Покрытия из WSi₂ наносят на металлические подложки различными технологиями: методом горячего погружения [8]; вакуумного [9-10] и атмосферного газопламенного напыления [11], а также электроискрового легирования (ЭИЛ), используя электроды Fe–Cr–WSi₂ [12].

Метод ЭИЛ основан на явлении электрической эрозии и полярного переноса материала анода на катод при протекании микросекундных разрядов в газовой среде [13]. При сближении анода и катода происходит кратковременный электрический разряд, который расплавляет материал электрода и переносит его в микрованну расплава на поверхности обрабатываемой детали. На поверхности катода образуется покрытие модифицированной структуры и состава, что обусловлено конвективным пе-

ремешиванием металлов в микрованне расплава и высокими скоростями охлаждения материала после окончания разряда [14]. Преимуществом данного метода является, высокая адгезия формируемых покрытий без заметного термического воздействия на обрабатываемую деталь [13, 15]. Видоизмененный метод электроискрового легирования нелокализованным электродом (ЭИЛНЭ) позволяет обрабатывать криволинейные поверхности деталей в автоматическом режиме [16]. Такой способ ЭИЛ имеет ряд преимуществ, поскольку позволяет использовать порошки в качестве основного компонента покрытий [17]. Технология ЭИЛНЭ позволяет наносить металлокерамические покрытия на титановый сплав Ti6Al4V [18]. Перспективно наносить WSi₂ покрытия на титановый сплав, поскольку его основными недостатками являются низкая твердость и жаростойкость [18, 19]. Кроме того, в процессе ЭИЛНЭ титанового сплава с использованием порошка WSi₂ будет происходить его частичное взаимодействие с титаном с формированием силицидов титана, также обладающих ценными свойствами. Цель работы – исследовать возможность нанесения порошка дисилицида вольфрама (WSi₂) на титановый сплав (Ti6Al4V) методом ЭИЛНЭ и изучить структуру, жаростойкость и триботехнические свойства покрытий в зависимости от концентрации WSi₂ в анодной смеси (АС).

Методика и материалы

Были приготовлены три анодные смеси, состоящие из разного количества порошка дисилицида вольфрама и гранул титанового сплава ВТ1-00 (табл.1). Порошок имел средний диаметр частиц 9,61±5,13 мкм. Фазовый анализ порошка показал, что он состоит из низкотемпературной фазы WSi₂ с небольшими примесями вольфрама, кремния и W₅Si₃ (рис.1). Грану-

лы изготавливались путем нарезания прутков сплава ВТ1-00 диаметром $4 \pm 0,5$ мм на отрезки длиной 4 ± 1 мм. Покрытие наносилось на подложку из сплава Ti6Al4V в форме цилиндра высотой 10 ± 1 мм и диаметром $12 \pm 0,1$ мм. Схема установки для ЭИЛНЭ подробно описана в работе [18]. Прямоугольные импульсы разрядного тока имели среднюю амплитуду 110 А при напряжении 30 В. Длительность импульсов составляла 100 мкс, частота повторения – 1 кГц. Общая продолжительность ЭИЛНЭ составляла 10 минут. В рабочий объем контейнера вводился защитный газ (аргон) с рас-

ходом $5 \text{ л}\cdot\text{мин}^{-1}$. Фазовый состав и структуру покрытий исследовали с применением рентгеновского дифрактометра ДРОН-7 в Cu-K α -излучении. Микроструктура покрытий исследовалась с применением растрового электронного микроскопа Vega 3 LMH (Tescan, Чехия), оснащенного энергодисперсионным спектрометром (ЭДС) X-max 80 (Oxford Instruments, Великобритания). Шероховатость покрытий была измерена на профилометре TR 200 (TIME GROUP Inc., Китай). Краевой угол смачивания определяли методом “сидячей капли” при комнатной температуре [20].

Таблица 1. Состав анодных смесей, обозначение покрытий и их характеристики

Table 1. Composition of anode mixtures, designation of coatings and their characteristics

Обозначение образцов	WSi2	WSi6	WSi10
Гранулы ВТ1-00, об. %	98	94	90
Порошок WSi ₂ , об. %	2	6	10
Толщина, мкм	$18,7 \pm 2,9$	$20,2 \pm 3,3$	$23,58 \pm 9,46$
Шероховатость (Ra), мкм	$4,22 \pm 0,68$	$4,30 \pm 0,90$	$5,17 \pm 0,62$
УСВ, °	$76,83 \pm 1,2$	$76,18 \pm 0,75$	$75,59 \pm 0,90$

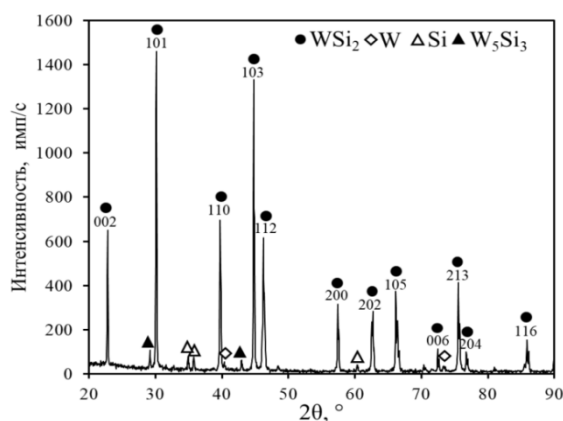


Рис.1. Рентгеновская дифрактограмма порошка дисилицида вольфрама

Fig.1. X-ray diffraction pattern of tungsten disilicide powder

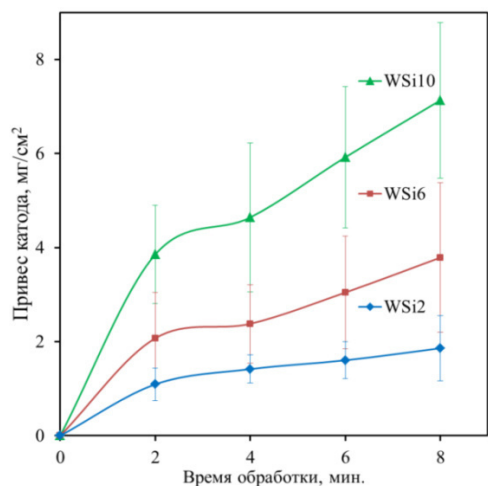
Кинетику массопереноса изучали путем взвешивания образцов, через каждые 2 минуты нанесения покрытия на аналитических весах «Vibra НТ120» с точностью до 0,1 мг. Поляризационные испытания проводились в трехэлектродной ячейке с 3,5 %-ным раствором NaCl с использованием потенциостата Р-2Х (Electro Chemical Instruments, г. Черногловка) со скоростью сканирования 4 мВ/с. Стандартный хлорсеребряный электрод выступал электродом сравнения, а в качестве контрэлектрода применялся спаренный платиновый электрод ЭТП-02.

Перед съемкой образцы выдерживались 2 часа для стабилизации тока разомкнутой цепи. Твердость покрытий измеряли на микротвердометре ПМТ-3М (ОАО «ЛОМО», г. Санкт-Петербург) при нагрузке 0,5 Н по методу Виккерса. Износостойкость образцов исследовалась на лабораторной установке по схеме «штифт на диске», следуя процедуре ASTM G99-17, при сухом трении скольжения на скорости $0,47 \text{ мс}^{-1}$ при нагрузке 25 Н. Для записи коэффициента трения использовался бесконтактный датчик крутящего момента вращения М40-50. Время тестирования составляло 10 мин. В качестве контртела использовались диски из быстрорежущей стали Р6М5 с твердостью 60 HRC. Износ оценивали гравиметрическим способом. Образец каждого типа испытывался, по меньшей мере, трехкратно.

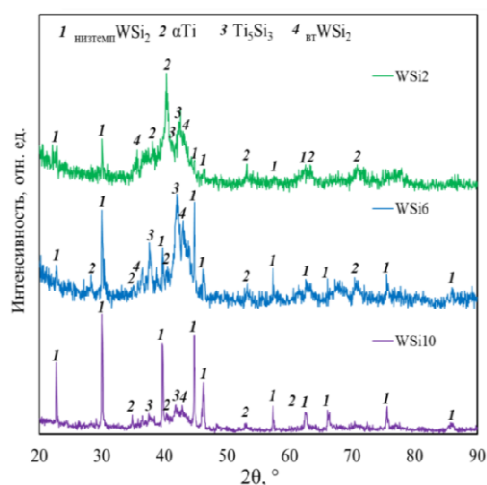
Результаты и их обсуждение

На рис.2а показаны зависимости привеса катода от времени ЭИЛ. В ходе ЭИЛНЭ возникали электрические разряды между титановыми гранулами и подложкой, в результате которых происходил жидкофазный перенос металла с поверхности гранул на поверхность подложки. Частицы порошка WSi₂, оказавшиеся на поверхности электродов в момент развития разрядного канала, сплавлялись с металлом. Для всех образцов после 2 минут обработки наблю-

далось замедление привеса катода, что также характерно для традиционного ЭИЛ [21]. Средняя скорость привеса катода повышалась с ростом концентрации порошка WSi_2 в АС. Это объясняется улучшением условий возникновения разрядов при наличии частиц порошка в межэлектродном промежутке [22].



а)



б)

Рис.2. Прирост массы подложки как функция от времени осаждения (а) и рентгенограммы полученных покрытий (б)

Fig.2. Mass gain of the substrate as a function of deposition time (a) and XRD patterns of resulted coatings (b)

На рис.2б показаны результаты рентгенофазового анализа, которые указывают на металлокерамическую структуру приготовленных покрытий. Так в составе покрытий присутствуют фазы низкотемпературного и высокотемпературного дисилицида вольфрама, αTi и силицид титана Ti_5Si_3 . Поскольку исходный порошок WSi_2 состоял из низкотемпературной фа-

зы (рис.1), то можно сделать вывод, что высокотемпературная фаза образовалась в результате перекристаллизации WSi_2 в условиях разряда. Кроме того часть частиц WSi_2 взаимодействовала с расплавом титана, что привело к образованию ценной фазы силицида титана Ti_5Si_3 [23, 24]. С ростом концентрации порошка WSi_2 в АС концентрация низкотемпературной фазы дисилицида вольфрама в покрытиях увеличивалась. Это приводит к выводу, что в основном реализуется механизм формирования металлокерамики путем внедрения частиц керамики в металлическую матрицу. Это выгодно отличает метод ЭИЛНЭ с использованием порошка, по сравнению с традиционным ЭИЛ, для осаждения МК покрытий [13].

На рис.3а,б изображены поперечные сечения покрытий WSi_2 и WSi_{10} . Все покрытия состоят из светло-серой матрицы с белыми включениями, предположительно являющимися WSi_2 . С ростом добавки порошка в ЭИЛНЭ концентрация включений увеличивается. Толщина покрытий монотонно повышалась от 18,7 мкм до 23,58 мкм с ростом концентрации порошка в АС (табл.1), что хорошо согласуется с данными по массопереносу (рис.2а). Распределение элементов по глубине покрытий, согласно ЭДС анализу, показано на рис.3в,г. При переходе от поверхности покрытия к подложке концентрация титана постепенно возрастала, а содержание вольфрама и кремния снижалось. В покрытии WSi_2 концентрации вольфрама и кремния были ниже, чем в WSi_{10} , что согласуется с результатами рентгенофазового анализа (рис.2б). Высокие концентрации титана в покрытии обусловлены перемешиванием перенесенного материала с титаном подложки, поскольку ранее замечено, что перенос металла с гранул в покрытие составляет менее 10 % [25]. В структуре покрытия WSi_{10} наблюдаются поперечные трещины, что может быть вызвано охрупчиванием из-за увеличенного содержания кремния. Подобное ранее наблюдалось для Ti-Si сплавов [26]. Шероховатость покрытий, по критерию R_a , находилась в диапазоне от 4,22 до 5,17 мкм (табл.1), что не выше чем у покрытий, полученных традиционным ЭИЛ. Смачиваемость поверхности покрытий дистиллированной водой, выражаемая в терминах контактного угла, находилась в диапазоне от 75,59 до 76,83° (табл.1), что выше в сравнении со сплавом Ti6Al4V (57,9°). Это говорит о том, что нанесение Ti-WSi покрытий снижает активность поверхности титанового сплава к загрязнению и коррозии [27].

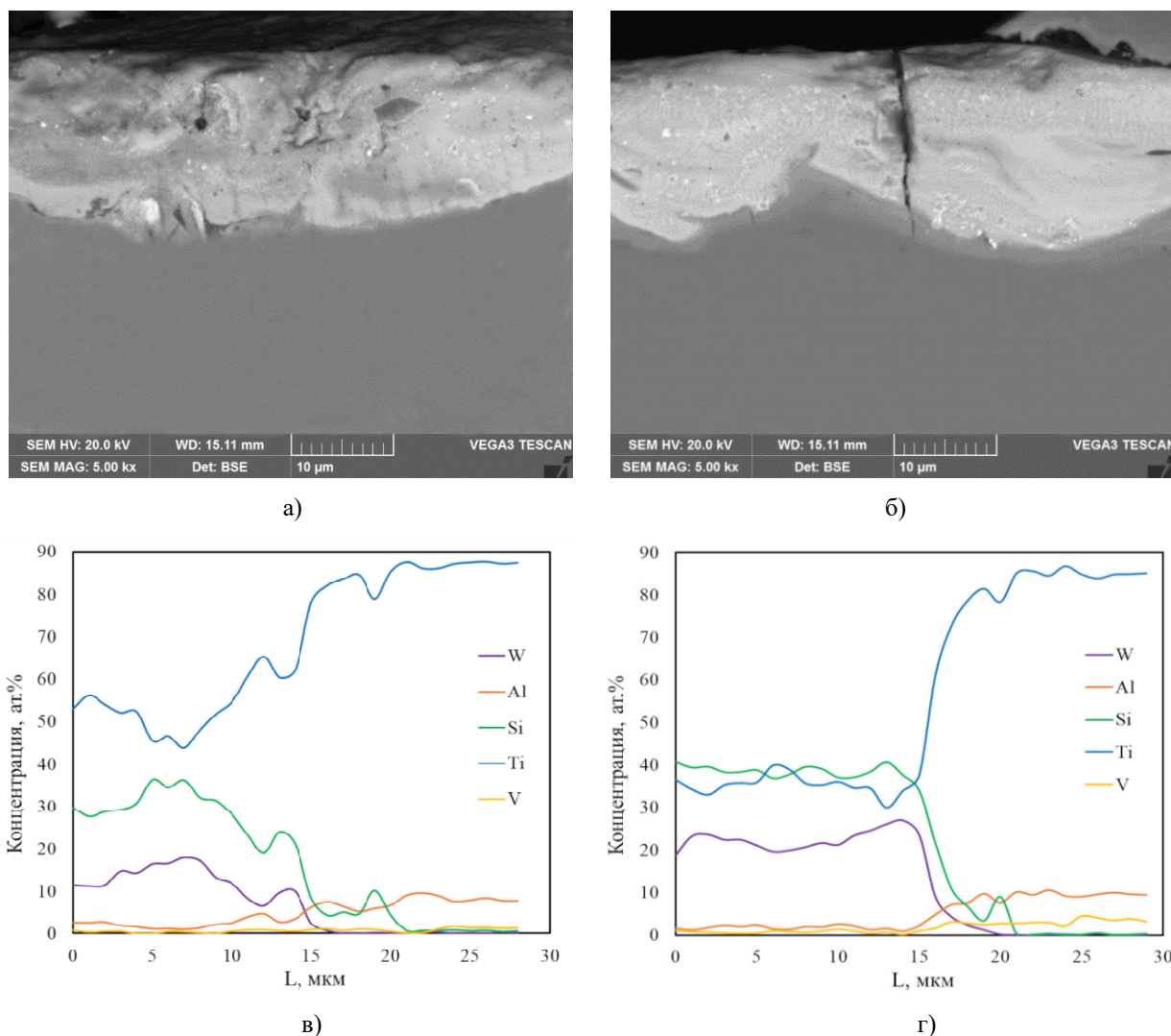


Рис.3. Электронные изображения поперечного сечения покрытий: WSi_2 (а), WSi_{10} (б) и распределение элементов в сечении соответствующих покрытий согласно ЭДС анализу (в, г)

Fig.3. Electron images of the cross section of coatings: WSi_2 (a), WSi_{10} (b) and distribution of elements in the cross section of the corresponding coatings according to EDS analysis (c, d)

На рис.4 показаны средние значения микротвердости $Ti-WSi$ покрытий по сравнению с титановым сплавом $Ti6Al4V$. С ростом содержания WSi_2 в АС микротвердость покрытий монотонно возрастала с 11,93 до 13,24 ГПа. Микротвердость покрытий соответствует твердости дисилицида вольфрама – 13 ГПа [1]. Таким образом, нанесение $Ti-WSi$ покрытий позволяет повысить твердость поверхности титанового сплава $Ti6Al4V$ от 3,98 до 4,41 раз.

Были проведены трибологические испытания приготовленных $Ti-WSi$ покрытий в режиме сухого скольжения. Среднее значения коэффициента трения ($K_{тр}$) покрытий монотонно повышались от 0,75 до 0,86 с ростом содержания WSi_2 в АС (рис.5а). Величина $K_{тр}$ для покрытий

была выше, чем у титанового сплава $Ti6Al4V$. Возрастание $K_{тр}$ с ростом концентрации твердых фаз в покрытиях позволяет предположить, что их более высокий $K_{тр}$, чем у сплава, вызван тем, что твердые фазы покрытия царапают контртело, и чем их больше, тем выше сила трения. Поэтому несмотря на более высокий $K_{тр}$ износостойкость покрытий была от 3 до 7 раз выше, чем у сплава $Ti6Al4V$ (рис.5б). Так приведенный износ покрытий находился в диапазоне от $1,5 \cdot 10^{-5}$ до $3,5 \cdot 10^{-5}$ mm^3/Nm , причем он монотонно снижался с ростом концентрации WSi_2 в АС. Это согласуется с данными по микротвердости покрытий (рис.4) и объясняется повышением концентрации армирующих фаз в покрытиях.

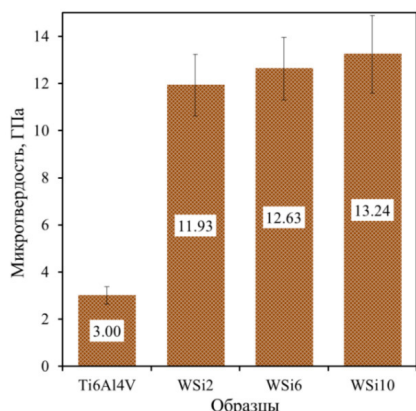
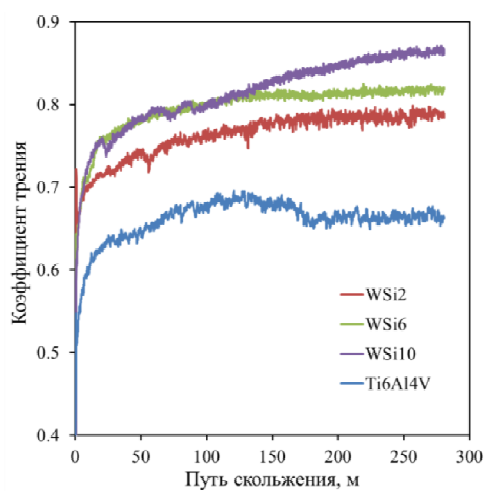
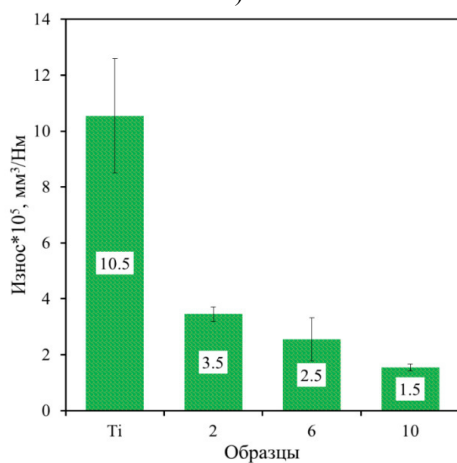


Рис.4. Микротвердость поверхности покрытий по сравнению с титановым сплавом Ti6Al4V

Fig.4. Microhardness of the coating surface compared to titanium alloy Ti6Al4V



а)



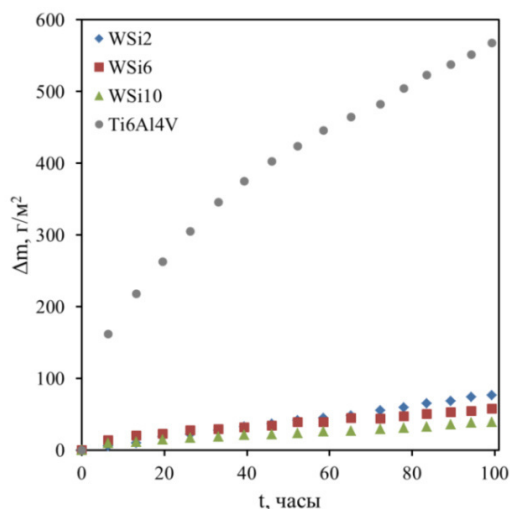
б)

Рис.5. Коэффициент трения (а) и износ (б) покрытий по сравнению с титановым сплавом Ti6Al4V при нагрузке 25 Н

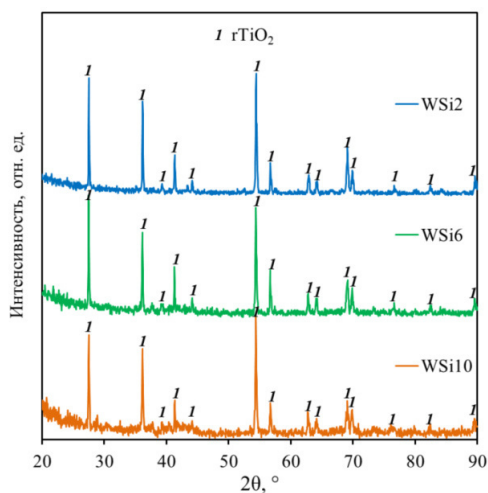
Fig.5. The coefficient of friction (a) and wear (b) of coatings in comparison with titanium alloy Ti6Al4V at a load of 25 N

На рис.6а показаны результаты циклических испытаний образцов из титанового сплава Ti6Al4V с Ti–WSi покрытиями на жаростойкость при температуре 900 °С. По результатам 100 часов испытаний, привес образцов с покрытиями составил от 39,4 до 76,4 г/м², причем он монотонно снижался с ростом добавки WSi₂ в АС. Таким образом, жаростойкость покрытий повышалась с ростом концентрации кремния в покрытиях. На рентгеновских дифрактограммах поверхности всех образцов после испытания на жаростойкость наблюдаются рефлексы рутила rTiO₂. Таким образом, привес образцов, в процессе высокотемпературного окисления, обусловлен фиксацией кислорода с образованием фазы рутила. Высокую жаростойкость Ti–Si материалов к окислению принято объяснять образованием плотной пленки SiO₂ [28], однако на рентгеновской дифрактограмме она не зафиксирована по причине низкой толщины. Сравнение итогового привеса образцов приводит к выводу, что применение электроискровых Ti–WSi покрытий позволяет повысить жаростойкость титанового сплава Ti6Al4V от 7 до 14 раз. Стоит отметить, что наиболее распространенная керамика на основе вольфрама (WC) характеризуется низкой жаростойкостью и тем самым ухудшает жаростойкость МК композиций [18]. Поэтому, силицид вольфрама можно рассматривать в качестве жаростойкой альтернативы WC для МК композиций.

На рис.7 показаны результаты поляризационных испытаний Ti–WSi образцов в 3,5 % р-ре NaCl. Из него следует, что потенциал коррозии (E_{corr}) покрытий монотонно возрастал в диапазоне от -0,55 до -0,43 В с увеличением концентрации кремния в покрытии. Потенциодинамическая кривая покрытия WSi₁₀ демонстрирует меньший E_{corr} , по сравнению с титановым сплавом Ti6Al4V, что указывает на более высокую стойкость к самопроизвольной коррозии. Для исследуемых образцов была рассчитана плотность тока коррозии (I_{corr}) (табл.2), которая пропорциональна скорости коррозии. Плотность тока коррозии у исследуемых образцов монотонно снижалась от $7,10 \cdot 10^{-6}$ до $1,32 \cdot 10^{-6}$ А/см² с увеличением концентрации WSi₂ в АС. Образцы WSi₂ и WSi₆ продемонстрировали более высокую I_{corr} по сравнению с титановым сплавом Ti6Al4V, тогда как у образца WSi₁₀ I_{corr} была ниже – $1,32 \cdot 10^{-6}$ А/см².



а)



б)

Рис.6. Жаростойкость Ti–WSi покрытий и сплава Ti6Al4V при температуре 900 °C (а) и рентгеновские дифрактограммы покрытий после испытания на жаростойкость (б)

Fig.6. Oxidation resistance of Ti–WSi coatings and Ti6Al4V alloy at a temperature of 900 °C (a) and X-ray diffraction patterns of coatings after oxidation resistance testing (б)

Таблица 2. Потенциал (E_{corr}) и ток (I_{corr}) коррозии покрытий, извлеченные из поляризационных кривых

Table 2. Potential (E_{corr}) and current (I_{corr}) of coating corrosion extracted from polarization curves

Параметры	E_{corr} , В	I_{corr} , мкА
Ti6Al4V	-0,5146	2,47
WSi ₂	-0,5465	7,10
WSi ₆	-0,514	2,53
WSi ₁₀	-0,4342	1,32

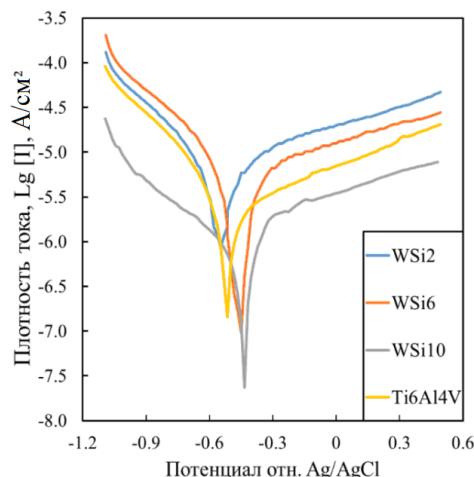


Рис.7. Потенциодинамические поляризационные кривые WSi покрытий и титанового сплава Ti6Al4V

Fig.7. Potentiodynamic polarization curves for WSi coatings and titanium alloy Ti6Al4V

Выводы

Методом ЭИЛ впервые получено Ti–WSi покрытие на Ti6Al4V сплаве в смеси гранул из титанового сплава BT1-00 и порошка WSi₂. Для всех образцов наблюдался монотонный привес катода с ростом времени обработки. Толщина осажденного Ti–WSi покрытия составила от 18,7 до 23,58 мкм. В составе покрытий присутствуют фазы низкотемпературного и высокотемпературного дисилицида вольфрама, αTi и силицида титана Ti₅Si₃. Показано, что изменение добавки порошка WSi₂ в АС позволяет регулировать концентрацию армирующих фаз в покрытии. Угол контакта с водой для Ti–WSi покрытия равен 76,83-75,59°. С ростом содержания WSi₂ в анодной смеси микротвердость покрытий возрастала с 11,93 до 13,24 ГПа. Средние значения коэффициента трения покрытий находились в диапазоне от 0,75 до 0,86. По результатам испытаний износостойкость покрытий была от 3 до 7 раз выше, чем у сплава Ti6Al4V. Применение электроискровых Ti–WSi покрытий позволяет повысить жаростойкость титанового сплава Ti6Al4V от 7 до 14 раз. Поскольку образец WSi₁₀ показал лучшие коррозионные и трибологические свойства, то можно сделать вывод, что оптимальная концентрация порошка WSi₂ в смеси с титановыми гранулами находится около 10 об. %.

Список литературы

1. Murthy T.C., Sonber J.K., Subramanian C., Hubli R.C., Suri A.K. Densification, characterization and oxidation studies of TiB₂–WSi₂ composite

- // International Journal of Refractory Metals and Hard Materials. 2012. V. 33. P. 10–21.
2. Wang S., Pan Y., Lin Y. First-principles study of the effect of Cr and Al on the oxidation resistance of WSi_2 // Chemical Physics Letters. 2018. V. 698. P. 211–217.
3. Kim H.-S., Yoon J.-K., Kim G.-H., Doh J.-M., Kwun S.-I. et al. Growth behavior and microstructure of oxide scales grown on WSi_2 coating // Intermetallics. 2008. V 16, N 3. P. 360–372.
4. Stoetzel J., Schneider T., Mueller M. M., Kleebe H. J., Wiggers H., Schiering G., Schmechel R. Microstructure and thermoelectric properties of Si– WSi_2 nanocomposites // Acta Materialia. 2017. V. 125. P. 321–326.
5. Chanadee T., Wannasin J., Niyomwas S. Synthesis of WSi_2 and W_2B intermetallic compound by in-situ self propagating high-temperature synthesis reaction // Journal of the Ceramic Society of Japan. 2014. V. 122, N 1426. P. 496–501.
6. Pan Y., Jing C., Wu Y.P. The structure, mechanical and electronic properties of WSi_2 from first-principles investigations // Vacuum. 2019. V. 167. P. 374–381.
7. Chang H.Q., Zhang G.H. A novel green strategy for the preparation of ultrafine-grained WSi_2 and W_5Si_3 powders // Ceramics International. 2022. V. 48. № 21. P. 31880–31889.
8. Zhang Y., Cui K., Fu T., Wang J., Qie J. Synthesis WSi_2 coating on W substrate by HDS method with various deposition times // Applied Surface Science. 2020. V. 511. P. 145551.
9. Li C., Niu Y.R., Liu T., Zhao J., Zheng X.B., Ding C.X. Oxidation Resistance of ZrB_2 -SiC- WSi_2 Coating Prepared by Vacuum Plasma Spraying // Solid State Phenomena. 2018. P. 281. P. 522–527.
10. Zhai C., Niu Y., Huang L., Pan H., Li H., Zheng X., Sun J. Microstructure characteristics and oxidation behavior of vacuum plasma sprayed tungsten disilicide coating // Ceramics International. 2016. V. 42, N 16. P. 18798–18805.
11. Zhang G., Sun J., Fu Q. Microstructure and oxidation behavior of plasma sprayed WSi_2 -mullite- $MoSi_2$ coating on niobium alloy at 1500 °C // Surface and Coatings Technology. 2020. V. 400. P. 126210.
12. Катинас Э., Янкаускас В., Казак Н., Михайлов В. Повышение абразивной износостойкости стали Hardox 400 электроискровым легированием поверхности // Трение и износ. 2019. Т. 40, № 1. С. 128–135.
13. Антипов М.С., Бажин П.М., Константинов А.С., Чижиков А.П., Жидович А.О., Столин А.М. Структура, механические и трибологические свойства композиционных покрытий на основе Ti–Cr–C–Ni–Fe // Физическая мезомеханика. 2023. Т. 26, № 4. С. 117–128.
14. Pyachin S.A., Burkov A.A. Formation of intermetallic coatings by electrospark deposition of titanium and aluminum on a steel substrate // Surface Engineering and Applied Electrochemistry. 2015. V. 51. P. 118–124.
15. Пячин С.А., Бурков А.А., Власова Н.М., Кириченко Е.А. Влияние добавок оксидов и карбидов металлов на свойства интерметаллидных Ti_3Al электроискровых покрытий // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2016. Т. 13, № 2. С. 168–173.
16. Бурков А.А. Осаждение покрытий из металлического стекла электроискровой обработкой в среде гранул состава $Fe_{39}Ni_8Cr_7W_7Mo_7Co_2C_{16}B_{14}$ // Письма о материалах. 2017. Т. 7, № 3. С. 254–259.
17. Burkov A.A., Kulik M.A. Wear-resistant and anticorrosive coatings based on chrome carbide Cr_7C_3 obtained by electric spark deposition // Protection of Metals and Physical Chemistry of Surfaces. 2020. V. 56. P. 1217–1221.
18. Burkov A.A., Kulik M.A., Krutikova V.O. Electrospark deposition of tungsten carbide powder on titanium alloy Ti6Al4V // Letters on Materials. 2021. V. 11, N 2. P. 175–180.
19. Burkov A.A., Chigrin P. G., Dvornik M. I. Electrospark CuTi coatings on titanium alloy Ti6Al4V: Corrosion and wear properties // Surface and Coatings Technology. 2023. Т. 469. P. 129796.
20. Kwok D.Y., Neumann A.W. Contact angle measurement and contact angle interpretation // Advances in colloid and interface science. 1999. V. 81, N 3. P. 167–249.
21. Кудряшов А.Е., Кирюханцев-Корнеев Ф.В., Муканов С.К., Петржик М.И., Левашов Е.А. Особенности массопереноса, структура и свойства электроискровых покрытий, сформированных на никельсодержащем СЛС сплаве при использовании электродов из циркония // Новые материалы и технологии: Порошковая металлургия, композиционные материалы, защитные покрытия, сварка. 2022. С. 557–560.
22. Бурков А.А., Кулик М.А., Беля А.В., Крутикова В.О. Электроискровое осаждение порошка диборида хрома на нержавеющую сталь AISI 304 // Обработка металлов: технология, оборудование, инструменты. 2022. Т. 24, № 2. С. 78–90.
23. Чумакова Л.С., Бакулин А.В., Кулькова С.Е. Электронная структура и механические свойства Ti_5Si_3 // Журнал экспериментальной и теоретической физики. 2022. Т. 161, № 6. С. 874–886.

24. Gambino J.P., Cunningham B., DeHaven P., Adams E.D. Reaction of Ti with WSi_2 // *Journal of applied physics*. 1997. V. 82, N 12. P. 6073–6077.

25. Бурков А.А., Крутикова В.О., Быцюра А.Ю., Хе В.К. Ti–Cr–Cu электроискровые покрытия на стали Ст3 // *Проблемы черной металлургии и материаловедения*. 2023. № 1. С. 93–104.

26. Прибытков Г.А., Криницын М.Г., Коржова В.В. Синтез и структура СВС композитов Ti_5Si_3+Ti связка // *Химическая физика и мезоскопия*. 2020. Т. 22, № 3. С. 269–280.

27. Li Y.C., Zhang W.W., Wang Y., Zhang X.Y., Sun L.L. Effect of spray powder particle size on the bionic hydrophobic structures and corrosion performance of Fe-based amorphous metallic coatings // *Surface and Coatings Technology*. 2022. V. 437. P. 128377.

28. Crespo-Villegas J., Cavarroc M., Knittel S., Martinu L., Klemberg-Sapieha J.E. Protective Ti_xSi_y coatings for enhanced oxidation resistance of the γ -TiAl alloy at 900 °C // *Surface and Coatings Technology*. 2022. V. 430. P. 127963.

Информация об авторах

А. А. Бурков – кандидат физико-математических наук Хабаровского федерального исследовательского центра ДВО РАН.

М. А. Кулик – младший научный сотрудник Хабаровского федерального исследовательского центра ДВО РАН.

А. Ю. Быцюра – младший научный сотрудник Хабаровского федерального исследовательского центра ДВО РАН.

References

1. Murthy, T. C., Sonber, J. K., Subramanian, C., Hubli, R. C. & Suri, A. K. (2012). Densification, characterization and oxidation studies of TiB_2 - WSi_2 composite. *International Journal of Refractory Metals and Hard Materials*, 33, 10–21.

2. Wang, S., Pan, Y. & Lin, Y. (2018). First-principles study of the effect of Cr and Al on the oxidation resistance of WSi_2 . *Chemical Physics Letters*, 698, 211–217.

3. Kim, H.-S., Yoon, J.-K., Kim, G.-H., Doh, J.-M. & Kwun, S.-I. et al. (2008). Growth behavior and microstructure of oxide scales grown on WSi_2 coating. *Intermetallics*, 16(3), 360–372.

4. Stoetzel, J., Schneider, T., Mueller, M. M., Kleebe, H. J., Wiggers, H., Schierning, G. & Schmechel, R. (2017). Microstructure and ther-

moelectric properties of Si- WSi_2 nanocomposites. *Acta Materialia*, 125, 321–326.

5. Chanadee, T., Wannasin, J. & Niyomwas, S. (2014). Synthesis of WSi_2 and W_2B intermetallic compound by in-situ self propagating high-temperature synthesis reaction. *Journal of the Ceramic Society of Japan*, 122(1426), 496–501.

6. Pan, Y., Jing, C. & Wu, Y. P. (2019). The structure, mechanical and electronic properties of WSi_2 from first-principles investigations. *Vacuum*, 167, 374–381.

7. Chang, H. Q. & Zhang, G. H. (2022). A novel green strategy for the preparation of ultrafine-grained WSi_2 and W_5Si_3 powders. *Ceramics International*, 48(21), 31880–31889.

8. Zhang, Y., Cui, K., Fu, T., Wang, J. & Qie, J. (2020). Synthesis WSi_2 coating on W substrate by HDS method with various deposition times. *Applied Surface Science*, 511, 145551.

9. Li, C., Niu, Y. R., Liu, T., Zhao, J., Zheng, X. B. & Ding, C. X. (2018). Oxidation Resistance of ZrB_2 -SiC- WSi_2 Coating Prepared by Vacuum Plasma Spraying. *Solid State Phenomena*, 281, 522–527.

10. Zhai, C., Niu, Y., Huang, L., Pan, H., Li, H., Zheng, X. & Sun, J. (2016). Microstructure characteristics and oxidation behavior of vacuum plasma sprayed tungsten disilicide coating. *Ceramics International*, 42(16), 18798–18805.

11. Zhang, G., Sun, J. & Fu, Q. (2020). Microstructure and oxidation behavior of plasma sprayed WSi_2 -mullite- $MoSi_2$ coating on niobium alloy at 1500° C. *Surface and Coatings Technology*, 400, 126210.

12. Katinas, E., Jankauskas, V., Kazak, N. & Michailov, V. (2019). Improving abrasive wear resistance for steel Hardox 400 by electro-spark deposition. *Journal of Friction and Wear*, 40, 100–106.

13. Antipov, M. S., Bazhin, P. M., Konstantinov, A. S., Chizhikov, A. P., Zhidovich, A. O. & Stolin, A. M. (2023). Structure, and Mechanical and Tribological Properties of Ti–Cr–C–Ni–Fe Composite Coatings. *Physical Mesomechanics*, 26(6), 691–700.

14. Pyachin, S. A. & Burkov, A. A. (2015). Formation of intermetallic coatings by electrospark deposition of titanium and aluminum on a steel substrate. *Surface Engineering and Applied Electrochemistry*, 51, 118–124.

15. Pyachin, S. A., Burkov, A. A., Vlasova, N. M. & Kirichenko, E. A. (2016). Vliyaniye dobavok

- oksidov i karbidov metallov na svoystva intermetallidnykh Ti_3Al elektroiskrovykh pokrytiy. *Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedeniya (Basic Problems of Material Science (BPMS))*, 13(2), 168–173. (In Russ.).
16. Burkov, A. A. (2017). Deposition of metallic glass coatings by electrospark processing in the medium of granules of Fe₃₉Ni₈Cr₇W₇Mo₇Co₂C₁₆B₁₄ composition. *Letters on materials*, 7(3), 254–259. (In Russ.).
17. Burkov, A. A. & Kulik, M. A. (2020). Wear-resistant and anticorrosive coatings based on chrome carbide Cr₇C₃ obtained by electric spark deposition. *Protection of Metals and Physical Chemistry of Surfaces*, 56, 1217–1221.
18. Burkov, A. A., Kulik, M. A. & Krutikova, V. O. (2021). Electrospark deposition of tungsten carbide powder on titanium alloy Ti6Al4V. *Letters on Materials*, 11(2), 175–180. (In Russ.).
19. Burkov, A. A., Chigrin, P. G., Dvornik, M. I. (2023). Electrospark CuTi coatings on titanium alloy Ti6Al4V: Corrosion and wear properties. *Surface and Coatings Technology*, 469, 129796.
20. Kwok, D. Y. & Neumann, A. W. (1999). Contact angle measurement and contact angle interpretation. *Advances in colloid and interface science*, 81(3), 167–249.
21. Kudryashov, A. E., Kiryukhantsev-Korneyev, F. V., Mukanov, S. K., Petrzhih, M. I. & Levashov, E. A. (2022). Osobennosti massoprenosa, struktura i svoystva elektroiskrovykh pokrytiy, sformirovannykh na nikel'soderzhashchem SLS splave pri ispol'zovanii elektrodov iz tsirkoniya. *Novyye materialy i tekhnologii: Poroshkovaya metallurgiya, kompozitsionnyye materialy, zashchitnyye pokrytiya, svarka*, 557–560. (In Russ.).
22. Burkov, A. A., Kulik, M. A., Belya, A. V. & Krutikova, V. O. (2022). Electrospark deposition of chromium diboride powder on stainless steel AISI 304. *Obrabotka metallov (tekhnologiya, oborudovanie, instrumenty)*, 24(2), 78–90. (In Russ.).
23. Chumakova, L. S., Bakulin, A.V. & Kul'kova, S. E. (2022). Elektronnaya struktura i mekhanicheskiye svoystva Ti₅Si₃. *Zhurnal eksperimental'noy i teoreticheskoy fiziki*, 161(6), 874–886. (In Russ.).
24. Gambino, J. P., Cunningham, B., DeHaven, P. & Adams, E. D. (1997). Reaction of Ti with WSi₂. *Journal of applied physics*, 82(12), 6073–6077.
25. Burkov, A. A., Krutikova, V. O., Bytsura, A. Yu. & Khe, V. K. (2023). Ti–Cr–Cu electrospark coatings on steel St3. *Problemy chernoy metallurgii i materialovedeniya*, (1), 93–104.
26. Pribytkov, G. A., Krinitsyn, M. G. & Korzhova, V. V. (2020). Sintez i struktura SVS kompozitov Ti₅Si₃+Ti svyazka. *Khimicheskaya fizika i mezoskopiya*, 22(3), 269–280. (In Russ.).
27. Li, Y. C., Zhang, W. W., Wang, Y., Zhang, X. Y. & Sun, L. L. (2022). Effect of spray powder particle size on the bionic hydrophobic structures and corrosion performance of Fe-based amorphous metallic coatings. *Surface and Coatings Technology*, 437, 128377.
28. Crespo-Villegas, J., Cavarroc, M., Knittel, S., Martinu, L. & Klemberg-Sapieha, J. E. (2022). Protective Ti_xSi_y coatings for enhanced oxidation resistance of the γ -TiAl alloy at 900 °C. *Surface and Coatings Technology*, 430, 127963.

Information about the authors

A. A. Burkov – Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Senior Staff Scientist, Khabarovsk Federal Research Center FEB RAS.

M. A. Kulik – Junior Researcher, Khabarovsk Federal Research Center FEB RAS.

A. Yu. Bytsura – Junior Researcher, Khabarovsk Federal Research Center FEB RAS.

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.
The authors declare that there is no conflict of interest.

Статья поступила в редакцию 04.04.2024; одобрена после рецензирования 29.04.2024; принята к публикации 02.05.2024.

The article was received by the editorial board on 04 Apr. 24; approved after reviewing 29 Apr. 24; accepted for publication 02 May 24.

Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2024. Т. 21. № 2. С. 230–238
Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedeniya (Basic Problems of Material Science (BPMS)). 2024; 2(21): 230–238

Научная статья

2.6.1. Металловедение и термическая обработка металлов и сплавов (технические науки)

УДК 537.32

doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2024.02.011

ИССЛЕДОВАНИЕ ГИДРИРОВАННОГО СПЛАВА Ti-6Al-4V, ПОДВЕРГНУТОГО МЕХАНИЧЕСКОМУ ВОЗДЕЙСТВИЮ И ОБЛУЧЕНИЮ ЭЛЕКТРОНАМИ

Виталий Васильевич Ларионов^{1†}, Екатерина Николаевна Степанова²,
Юрий Иванович Тюрин³

^{1, 2, 3} Национальный исследовательский Томский политехнический университет, Инженерная школа ядерных технологий, пр. Ленина, 30, 634050, Томск, Россия

¹lvv@tpu.ru[†], <https://orcid.org/0000-0001-6196-2236>

²enstepanova@tpu.ru, <https://orcid.org/0000-0002-4196-3191>

³tyurin@tpu.ru, <https://orcid.org/0000-0001-5778-2523>

Аннотация. Исследованы свойства сплава Ti-6Al-4V гидрированного (содержание водорода 0,002 масс. % и 0,23 масс. %), подвергнутому механическому разрыву (от 25 до 450 МПа), и облучению импульсной электронно-пучковой обработке потоком электронов с энергией 18 кэВ до 25 Дж/см² и длительностью 15 мкс. В частности измерены термоэдс сплава при указанных воздействиях. Отмечена роль отдельных компонент алюминия и ванадия относительно изменения термоэлектрических свойств сплава. Представляют интерес не только стабилизация фаз, но и трансформация изучаемого сплава в слоистую среду, благодаря гидрированию и закреплению водорода в ловушках. Изменение коэффициента Зеебека S сплава Ti-6Al-4V для различных условий варьируется в интервале (от 0,003 до + 0,0011) мВ/К и сопровождается инверсией знака термоэдс, в частности для технического ванадия. Проведено сравнение значений термоэдс сплава Ti-6Al-4V со значениями термоэдс технического титана VT1-0 по изменению плотности состояний на уровне Ферми. Предполагается, что такого рода сплав может быть пригоден в силу стабильности и прочностных свойств для применения в системах контроля свойств имплантатов и нетрадиционной энергетики.

Ключевые слова: Ti, Al, V, коэффициенты Зеебека, импульсные электроны, водород, термоэдс.

Благодарности: Работа выполнена при поддержке Программы «Приоритет 2030 ТПУ» с использованием средств коллективного пользования ТПУ.

Для цитирования: Ларионов В.В., Степанова Е.Н., Тюрин Ю.И. Исследование гидрированного сплава Ti-6Al-4V, подвергнутого механическому воздействию и облучению электронами // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. 2024. Т. 21, № 2. С. 230–238. doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2024.02.011.

Original article

STUDY OF HYDROGENATED Ti-6Al-4V ALLOY SUBJECT TO MECHANICAL IMPACT AND ELECTRON IRRADIATION

Vitaliy V. Larionov^{1†}, Ekaterina N. Stepanova², Yuriy I. Tyurin³

^{1, 2, 3} National Research Tomsk Polytechnic University, Institute of Physics and Technology, Lenin Av., 30, Tomsk, 634050, Russia

¹lvv@tpu.ru[†], <https://orcid.org/0000-0001-6196-2236>

²enstepanova@tpu.ru, <https://orcid.org/0000-0002-4196-3191>

³tyurin@tpu.ru, <https://orcid.org/0000-0001-5778-2523>

Abstract. The properties of hydrogenated Ti-6Al-4V alloy (hydrogen content 0.002 wt. % and 0.23 wt. %), subjected to mechanical rupture (from 25 to 450 MPa), and irradiation by pulsed electron beam treatment with an electron flow with an energy of 18 keV up to 25 J/cm² and duration 15 μs. In particular, the thermopower of the alloy was measured under the indicated influences. The role of individual components of aluminum and vanadium in relation to changes in the thermoelectric properties of the alloy is noted. Of interest is not only the stabilization of

phases, but also the transformation of the alloy under study into a layered medium due to hydrogenation and fixation of hydrogen in traps. The change in the Seebeck coefficient S of the Ti-6Al-4V alloy for different conditions varies in the range (from 0.003 to 0.0011) mV/K and is accompanied by an inversion of the thermopower sign, in particular for commercial vanadium. The values of the thermopower of the Ti-6Al-4V alloy were compared with the values of the thermopower of technical titanium VT1-0 based on the change in the density of states at the Fermi level. It is assumed that this kind of alloy may be suitable, due to its stability and strength properties, for use in systems for monitoring the properties of implants and non-traditional energy.

Keywords: Ti, Al, V, Seebeck coefficients, pulsed electrons, hydrogen, thermopower.

Acknowledgements: The work was carried out with the support of the «Priority 2030 TPU» Program using TPU collective use facilities.

For citation: Larionov, V. V., Stepanova, E. N. & Tyurin, Yu. I. (2024). Study of hydrogenated Ti-6Al-4V alloy subjected to mechanical stress and electron irradiation. *Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedeniya (Basic Problems of Material Science (BPMS))*, 21(2), 230–238. (In Russ.). doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2024.02.011.

Введение

В предыдущих работах авторов описано выделение водорода из различных металлов под действием электронного и нейтронного излучения. В настоящей работе исследован предварительно гидрированный перед механическим воздействием и облучением электронами сплав Ti-6Al-4V. Данный сплав широко применяется в качестве имплантаты в системе аддитивных технологий, в аэрокосмической промышленности и химической индустрии, при производстве газовых турбин, оружия, в бытовой электронной технике [1, 2]. Алюминий в сплаве стабилизирует α -фазу титана, а ванадий стабилизирует β -фазу. Гидрирование титана, как элемента водородных технологий, зависит от многочисленных факторов, в частности от фазового состояния. Атомы водорода легче диффундируют в решетке β -Ti, чем в решетке α -Ti. В межфазном состоянии $\alpha+\beta$ атомы водорода, занимающие тетраэдрическую пустоту β -фазы, будут доминировать в процессе диффузии. Для нестехиометрического дигидрида δ -TiH_{2-x} с гранцентрированной кубической (ГЦК) подрешеткой Ti энергии активации диффузии водорода лежат в интервале 0,46-0,53 эВ [1-3]. Для H в α -фазе титана коэффициент диффузии при 313 K $D = 2 \cdot 10^{-10}$ см²/с, в β -фазе титана при 303 K $D = 2 \cdot 10^{-9}$ см²/с [1-3]. Например, насыщение водородом в его α -состоянии невозможно. В то время как в β -Ti существуют тетраэдрические поры по размеру близкие к атомарному радиусу водорода. Поэтому β -Ti хорошо наводороживается в этой фазе. Интерес представляет не столько изменение термоэлектрических свойств при стабилизации

фаз, но и трансформация сплава в слоистую среду для возможного применения в новейших системах двумерных материалов. Под слоистостью понимается концентрационные слои водорода в сплаве, вызванные наличием ловушек водорода. Встраивание в различные конструкции, например датчиков нагрузки, чтобы отслеживать состояние конструкционных материалов, вызывает повышенные требования к механической прочности датчиков. Предполагается, что ключом ко многим технологиям служит слоистая среда, когда основой изделий служат двумерные материалы и, соответственно, их термоэлектрические свойства. При наличии таких данных их можно использовать для покраски объектов различного назначения, изготавливать датчики для контроля трещин, наружных дефектов и т.д. [2, 4, 5]. Плёнки из них для поглощения радиоволн могут питать электронные устройства. Интересны однофазные или композиционные материалы, когда состав или микроструктура изменяются равномерно или практически скачкообразно, что обеспечивает изменение локальных свойств материалов [2, 4-6], включая термоэлектрические свойства.

Известно, что в ряде случаев гидрирование приводит к возникновению слоистости среды [1, 7]. Водород в материале существенно влияет на фазовый состав и тип дефектов [8, 9], т.к. вызывает образование дефектов в материалах и активно взаимодействует с имеющимися дефектами структуры [8-10]. Широкое применение обсуждаемых материалов ставит проблему повышения динамической прочности, уменьшения износа, увеличение коррозионной стойкости [8, 9]. Решением данной проблемы является применение имплантации поверхности ио-

нами, облучение электронами и другими заряженными частицами [11-13]. Эффективность данного способа зависит, в свою очередь, от многочисленных факторов, таких как образование дефектов в поверхностном слое, дополнительных напряжений, образованию нежелательных примесей, изменению фазового состава, и в нашем случае изменению термоэлектрических свойств материала. В поверхностном слое при облучении происходит изменение фазового состава из-за высокой температуры. Плотность дефектов повышается, что в свою очередь создаёт нестабильность свойств изделий, вызванная высокой температурой. Модифицированный поверхностный слой и внедренный водород могут влиять на эксплуатационные свойства изделий при деформации, и к искажению их термоэлектрических свойств.

Цель настоящей работы – исследование термоэлектрических свойств гидрированного сплава Ti-6Al-4V, подвергнутого механическому воздействию и облучению электронами.

Образцы и методы исследования

Эксперименты проводились на двухфазном ($\alpha+\beta$) титановом сплаве Ti-6Al-4V с содержанием Al – 5,9 мас.% и V – 3,9 мас.%. Водород в исходном сплаве Ti-6Al-4V содержался в количестве около 0,002 мас.%. Для сравнения были изготовлены образцы технического титана VT1-0 с различными концентрациями водорода. Концентрация водорода была измерена газоанализатором RHEN 602 с точностью 0,0001%. Образцы вырезались из заготовок электроискровым методом. Поверхности образцов были отшлифованы и электролитически полированы. В исследовании применены образцы сплава Ti-6Al-4V в виде пластин ($5 \times 1,5 \times 1$) мм³, ванадий электролитический марки ВЭЛ-1 (ТУ48-05-33-71), чистотой 99,9, технический алюминий марки АД(123). Для сравнения были изготовлены образцы технического титана VT1-0 с последующим гидрированием до различных концентраций водорода. Окисленный ванадий получали нагревом в камере в среде очищенного кислорода при температуре 900 °С. Слоистость по водороду достигалась гидрированием при различных концентрациях в сплаве. Для облучения образцов использовали импульсный ускоритель электронов СОЛО СО РАН (Россия, Томск) [11]. Камера облучения содержала аргон при давлении 0,02 Па. Плотность энергии потока электронов выбрана в диапазоне около 5 и 12 Дж/см². Данные значения подбирались

экспериментально так, чтобы не происходило оплавление поверхности (~ 5 Дж/см²) и с оплавлением (~ 12 Дж/см²), когда наблюдается высокоскоростная кристаллизация поверхности образца. Длительность импульсов облучения равнялась 50 мкс, частота равна $0,3$ с⁻¹. Один акт облучения содержал три импульса. При энергии электронов 18 кэВ и плотности тока до 50 А/см² мощность облучения составляла $6 \cdot 10^4$ Вт/см². Часть образцов до облучения подвергалась гидрированию до концентрации $0,23 \pm 0,01$ мас.%. Образцы гидрировали при температуре 773 К и давлении водорода 1 атм. методом Сивертса на установке Gas Reaction Controller (Advanced Materials Corporation, (LECO, США)). Фазовый состав сплавов определяли методом рентгеноструктурного анализа на дифрактометре Shimadzu XRD-7000 в излучении Cu-K α . Расчет объемных долей фаз и параметры решеток проводили с использованием, приложенного к дифрактометру стандартного комплекса программ PowderCell. Образцы до и после облучения исследовали на просвечивающем электронном (JEM-2100) и оптическом (AXIOVERT 200MAT) микроскопах. Испытания на растяжение проводились на модернизированной испытательной установке ПВ-3012М в вакууме при остаточном давлении 10^{-2} Па с использованием плоских гантельных образцов с измерительными секциями $5 \times 1,5 \times 1$ мм. Максимальное усилие на разрыв образцов составляло 450 МПа. Для измерения термоэдс использовалась модифицированная по стабилизации температуры установка ПККЭМ (Россия) с электродом из золота. Для калибровки электрода выбраны термоэдс Cu (1,8 мкВ/К), Pt (-5,3 мкВ/К) относительно Ag (термоэдс 1,5 мкВ/К) [7] с точностью измерений около 5% для всех сплавов.

Содержание водорода в сплаве Ti-6Al-4V до облучения составляет $\sim 0,002$ мас.%. Из рис.1а следует, что сплав имеет поликристаллическую структуру. Зёрна α -Ti перемешаны прослойками β -Ti. Величина β -фазы в сплаве достигает 6 об.% и варьируется в зависимости от содержания водорода. Размер зерен в α -фазе составляет около 14 мкм, а величина прослоек изменяется в пределах 1,5-3,5 мкм. При этом средний размер зерен α -фазы сплава Ti-6Al-4V при его гидрировании не изменяется вплоть до концентрации 0,23 мас.%. Процесс гидрирования ведёт к увеличению объемной доли β -фазы и составляет (14 ± 2) об.%. Рентгеност-

руктурный анализ показывает, что параметр решетки β -фазы увеличивается от 0,3224 до 0,3300 нм, то есть количество α -фазы в прослойках β -фазы уменьшается. Соответственно уменьшается содержание ванадия в объеме β -фазы [13]. Как правило, в процессе гидрирования в объеме образца диффузия водорода сопровождается фазовыми превращениями, возникновением ловушек. Состав гидроксида соответствует фазе с меньшим содержанием водо-

рода, т.е. имеет место фазовый переход. Высвобождение уже небольшого количества водорода должно приводить к изменению величины термоэдс, так как в процессе гидрирования сплава Ti-6Al-4V возможны превращения, которые характеризуются наличием $(\alpha+\delta+\beta)$ областей. При малом содержании водорода в присутствии ванадия при соотношении водород/металл 1,06 δ -фаза не наблюдается.

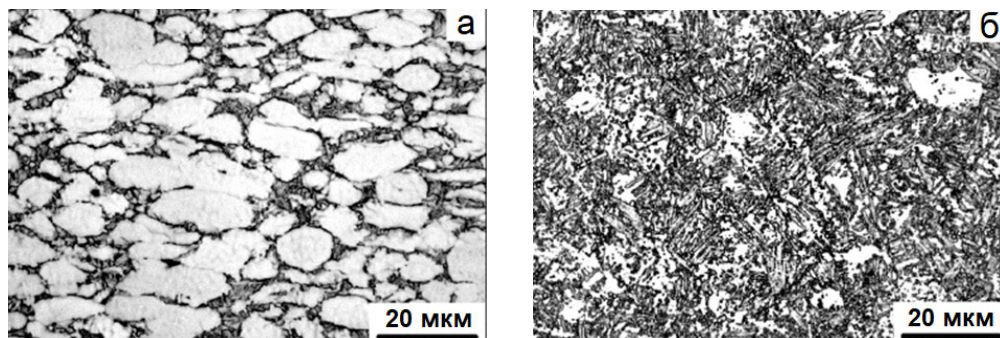


Рис.1. Структура сплава Ti-6Al-4V до облучения (а) и после (б) облучения электронным пучком с энергией 12 Дж/см² в режиме поверхностного плавления [13]

Fig.1. Structure of the Ti-6Al-4V alloy before irradiation (a) and after (b) irradiation with an electron beam with an energy of 12 J/cm² in the surface melting mode [13]

Теоретический анализ

Значения термоэдс теоретически обоснованы в работах [15-17], где получены формулы:

$$E_S = \frac{k_B}{e} \xi k_B (T_0 T)^{1/2} \frac{\partial(\ln g(E_F))}{\partial E}, \quad (1)$$

где $g(E_F)$ – плотность состояний на уровне Ферми, $\xi = 0,1$ – численный коэффициент. Известна также зависимость $E(T)$ в форме закона $E \approx T^{1/2}$ [15]. Для термоэдс в прыжковой области, что характерно для слоистой среды исследуемой в данной работе, может быть характерной линейная асимптотика $E \sim T$ (3)

$$E_S = \frac{\pi^2 k_B}{3e} k_B T \frac{\partial(\ln \sigma(E_F))}{\partial E}, \quad (2)$$

где $\sigma(E_F)$ – проводимость на уровне Ферми.

Зависимость термоэдс от $T^{1/2}$ и T получена в работе [15]. Эта формула не имеет теоретического обоснования в области прыжковой проводимости, характерной для слоистой среды, с переменной длиной прыжка носителя [13, 15]. Часто подчёркивается, что имеется отклонение от формулы (1), при котором в области действия закона Мотта термоэдс не зависит от тем-

пературы $E_S(T) \sim \text{const}$. Такое поведение может являться следствием специальной формы плотности состояний в окрестности уровня Ферми [13]. В наших исследованиях наблюдается резко неоднородная зависимость термоэдс от T , причём в ряде случаев со сменой знака.

В области действия закона Мотта для прыжковой проводимости с переменной длиной прыжка [16-17] характерной для слоистой среды проводимость меняется по закону $\sigma_h = \sigma_{ho} \exp[-(T_0 / T)^{1/4}]$, ($T_0 = 17,6 / g(E_F) a^3 k_B$, a – плотность состояний и радиус локализации на уровне Ферми).

Предполагаем, что термоэдс описывается формулой Звягина (1). Данное утверждение подтверждается расчетами (точки на кривой 6 рис.3 и кривых 2, 3 рис.4)). Расчёт коэффициентов Зеебека проведён по стандартной методике по формуле $S = \Delta E / \Delta t$. Диапазон изменений для различных условий составляет, как видно из рисунков 2-6 от (0,003 до 0,0011) мВ/К.

Обсуждение результатов экспериментов

Основные результаты измерений представлены на рис.2-6. Как следует из рис.2, стабили-

зация фаз и гидрирование сплава Ti-6Al-4V (кривая 1) приводит к увеличению в максимуме более чем в 2 раза значений термоэдс по отношению к техническому титану (кривая 3) и алюминию (кривая 4), а также негидрированному сплаву Ti-6Al-4V (кривая 2).

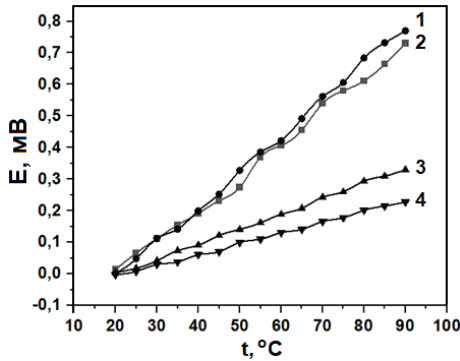


Рис.2. Зависимость термоэдс от температуры: 1 – Ti-6Al-4V ($C_H = 0,23$ масс. %); 2 – Ti-6Al-4V ($C_H = 0$); 3 – VT1-0 ($C_H = 0$); 4 – технический алюминий Al AD1(123) $C_H = 0$

Fig.2. Dependence of thermopower on temperature: 1 – Ti-6Al-4V ($C_H = 0.23$ wt. %); 2 – Ti-6Al-4V ($C_H = 0$); 3 – VT1-0 ($C_H = 0$); 4 – technical aluminum Al AD1(123) $C_H = 0$

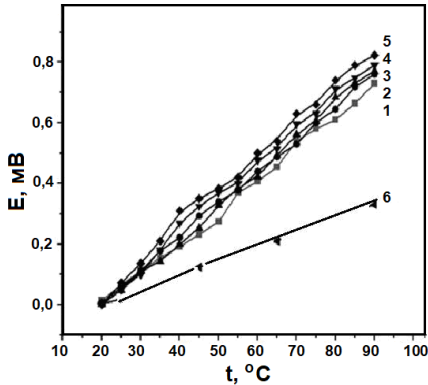


Рис.3. Зависимость термоэдс гидрированного сплава Ti-6Al-4V от температуры: 1 – $C_H = 0$; 2 – $C_H = 0,085$ масс. %; 3 – $C_H = 0,23$ масс. %; 4 – $C_H = 0$ (облучение 5 Дж/см²); 5 – $C_H = 0,085$ масс. % (облучение 25 Дж/см²); 6 – титан VT1-0 ($C_H = 0$)

Fig.3. Dependence of thermopower of hydrogenated Ti-6Al-4V alloy on temperature: 1 – $C_H = 0$; 2 – $C_H = 0.085$ wt. %; 3 – $C_H = 0.23$ wt. %; 4 – $C_H = 0$ (irradiation 5 J/cm²); 5 – $C_H = 0.085$ wt. % (irradiation 25 J/cm²); 6 – titanium VT1-0 ($C_H = 0$)

Воздействие электронным пучком приводит к незначительному увеличению термоэдс в пределах 10-14 %. При этом сохраняется линейная зависимость в пределах погрешности

эксперимента (формулы 2 и 3). Это влияние гидрирования можно объяснить упрочнением β -фазы и диффузией водорода. Возможно перераспределение водорода в образце под действием полей упругих напряжений [18]. В напряженных областях происходит скопление водорода в результате локализации деформации [19]. Это подтверждается увеличением концентрации водорода в необлученном образце сплава Ti-6Al-4V (от 0,23 масс. % H до 0,28 масс. % H) в условиях нагрузки до 450 МПа. В месте разрушения концентрация водорода увеличивается до 0,27 масс. %. То есть в объеме гидрированных сплавов появляются вакансии и водородно-вакансионные комплексы [9, 20]. Это оказывает влияние отдельных компонент сплава при гидрировании на поведение термоэдс в гидрированном сплаве Ti-6Al-4V. С этой целью проведены измерения (рис.4) величины термоэдс отдельных металлов, входящих в состав сплава.

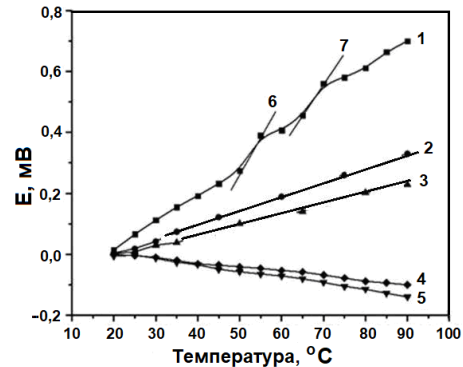


Рис.4. Зависимость термоэдс от температуры: 1 – Ti-6Al-4V; 2 – VT1-0; 3 – алюминий АД1-123; 4 – ванадий окисленный; 5 – ванадий металлический; 6 – область изменения термоэдс при температуре $t = 55-60$ °C; 7 – соответственно при температуре $t = 60-65$ °C

Fig.4. Dependence of thermopower on temperature: 1 – Ti-6Al-4V; 2 – VT1-0; 3 – aluminum AD1-123; 4 – oxidized vanadium; 5 – metallic vanadium; 6 – region of change of thermopower at temperature $t = 55-60$ °C; 7 – respectively at temperature $t = 60-65$ °C

На рис.4 можно выделить две области изменения текущих значений термоэдс от температуры. Согласно литературным данным при данных температурах, по-видимому, наблюдается заметное влияние ванадия на величины термоэдс [21]. В области температур 56-60 °C и 60-65 °C имеется повышение значений коэффициента Зеебека S (выделено прямыми ли-

ниями 6 и 7). В образцах собственно ванадия наблюдается инверсия знака термоэдс на противоположный знак (там же, кривые 4-5, рис.4). Известно, что в монокристаллах двуокиси ванадия при температуре $t = 67^\circ\text{C}$ (340 K) наблюдается фазовый переход диэлектрик-металл. Выше этой температуры материал обладает металлической проводимостью [21]. В работе [22] отмечается способность материала на основе ванадия к поглощению водорода. Как отмечено, «увеличивается концентрация электронов в разрешенной энергетической зоне VO_2 ». Это увеличение происходит за счет ионизации атомов водорода в металлической фазе.

На рис.5 даны зависимости отношения термоэдс E/E_0 от обратной температуры гидрированного для различных концентраций водорода сплава Ti-6Al-4V к элементам входящим в состав сплава. При температурах в диапазоне $55\text{-}60^\circ\text{C}$ возможно повышается концентрация свободных электронов в зоне проводимости (см. зависимость термоэдс для металлического и окисленного ванадия). Коэффициент Зеебека в области влияния ванадия превышает среднее значение термоэдс сплава в 5-6 раз (рис.4). Это можно использовать для изучения переноса зарядов и управлять процессом миграции водорода в условиях слоистости среды [23, 24].

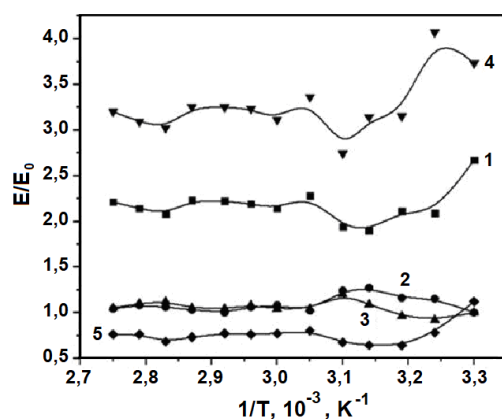


Рис.5. Зависимость отношения термоэдс E/E_0 от обратной температуры гидрированного для различных концентраций водорода сплава Ti-6Al-4V к элементам входящим в состав сплава: 1 – $C_H = 0\%$; 2 – $C_H = 0,085$ масс. %; 3 – $C_H = 0,023$ масс. %; 4 – Al (AD); 5 – V (сигнал увеличен в 10 раз)

Fig.5. Dependence of the thermopower ratio E/E_0 on the inverse temperature of the Ti-6Al-4V alloy hydrogenated for different hydrogen concentrations to the elements included in the alloy: 1 – $C_H = 0\%$; 2 – $C_H = 0.085$ wt. %; 3 – $C_H = 0.023$ wt. %; 4 – Al (AD); 5 – V (signal increased 10 times)

На рис.6 дано отношение значений термоэдс E гидрированного титана к не гидрированному E_0 . Данная величина показывает изменение плотности состояний на уровне Ферми (формула (1)) при гидрировании. Как видно из рис.6, при температурах $80\text{-}90^\circ\text{C}$ гидрирование практически не влияет на изменение E/E_0 . Влияние водорода заметно ощутимее при значениях температуры 25°C (кривая 1 и $45\text{-}60^\circ\text{C}$ (кривые 5-7)). Наибольшее изменение величины E/E_0 наблюдается при низких концентрациях водорода и равно 1,5.

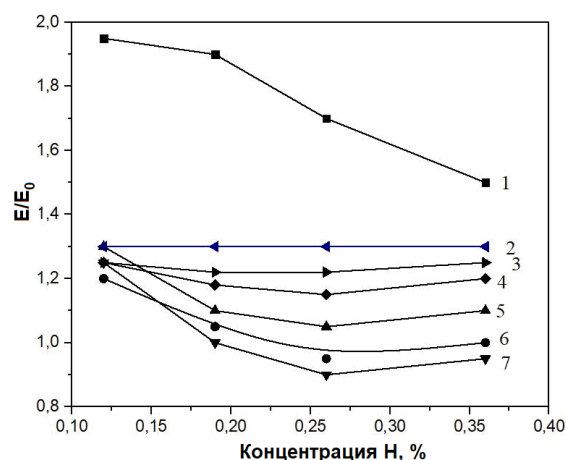


Рис.6. Зависимость E/E_0 отношения термоэдс сплава Ti-6Al-4V к термоэдс технического титана от концентрации водорода при различных температурах в градусах по Цельсию: 1 – 25°C ; 2 – 85°C ; 3 – 90°C ; 4 – 65°C ; 5 – 35°C ; 6 – 45°C ; 7 – 60°C

Fig.6. Dependence of E/E_0 ratio of thermopower of Ti-6Al-4V alloy to thermopower of technical titanium on hydrogen concentration at different temperatures in degrees Celsius: 1 – 25°C ; 2 – 85°C ; 3 – 90°C ; 4 – 65°C ; 5 – 35°C ; 6 – 45°C ; 7 – 60°C

Из рис.6 следует, что существует инверсия (кривая 1 и кривые 2-7) исследуемой зависимости в области температур $55\text{-}60$ и $65\text{-}70^\circ\text{C}$. Возможно также некоторое влияние слоистости структуры материала, вызванной содержанием водорода различной концентрации и закрепленному водороду в ловушках [7, 24]. Термоэдс во всех случаях невелика из-за того, что средняя энергия электронов в потоке мало отличается от энергии Ферми. Основным фактором различного поведения термоэдс от температуры в исследованных условиях, по-видимому, являются индивидуальные особенности поверхности Ферми для каждого металла, который входит в состав сплава и возможного изменения уровня энергии при гидрировании.

Выводы

Посредством испытаний на разрыв, гидрирования и облучения импульсным пучком электронов (вплоть до оплавления поверхности) исследовано влияние данных процессов на термоэлектрические свойства сплава Ti-6Al-4V. Определены значения термоэдс отдельных компонент сплава и в целом термоэдс сплава. Деформация образцов изменяет концентрацию водорода в месте разрыва с 0,23 до 0,27 масс. %, а термоэдс изменяется не более чем на 5 %. Наличие ванадия и алюминия в составе сплава не меняет знак величины термоэдс сплава на противоположный, хотя проводимость Al и V как отдельных элементов изменяется по знаку носителей заряда (т.е. наблюдается инверсия знака термоэдс). Коэффициент Зеебека в области температур 55–60 °С (возможное влияние ванадия) превышает среднее значение термоэдс сплава в 5–6 раз. Слоистость, в ряде случаев, возникающая при гидрировании, и протекание диффузионных процессов, приводит к преобразованию метастабильной структуры в равновесную. Для определения технологических параметров обработки сплава Ti-6Al-4V (температура, деформация, гидрирование) возможно определение стабильности его гетерофазных структур по изменению величины термоэдс. Термоэлектрические методы анализа дополняют и широко применяются как в целях контроля материалов, так и применения изученных сплавов в технологических целях, например, в зелёной энергетике. Результаты также могут быть полезны в системах анализа свойств имплантатов.

Список литературы

1. Ильин А.А., Колачев Б.А., Носов В.К., Мамонов А.М. Водородная технология титановых сплавов. М.: МИСиС, 2002. 389 с.
2. El-Galy I.M., Saleh B.I., Ahmed M.H. Functionally graded materials classifications and development trends from industrial point of view // *SN Appl. Sci.* 2019. V. 1. 1378.
3. Bhattacharyya A., Maurice D. Residual stresses in functionally graded thermal barrier coatings // *Mechanics of Materials*. 2019. V. 129. P. 50–56.
4. Суфияров В.Ш., Орлов А.В., Борисов Е.В. и др. Конечно-элементное моделирование одноосного растяжения образцов из функционально-градиентного материала с использованием мультилинейной модели пластичности // *ЖТФ*. 2021. Т. 91, № 1. С. 26–31.
5. Metalnikov P., Eliezer D., Ben-Hamu G. Hydrogen trapping in additive manufactured Ti-6Al-4V alloy // *Materials Science and Engineering*. 2021. V. 811. P. 141050.
6. Silverstein R., Eliezer D. Hydrogen trapping in 3D-printed (additive manufactured) Ti-6Al-4V // *Materials Characterization*. 2018. V. 144. P. 297–304.
7. Сүй Ш., Ларионов В.В., Кудияров В.Н., Лидер А.М. Характеристика миграции водорода в титановом сплаве BT1-0 с помощью методов неразрушающего контроля: термо-ЭДС и вихревых токов // *Металлы*. 2020. № 6. С. 41–47.
8. Fukai Y. *The Metal-Hydrogen System*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2006. 500 p.
9. Laptev R.S., Lider A.M., Bordulev Yu.S. et al. Hydrogenation-induced microstructure changes in titanium // *J. Alloys Compd.* 2015. V. 645, N 5. P. 193–195.
10. Liu Y.L., Wang H.L., Hou W.T. et al. Microstructure, defects and mechanical behavior of beta-type titanium porous structures manufactured by electron beam melting and selective laser melting // *Acta mater.* 2016. V. 113, N 7. P. 56–67.
11. Коваль Н.Н., Иванов Ю.Ф. Наноструктурирование поверхности металло-керамических и керамических материалов при импульсной электронно-пучковой обработке // *Известия вузов. Физика*. 2008. Т. 51, № 5. С. 60–70.
12. Баранов Ю.В., Троицкий О.А., Авраамов Ю.С., Шляпин А.Д. Физические основы электроимпульсной и электропластической обработки и новые материалы. М: МГИУ, 2001. 844 с.
13. Грабовецкая Г.П., Степанова Е.Н., Мишин И.П., Забудченко О.В. Влияние облучения импульсным электронным пучком на ползуемость титанового сплава системы Ti-6Al-4V-H // *Известия вузов. Физика*. 2022. Т. 63, № 6. С. 30–36.
14. Boyangin E.N., Perevalova O.B., Panin A.V., Martynov S.A. The Effect of Electron Beam Welding on the Microstructure and Microhardness of 3D-Printed Products from Titanium Alloy Ti-6Al-4V // *Physics of Metals and Metallography*. 2021. V. 122, N 2. P. 141–147.
15. Звягин И.П. Кинетические явления в неупорядоченных полупроводниках. М.: МГУ, 1984. 325 с.
16. Демишев С.И., Кондрин М.В., Пирнин А.А. и др. Термоэдс в области прыжковой проводимости: переход от формулы Мотта к формуле Звягина // *Письма в ЖЭТФ*. 1998. V. 68, № 11. С. 801–806.

17. Mott N.F., Davis E.A. Electronic processes in non-crystalline materials. Oxford University Press; 2nd ed., 2012. 590 p.
18. Yuan B., Du J., Zhang X., Chen Q. et al. Microstructures and room-temperature compressive properties of Ti6Al4V alloy processed by continuous multistep hydrogenation treatment // *Int. J. Hydrogen Energy*. 2020. V. 45, Is. 46. P. 25567–25579.
19. Колачев Б.А. Водородная хрупкость металлов. М.: Металлургия, 1985. 216 с.
20. An X., Zhang H., Zhu T. et al. Exploration of vacancy defect formation and evolution in low-energy ion implanted pure titanium // *Int. J. Hydrogen Energy*. 2022. V. 47, N 13. 8467.
21. Бугаев А.А., Захарченя Б.П., Чудновский Ф.А. Фазовый переход металл-полупроводник и его применение. Л.: Наука, 1979. 183 с.
22. Андреев В.Н., Климов В.А. Электропроводимость полупроводниковой фазы в монокристаллах диоксида ванадия // *ФТТ*. 2007. Т. 49, № 12. С. 2146–2150.
23. Yastrebinsky R.N., Pavlenko V.I., Karnauhov A.A., Cherkashina N.I., Yastrebinskaya A.V., Gorodov A.I. Radiation Resistance of a Structural Material Based on Modified Titanium Hydride // *Science and Technology of Nuclear Installations*. 2021. V. 2021. 6658431.
4. Sufiyarov, V. Sh., Orlov, A. V. & Borisov, E. V. i dr. (2021). Konechno-elementnoye modelirovaniye odnoosnogo rastyazheniya obraztsov iz funktsional'no-gradiyentnogo materiala s ispol'zovaniyem mul'tilineynoy modeli plastichnosti. *ZHTF*, 91(1), 26–31. (In Russ.).
5. Metalnikov, P., Eliezer, D. & Ben-Hamu, G. (2021). Hydrogen trapping in additive manufactured Ti-6Al-4V alloy. *Materials Science and Engineering*, 811, 141050.
6. Silverstein, R. & Eliezer, D. (2018). Hydrogen trapping in 3D-printed (additive manufactured) Ti-6Al-4V. *Materials Characterization*, 144, 297–304.
7. Syuy, Sh., Larionov, V. V., Kudiyarov, V. N. & Lider, A. M. (2020). Kharakteristika migratsii vodoroda v titanovom splave VT1-0 s pomoshch'yu metodov nerazrushayushchego kontrolya: termoEDS i vikhrevykh tokov. *Metally*, (6), 41–47. (In Russ.).
8. Fukai, Y. (2006). *The Metal-Hydrogen System*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, P. 500.
9. Laptev, R. S., Lider, A. M. & Bordulev, Yu. S. et al. (2015). Hydrogenation-induced microstructure changes in titanium. *J. Alloys Compd.*, 645(5), 193–195.
10. Liu, Y. L., Wang, H. L. & Hou, W. T. et al. (2016). Microstructure, defects and mechanical behavior of beta-type titanium porous structures manufactured by electron beam melting and selective laser melting. *Acta mater.*, 113(7), 56–67.
11. Koval', N. N. & Ivanov, Yu. F. (2008). Nanostrukturirovaniye poverkhnosti metallo-keramicheskikh i keramicheskikh materialov pri impul'snoy elektronno-puchkovoy obrabotke. *Izvestiya vuzov. Fizika*, 51(5), 60–70. (In Russ.).
12. Baranov, Yu. V., Troitskiy, O. A., Avraamov, Yu. S. & Shlyapin, A. D. (2001). Fizicheskiye osnovy elektroimpul'snoy i elektroplasticheskoy obrabotki i novyye materialy. M.: MGIU. P. 844. (In Russ.).
13. Grabovetskaya, G. P., Stepanova, E. N., Mishin, I. P. & Zabudchenko, O. V. (2022). Vliyaniye oblucheniya impul'snym elektronnym puchkom na polzuchest' titanovogo splava sistemy Ti-6Al-4V-N. *Izvestiya vuzov. Fizika*, 63(6), 30–36. (In Russ.).
14. Boyangin, E. N., Perevalova, O. B., Panin, A. V. & Martynov, S. A. (2021). The Effect of Electron Beam Welding on the Microstructure and Microhardness of 3D-Printed Products from Titanium Alloy Ti-6Al-4V. *Physics of Metals and Metallography*, 122(2), 141–147.

Информация об авторах

В. В. Ларионов – кандидат физико-математических наук, доктор педагогических наук, профессор Томского политехнического университета.

Е. Н. Степанова – кандидат технических наук, доцент Томского политехнического университета.

Ю. И. Тюрин – доктор физико-математических наук, профессор Томского политехнического университета.

References

1. P'in, A. A., Kolachev, B. A., Nosov, V. K. & Mamonov, A. M. (2002). Vodorodnaya tekhnologiya titanovykh splavov. M.: MISiS. P. 389. (In Russ.).
2. El-Galy, I. M., Saleh, B. I. & Ahmed, M. H. (2019). Functionally graded materials classifications and development trends from industrial point of view. *SN Appl. Sci.*, 1, 1378.
3. Bhattacharyya, A. & Maurice, D. (2019). Residual stresses in functionally graded thermal

15. Zvyagin, I. P. (1984). Kineticheskiye yavleniya v neuporyadochennykh poluprovodnikakh. M.: MGU. P. 325. (In Russ.).
16. Demishev, S. I., Kondrin, M. V. & Pirnin, A. A. i dr. (1998). Termoeds v oblasti pryzhkovoy provodimosti: perekhod ot formuly Motta k formule Zvyagina. *Pis'ma v ZHETF*, 68(11), 801–806.
17. Mott, N. F. & Davis, E. A. (2012). Electronic processes in non-crystalline materials. Oxford University Press; 2nd ed. P. 590.
18. Yuan, B., Du, J., Zhang, X. & Chen, Q. et al. (2020). Microstructures and room-temperature compressive properties of Ti6Al4V alloy processed by continuous multistep hydrogenation treatment. *Int. J. Hydrogen Energy*, 45(46), 25567–25579.
19. Kolachev, B. A. (1985). Vodorodnaya khrupkost' metallov. M.: Metallurgiya. P. 216. (In Russ.).
20. An, X., Zhang, H. & Zhu, T. et al. (2022). Exploration of vacancy defect formation and evolution in low-energy ion implanted pure titanium. *Int. J. Hydrogen Energy*, 47(13), 8467.
21. Bugayev, A. A., Zakharchenya, B. P. & Chudnovskiy, F. A. (1979). Fazovyy perekhod metall-poluprovodnik i yego primeneniye. L.: Nauka. P. 183. (In Russ.).
22. Andreyev, V. N. & Klimov, V. A. (2007). Elektroprovodimost' poluprovodnikovoy fazy v monokristallakh dioksida vanadiya. *FTT*, 49(12), 2146–2150. (In Russ.).
23. Yastrebinsky, R. N., Pavlenko, V. I., Karnauhov, A. A., Cherkashina, N. I., Yastrebinskaya, A. V. & Gorodov, A. I. (2021). Radiation Resistance of a Structural Material Based on Modified Titanium Hydride. *Science and Technology of Nuclear Installations*, 2021, 6658431.

Information about the authors

V. V. Larionov – Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Professor, Tomsk Polytechnic University.

E. N. Stepanova – Candidate of Technical Sciences, Assistant Professor, Tomsk Polytechnic University.

Yu. I. Tyurin – Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor, Tomsk Polytechnic University.

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.
The authors declare that there is no conflict of interest.

Статья поступила в редакцию 01.03.2024; одобрена после рецензирования 04.04.2024; принята к публикации 02.05.2024.

The article was received by the editorial board on 01 Mar. 24; approved after reviewing 04 Apr. 24; accepted for publication 02 May 24.

Научная статья

2.6.1. Металловедение и термическая обработка металлов и сплавов (технические науки)

УДК 669.716:621.745

doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2024.02.012

ТЕПЛОВОЕ РАСШИРЕНИЕ АЛЮМИНИЕВЫХ СПЛАВОВ СПЕЦИАЛЬНОГО НАЗНАЧЕНИЯ ПОСЛЕ ОБРАБОТКИ РАСПЛАВА И ТЕРМООБРАБОТКИ

Марина Владимировна Попова¹, Марина Александровна Малюх^{2†}

^{1,2} Сибирский государственный индустриальный университет, ул. Кирова, 42, 654007, Новокузнецк, Россия

¹ m.popova@rdtc.ru, <https://orcid.org/0000-0001-8010-9134>

² starostina_ma1976@mail.ru[†], <https://orcid.org/0000-0003-2299-9292>

Аннотация. Настоящая работа освещает результаты исследований, проведенных с целью определения влияния различных реагентов, используемых при обработке расплава, на температурный коэффициент линейного расширения (ТКЛР) двойных сплавов системы Al–(11÷40)%Si специального назначения. Установлено, что использование в качестве реагента для обработки расплава водного раствора сульфата меди CuSO₄ и в качестве модификатора расплава смеси карбонатов щелочноземельных металлов (CaCO₃·MgCO₃) позволяет снизить значения ТКЛР всех исследуемых сплавов в рабочем интервале температур. Было показано, что использование паров карбамида для обработки расплава приводит к снижению ТКЛР доэвтектических сплавов во всем температурном интервале испытаний. Установлено, что термическая обработка, заключающаяся в нагреве от 100 до 200 °С в течение 10 часов с последующим охлаждением на воздухе, способствует дальнейшему снижению значений ТКЛР исследуемых сплавов. Было отмечено повышение физико-механических характеристик сплавов Al–Si после модифицирования, что можно объяснить улучшением усвоения водорода и кислорода, вводимых в расплав. Сделано предположение, что частицы тугоплавких оксидов Ca и Mg, содержащихся в смеси, обеспечивают дополнительные многочисленные центры кристаллизации. В результате сделан вывод о том, что экологически безопасная технология модифицирования расплава смесью карбонатов щелочноземельных металлов позволяет снизить температуру перегрева расплава с 1100–1200 °С до 900 °С и сократить продолжительность процесса выплавки с 5–6 до 1–1,5 часов.

Ключевые слова: алюминий, кремний, температурный коэффициент линейного расширения, обработка расплава.

Для цитирования: Попова М.В., Малюх М.А. Тепловое расширение алюминиевых сплавов специального назначения после обработки расплава и термообработки // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2024. Т. 21, № 2. С. 239–246. doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2024.02.012.

Original article

THERMAL EXPANSION SPECIAL PURPOSE ALUMINUM ALLOYS AFTER MELT TREATMENT AND HEAT TREATMENT

Marina V. Popova¹, Marina A. Malyukh^{2†}

^{1,2} Siberian State Industrial University, Kirov Str., 42, Novokuznetsk, 654007, Russia

¹ m.popova@rdtc.ru, <https://orcid.org/0000-0001-8010-9134>

² starostina_ma1976@mail.ru[†], <https://orcid.org/0000-0003-2299-9292>

Abstract. This paper highlights the results of studies carried out to determine the effect of various reagents used in melt processing on the temperature coefficient of linear expansion (TCLE) of binary alloys of the Al–(11÷40)%Si system for special purposes. It has been established that the use of an aqueous solution of copper sulfate CuSO₄ as a melt treatment agent and a mixture of alkaline earth metal carbonates (CaCO₃·MgCO₃) as a melt modifier makes it possible to reduce the thermal expansion coefficients of all the alloys under study in the working temperature range. It was shown that the use of urea vapor for melt treatment leads to a decrease in the thermal expansion coefficient of

hypoeutectic alloys over the entire temperature range of tests. It has been established that heat treatment, which consists in heating from 100 to 200 °C for 10 hours, followed by cooling in air, contributes to a further decrease in the values of the thermal expansion coefficient of the alloys under study. An increase in the physical and mechanical characteristics of Al–Si alloys after modification was noted, which can be explained by an improvement in the assimilation of hydrogen and oxygen introduced into the melt. It has been suggested that particles of refractory Ca and Mg oxides contained in the mixture provide additional numerous crystallization centers. As a result, it was concluded that an environmentally safe technology for modifying the melt with a mixture of alkaline earth metal carbonates makes it possible to reduce the overheating temperature of the melt from 1100–1200 °C to 900 °C and reduce the duration of the smelting process from 5–6 to 1–1.5 hours.

Keywords: aluminum, silicon, temperature coefficient of linear expansion, melt treatment.

For citation: Popova, M. V. & Malyukh, M. A. (2024). Thermal expansion special purpose aluminum alloys after melt treatment and heat treatment. *Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedeniya (Basic Problems of Material Science (BPMS))*, 21(2), 239–246. (In Russ.). doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2024.02.012.

Введение

Сплавы специального назначения должны соответствовать требованиям к конкретному комплексу механических, физических, физико-химических и технологических свойств, необходимых для эксплуатации изделий в строго определенных условиях. В качестве примера могут быть рассмотрены приборы и аппараты аэрокосмической промышленности, которые эксплуатируются при низких или повышенных температурах. Для приборов космической отрасли важно сочетание следующих характеристик: высокой коррозионной стойкости, малого удельного веса и размерной стабильности в широком интервале температур. Чтобы обеспечить последнее требование необходимо иметь минимальные значения температурного коэффициента линейного расширения и исключить фазовые превращения в интервале температур эксплуатации приборной техники. При разработке новых легких материалов для аэрокосмической промышленности особое внимание уделяется сплавам на основе алюминия, в частности, силуминам заэвтектического состава [1, 2]. Известно, что изменяя соотношение примесных элементов, при воздействии на расплав с помощью различных физических, механических и химических способов, возможно получать металлические сплавы с требуемыми значениями ТКЛР [3, 4].

Множество современных научно-исследовательских работ посвящены изучению влияния легирования на структуру и механические свойства алюминиевых сплавов [5–10]. Так, например, авторы [5] установили, что сплавы системы Al–Mg–Si (алюминиевые сплавы серии бxxx) характеризуются хорошими прочностными свойствами и коррозионной

стойкостью, улучшенной свариваемостью, а также снижением остаточных напряжений в крупногабаритных пластинах и листовых изделиях. Такое сочетание свойств придает им привлекательность для применения в авиационной промышленности. В работах [6–8] показано, что легирование сплавов Al–Si медью и магнием способствует их упрочнению при термической обработке за счет образования интерметаллидных фаз, что значительно повышает механические свойства силуминов.

Однако в научной литературе встречается гораздо меньше сведений о влиянии легирующих элементов на тепловое расширение алюминиевых сплавов [11].

Структура заэвтектических сплавов системы Al–Si, формируемая обычными методами литья, характеризуется наличием грубой эвтектики и крупными кристаллами кремнистой фазы. Разрабатывая новые материалы с необходимым комплексом технологических и физико-механических свойств необходимо измельчить первичные кристаллы кремния и эвтектику. С этой целью сплавы модифицируют, рафинируют или подвергают прогрессивным методам термообработки. Существуют различные способы модифицирования силуминов, предполагающие использование натрийсодержащих смесей, введение модификаторов в виде солей и лигатур, фосфорсодержащих соединений, кислородсодержащих реагентов, добавок и присадок на основе высокодисперсных компонентов [12, 13]. Важно отметить, что перечисленные технологии имеют существенный недостаток – наличие вредных фторидных и хлоридных выделений в атмосферу. Известно, что использование комбинированных модифицирующих средств, состоящих из 2-х и более элементов, значительно эффективнее каждого

элемента в отдельности. Имеется большое количество научных публикаций, подтверждающих активное участие водорода в формировании структуры и технологических свойств алюминиевых сплавов, получаемых различными способами [14-18]. Введение водорода в сплавы Al-Si позволяет обеспечить комплексное модифицирующее воздействие на структуру заэвтектических силуминов [19, 20].

Авторами разработан способ обработки расплава заэвтектических силуминов смесью карбонатов щелочноземельных металлов [21]. Этот способ модифицирования значительно улучшает структуру и технологические свойства сплавов, но подробных систематических исследований по влиянию этого способа на значения ТКЛР не проводилось. В связи с этим целью настоящей работы являлось исследование возможности получения мало изменяющихся значений ТКЛР заэвтектических силуминов в рабочем интервале температур за счет обработки расплава смесью карбонатов кальция и магния, обеспечивающей повышенное содержание элементов внедрения (H, N, O) в расплаве и образование устойчивых H-N-комплексов, являющихся готовыми центрами кристаллизации [20].

Сплавы специального назначения должны обладать стабильными эксплуатационными свойствами, т.к. необходимо исключить влияние внешней среды (изменение температуры, давления и др.). Поэтому дополнительно изучали влияние термической обработки на ТКЛР исследуемых сплавов.

Материал и методики исследования

Двойные сплавы Al-(11÷40)%Si использовали в качестве материала исследования. Выплавка осуществлялась следующим образом: в расплавленный алюминий вводили кремний в количестве 11, 20, 30, 40 %, затем расплав обрабатывали смесью карбонатов кальция и магния, взятых в равном соотношении (в количестве 1-7 % от массы расплава). Обработка расплава проводилась при температуре 710-910 °С в течение 3-15 минут. Дополнительно в течение 5-15 минут при 800-1100 °С расплав продували парами водного раствора сульфата меди CuSO_4 в количестве 0,1-0,2 % от массы расплава. С целью сравнения проводили продувку расплава парами карбамида $\text{CO}(\text{NH}_2)_2$ в течение 3...6 мин при температурах 700...900 °С. Спла-

вы заливали в алюминиевый кокиль с температуры 750-730 °С.

Дилатометрические исследования проводились на дифференциальном оптическом фоторегистрирующем дилатометре системы Шевенара (погрешность прибора составляла $\pm 0,1 \cdot 10^{-6}$ град⁻¹).

Исследуемые сплавы Al- (11÷40)%Si подвергали термической обработке, которая заключалась в нагреве в течение 10 ч при температурах 100, 150 и 200 °С с последующим охлаждением на воздухе. Температура обработки обусловлена интервалами наиболее активного диффузионного перераспределения водорода в металле и его взаимодействия с азотом, как собственным, так и поступившим в процессе обработки расплава [4].

Результаты исследования и их обсуждение

В низкотемпературном интервале испытаний выявлено снижение ТКЛР сплавов Al-(20÷40)%Si, которые предварительно в процессе выплавки обрабатывали водным раствором сульфата меди (табл.1). Таким образом, средние значения ТКЛР сплава Al-20%Si обычного приготовления в рабочем интервале температур составляют $18 \cdot 10^{-6}$ град⁻¹, тогда как сплав, обработанный сульфатом меди, имеет значения $16,6 \cdot 10^{-6}$ град⁻¹. Для сплава Al-30%Si наблюдается незначительное снижение ТКЛР. Самые низкие значения ТКЛР в интервале температур эксплуатации приборной техники наблюдаются у сплава Al-40% Si. В данном случае средние значения ТКЛР после обработки расплава составляют $11,3 \cdot 10^{-6}$ град⁻¹, тогда как значения сплава обычного приготовления равны $13,7 \cdot 10^{-6}$ град⁻¹.

Наблюдаемое снижение предположительно связано с увеличением содержания меди в составе сплавов, наряду с протеканием процессов старения при охлаждении с температур кристаллизации (в интервале 200-300 °С).

При рассмотрении высокотемпературного интервала испытаний наблюдается повышение значений ТКЛР за счет обработки расплава, однако при таких температурах приборы не эксплуатируют, поэтому данное обстоятельство не является определяющим. При меньшем времени продувки расплава ТКЛР снижается незначительно, при большем наблюдается резкое увеличение количество шлака, что приводит к уменьшению выхода годного металла, поэтому выбранный режим продувки можно считать оптимальным.

Таблица 1. Влияние обработки расплава парами водного раствора CuSO_4 на линейное расширение сплавов Al–Si

Table 1. Effect of treatment of the melt with vapors of an aqueous solution of CuSO_4 on linear expansion of Al–Si alloys

Сплав	$\alpha \cdot 10^6 \text{ град}^{-1}$, при температурах испытания, °С								
	50	100	150	200	250	300	350	400	450
Al–20%Si									
без обработки расплава	17,4	18,2	18,7	19,2	20,0	19,2	17,2	17,4	17,3
с обработкой расплава	15,8	16,7	17,3	18,2	19,9	19,9	20,4	20,0	16,9
Al–30%Si									
без обработки расплава	15,2	16,1	16,5	17,3	18,9	17,6	17,4	16,5	16,7
с обработкой расплава	14,2	15,2	16,0	16,7	17,2	17,8	20,8	18,0	16,0
Al–40%Si									
без обработки расплава	13,5	13,8	13,9	13,1	12,4	11,8	11,1	12,1	12,8
с обработкой расплава	11,2	11,3	11,4	11,5	11,2	12,1	11,9	11,3	13,1

Исследования изменения теплового расширения сплавов Al–(11÷40)%Si, подвергнутых обработке карбамидом ($\text{CO}(\text{NH}_2)_2$) показали, что выбранный способ приготовления способствует существенному снижению значений ТКЛР сплавов Al–11% Si в интервале температур 50÷450 °С (рис.1). В рабочем интервале температур наблюдается наибольшее снижение со значений $19,0 \cdot 10^{-6} \text{ град}^{-1}$ до $15,7 \cdot 10^{-6} \text{ град}^{-1}$. Выявлено аномальное повышение значений ТКЛР высококремнистых силуминов с содержанием кремния 20, 30 и 40 % при $t_{\text{исп}} = 300 \text{ °С}$. Данная аномалия линейного расширения является характерной для настоящей группы сплавов и обуславливается разложением кремни-

стой фазы и выходом элементов внедрения в металл-основу.

При рассмотрении рабочих температур эксплуатации приборной техники, наблюдается равномерное понижение значений ТКЛР всех сплавов, подвергнутых обработке. Известно, что легирование кремнием в количестве до 12 % не дает требуемое снижение значений ТКЛР. Введение кремния в количествах превышающих пределы эвтектического состава приводит к снижению прочностных характеристик, соответственно к охрупчиванию сплава. Таким образом, теряется технологическая и эксплуатационная пригодность высоколегированных сплавов. Одним из резервов снижения хрупкости является термическая обработка.

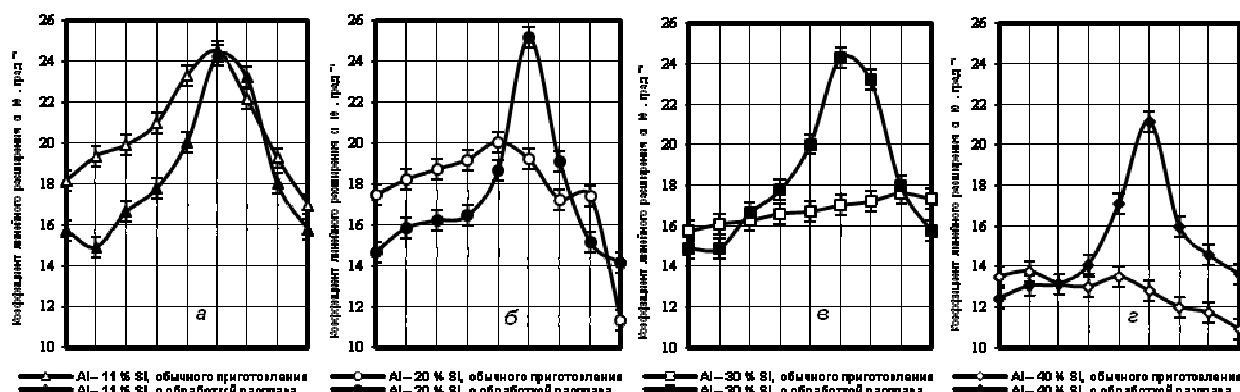


Рис.1. Влияние обработки расплава парами $\text{CO}(\text{NH}_2)_2$ на линейное расширение сплавов Al–Si: а) Al–11%Si, б) Al–20%Si, в) Al–30%Si, г) Al–40%Si

Fig.1. Effect of melt treatment with $\text{CO}(\text{NH}_2)_2$ vapors on linear expansion of Al–Si alloys: а) Al–11%Si, б) Al–20%Si, в) Al–30%Si, д) Al–40%Si

На рисунке 2 представлены результаты исследований влияния термообработки, заключающейся в нагреве от 100 до 200 °С в течение 10 ч и охлаждении на воздухе, на ТКЛР иссле-

дуемых сплавов. Наблюдается снижение ТКЛР малокремнистых силуминов в интервале температур испытания 300...450 °С после нагрева при любой из выбранных температур. Установ-

лено, что наиболее эффективным является режим нагрева при 150 °С. Следует отметить, что повторная термообработка при тех же параметрах не способствует дальнейшему снижению ТКЛР сплава Al-11%Si. При рассмотрении высококремнистых силуминов наблюдается уменьшение аномалии линейного расширения, которая проявляется при $t_{исп}$ 300 °С. Чем выше температура нагрева, тем эффективнее снижается ТКЛР сплавов Al-(20÷40)%Si.

Важно отметить, что нагрев при 200 °С приводит к устранению данной аномалии. Вероятно, при данной температуре элементы внедрения образуют собственные соединения с низким ТКЛР, что способствует устранению аномалии. Выбранное время обработки достаточно для полного прохождения диффузионных процессов, т.к. увеличение времени нагрева при 200 °С до 20 ч не привело к дополнительному снижению ТКЛР изучаемых сплавов.

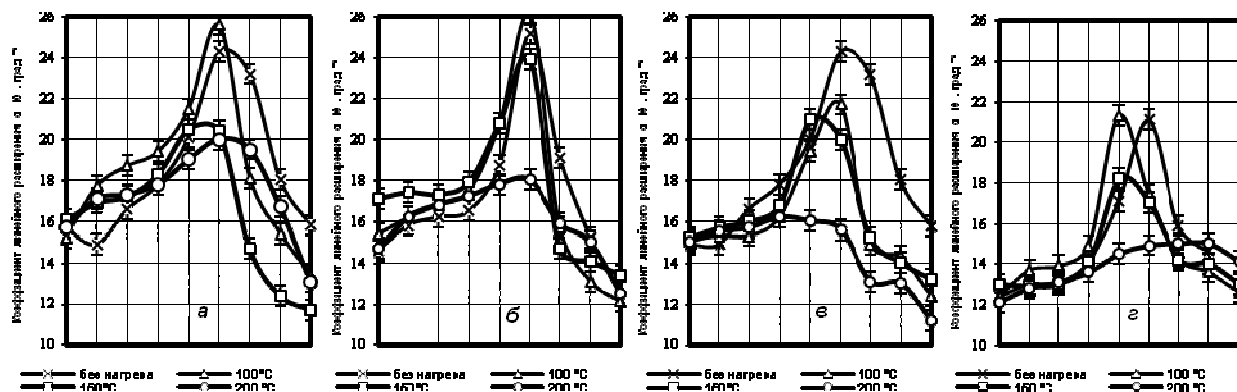


Рис.2. Влияние нагрева (10 ч, воздух) на линейное расширение высококремнистых сплавов Al-Si (обработка расплава парами CO(NH₂)₂): а) Al-11%Si, б) Al-20%Si, в) Al-30%Si, г) Al-40%Si

Fig.2. Effect of heating (10 h, air) on linear expansion of high-silicon alloys Al-Si (melt treatment with CO(NH₂)₂ vapors): a) Al-11%Si, b) Al-20%Si, c) Al-30%Si, d) Al-40%Si

Обработка расплава смесью карбонатов кальция и магния является дополнительным фактором снижения ТКЛР изучаемых сплавов в интервале температур эксплуатации приборной техники. Предложенный способ обработки расплава способствует снижению значений ТКЛР на 12-17 % в сравнении со сплавами обычного приготовления (табл.2).

Обработка расплава смесью (CaCO₃·MgCO₃) способствует лучшему усвоению водорода и кислорода, вводимых в расплав, поэтому обработанные сплавы Al-Si об-

ладают повышенными физико-механическими свойствами.

Важно отметить, что модифицирующая смесь содержит частицы тугоплавких оксидов Mg и Ca, которые служат многочисленными дополнительными центрами кристаллизации. Предложенный способ обработки расплава для алюминия и сплавов системы Al-Si является эффективным, т.к. способствует увеличению предельной степени пластической деформации до разрушения в среднем на 7-25 % и снижению ТКЛР на 7-14 % [21].

Таблица 2. Влияние обработки расплава смесью (CaCO₃·MgCO₃) на линейное расширение сплавов Al-Si

Table 2. Effect of melt treatment with a mixture (CaCO₃·MgCO₃) on the linear expansion of Al-Si alloys

Сплав	$\alpha \cdot 10^6 \text{ град}^{-1}$, при температурах испытания, °С								
	50	100	150	200	250	300	350	400	450
Al-20%Si									
без обработки расплава	17,4	18,2	18,7	19,2	20,0	19,2	17,2	17,4	17,3
с обработкой расплава	16,0	16,9	18,0	19,3	19,6	24,7	12,8	11,0	9,8
Al-30%Si									
без обработки расплава	15,2	16,1	16,5	17,3	18,9	17,6	17,4	16,9	14,5
с обработкой расплава	13,1	15,2	16,1	17,0	17,7	19,0	16,1	13,0	13,2
Al-40%Si									
без обработки расплава	13,6	13,8	13,1	13,0	13,5	12,8	12,0	11,8	10,9
с обработкой расплава	11,3	13,0	13,3	13,6	14,8	14,8	14,2	13,3	11,9

Заключение

В результате исследования влияния модификаторов сложного состава (сульфат меди, диамид угольной кислоты, смесь карбонатов кальция и магния) на ТКЛР сплавов Al-(11÷40)%Si было установлено, что обработка расплава смесью карбонатов кальция и магния имеет ряд преимуществ. Кроме того, наблюдается снижение ТКЛР обработанных сплавов в интервале температур эксплуатации приборной техники. Таким образом, значения ТКЛР после обработки предложенным способом на 12-17 % ниже, чем у сплавов обычного приготовления. А именно, в интервале температур 50÷150 °C наблюдается снижение средних значений ТКЛР сплава Al-20% с $18 \cdot 10^{-6}$ град⁻¹ до $16,9 \cdot 10^{-6}$ град⁻¹. Аналогичным образом, для сплава Al-30%Si средние значения ТКЛР уменьшаются с $16 \cdot 10^{-6}$ град⁻¹ до $14,2 \cdot 10^{-6}$ град⁻¹, а для сплава Al-40%Si с $13,2 \cdot 10^{-6}$ град⁻¹ до $12,6 \cdot 10^{-6}$ град⁻¹. Модифицирование высококремнистых силуминов (Al-(30÷40)%Si) смесью карбонатов имеет дополнительное преимущество, которое заключается в снижении температуры перегрева расплава с 1100-1200 °C до 900 °C и в сокращении времени выплавки с 5-6 до 1-1,5 ч. Такой эффект связан с понижением термической устойчивости кремния в присутствии доломита. В результате усвоение шихтового кремния алюминиевым расплавом происходит при более низких температурах и за более короткое время.

Список литературы

1. Афанасьев В.К., Попова М.В. Перспективы развития легких сплавов с малым тепловым расширением для космической техники // *Металлургия машиностроения*. 2012. № 6. С. 8–13.
2. Афанасьев В.К., Попова М.В., Самонь В.А. О создании новых легких деформированных сплавов для космической техники // *Металлургия машиностроения*. 2014. № 5. С. 21–28.
3. Афанасьев В.К., Попова М.В., Ружило А.А., Фролов В.Ф. Легкие сплавы с малым тепловым расширением. Кемерово: Кузбассвузиздат, 2000. 376 с.
4. Афанасьев В.К., М.В. Попова, С.В. Долгова, А.В. Горшенин, М.А. Малюх Влияние обработки расплава водяным паром на тепловое расширение сплавов Al-20...40%Si // *Металлургия*. 2019. № 1. С. 71–76.
5. Ehrstrom J., Warner T. Metallurgical design of alloys for aerospace structures // *Materials Science Forum*. 2000. V. 331–3. P. 5–16.
6. Xia F., Li J.P., Guo Y.C., Yang Z. Microstructure Evolution and Mechanical Properties of an Al–Si–Cu–Mg–Ni Aluminium Alloy after Thermal Exposure // *Materials Science Forum*. 2013. V. 765. P. 486–490.
7. Jiang Z., Liu X., Jiao S., Han J. Effects of Si, Cu and Mg on the High-Temperature Mechanical Properties of Al–Si–Cu–Mg Alloy // *Advanced Materials Research*. 2013. V. 652–654. P. 1030–1034.
8. Chen C.L., West G.D., Thomson R.C. Characterisation of Intermetallic Phases in Multicomponent Al–Si Casting Alloys for Engineering Applications // *Materials Science Forum*. 2006. V. 519–521. P. 359–364.
9. Hurtalová L., Tillová E., Chalupová M., Belan J. Morphology of intermetallic phases in Al–Si cast alloys and their fracture behaviour // *Production Engineering Archives*. 2015. V. 6, N 1. P. 2–5.
10. Biswas Prosanta, Prasadu Kona, Mondal Manas Effect of Bi addition on microstructure and mechanical properties of hypereutectic Al–17.6Si alloy // *Materials Research Express*. V. 6, N 11. 1165b9.
11. Zhu X.W., Wang R.C., Peng J. Expansion Behavior and Microstructures of Hypereutectic Al–Si Alloys Subjected to Thermal Cycling // *Advanced Materials Research*. 2014. V. 937. P. 145–149.
12. Zu F., Li X. Functions and mechanism of modification elements in eutectic solidification of Al–Si alloys: A brief review // *China Foundry*. 2014. V. 11, N 4. P. 287–295.
13. Li J.H., Albu M., Ludwig T.H., Matsubara Y., Hofer F. et al. Modification of eutectic Si in Al-Si based alloys // *Materials Science Forum*. 2014. V. 794–796. P. 130–136.
14. Колачев Б.А. Водород в металлах и сплавах // *Металловедение и термическая обработка металлов*. 1999. № 3. С. 3–11.
15. Hess P.D., Tumbull G.K. Effects of Hydrogen on Properties of Aluminum Alloys // *Paper from Hydrogen in Metals, American Society for Metals*. 1974. P. 277–287.
16. Борисов Г.П. О роли водорода в формировании структуры и свойств алюминиевых

сплавов // *Металлургия машиностроения*. 2005. № 5. С. 11–20.

17. Goltsov V.A. Fundamentals of hydrogen treatment of materials. In book: *Progress in Hydrogen Treatment of Materials*. Donetsk-Coral Gables: Kassiopeya Ltd., 2001. P. 161–184.

18. Гольцова М.В. Водородные технологии в литье и металлургии: настоящее и будущее (обзор) // *Литье и металлургия*. 2018. Т. 93, № 4. С. 145–154.

19. Афанасьев В.К., Попова М.В., Малюх М.А., Долгова С.В. Об участии водорода в формировании свойств заэвтектических сплавов Al–Si // *Обработка металлов (технология, оборудование, инструменты)*. 2018. Т. 20, № 2. С. 63–74.

20. Афанасьев В.К., Попова М.В., Прудников А.Н. Воздействие водорода на структуру и свойства заэвтектического силумина с 15 % кремния // *Металловедение и термическая обработка металлов*. 2022. Т. 804, № 6. С. 10–16.

21. Попова М.В., Герцен В.В., Доронченко А.В., Афанасьев В.К. Пат. 2136773 РФ. Способ модифицирования алюминия и его сплавов. № 98104521; заявл. 05.03.98; опубл. 10.09.99.

Информация об авторах

М. В. Попова – доктор технических наук, профессор кафедры обработки металлов давлением и материаловедения, ЕВРАЗ ЗСМК Сибирского государственного индустриального университета.

М. А. Малюх – кандидат технических наук, доцент кафедры обработки металлов давлением и материаловедения, ЕВРАЗ ЗСМК Сибирского государственного индустриального университета.

References

1. Afanasiev, V. K. & Popova, M. V. (2012). Prospects for the development of light alloys with low thermal expansion for space technology. *Metallurgy engineering*, (6), 8–13. (In Russ.).

2. Afanasiev, V. K., Popova, M. V. & Samon, V. A. (2014). On the creation of new light deformed alloys for space technology. *Metallurgy engineering*, (5), 21–28. (In Russ.).

3. Afanasiev, V. K., Popova, M. V., Ruzhilo, A. A. & Frolov, V. F. (2000). Light alloys with low thermal expansion. Kemerovo: Kuzbassvuzizdatm. P. 376.

4. Afanasiev, V. K., Popova, M. V., Dolgova, S. V., Gorshenin, A. V. & Malyukh, M. A. (2019). Influence of treatment of the melt with water vapor on the thermal expansion of Al–20...40% Si alloys. *Metallurgist*, (1), 71–76. (In Russ.).

5. Ehrstrom, J. & Warner, T. (2000). Metallurgical design of alloys for aerospace structures. *Materials Science Forum*, 331–3, 5–16.

6. Xia, F., Li, J. P., Guo, Y. C. & Yang, Z. (2013). Microstructure Evolution and Mechanical Properties of an Al–Si–Cu–Mg–Ni Aluminium Alloy after Thermal Exposure. *Materials Science Forum*, 765, 486–490.

7. Jiang, Z., Liu, X., Jiao, S. & Han, J. (2013). Effects of Si, Cu and Mg on the High-Temperature Mechanical Properties of Al–Si–Cu–Mg Alloy. *Advanced Materials Research*, 652–654, 1030–1034.

8. Chen, C. L., West, G. D. & Thomson, R. C. (2006). Characterisation of Intermetallic Phases in Multicomponent Al–Si Casting Alloys for Engineering Applications. *Materials Science Forum*, 519–521, 359–364.

9. Hurtalová, L., Tillová, E., Chalupová, M. & Belan, J. (2015). Morphology of intermetallic phases in Al–Si cast alloys and their fracture behavior. *Production Engineering Archives*, 6(1), 2–5.

10. Biswas, Prosanta & Prasadu, Kona & Mondal, Manas (2019). Effect of Bi addition on microstructure and mechanical properties of hypereutectic Al–17.6Si alloy. *Materials Research Express*, 6(11), 1165b9.

11. Zhu, X. W., Wang, R. C. & Peng, J. (2014). Expansion Behavior and Microstructures of Hypereutectic Al–Si Alloys Subjected to Thermal Cycling. *Advanced Materials Research*, 937, 145–149.

12. Zu, F. & Li, X. (2014). Functions and mechanism of modification elements in eutectic solidification of Al–Si alloys: A brief review. *China Foundry*, 11(4), 287–295.

13. Li, J. H., Albu, M., Ludwig, T. H., Matsubara, Y. & Hofer, F. et al. (2014). Modification of eutectic Si in Al–Si based alloys. *Materials Science Forum*, 794–796, 130–136.

14. Kolachev, B. A. (1999). Hydrogen in metals and alloys. *Metal science and heat treatment of metals*, (3), 3–11. (In Russ.).

15. Hess, P. D. & Tumbull, G. K. (1974). Effects of Hydrogen on Properties of Aluminum Alloys. *Paper from Hydrogen in Metals, American Society for Metals*, 277–287.

16. Borisov, G. P. (2005). On the role of hydrogen in the formation of the structure and properties of aluminum alloys. *Metallurgy engineering*, (5), 11–20. (In Russ.).
17. Goltsov, V.A. (2001). Fundamentals of hydrogen treatment of materials. In book: *Progress in Hydrogen Treatment of Materials*. Donetsk-Coral Gables: Kassiopeya Ltd., 161–184.
18. Goltsova, M. V. (2018). Hydrogen technologies in casting and metallurgy: present and future (review). *Casting and metallurgy*, 93(4), 145–154. (In Russ.).
19. Afanasiev, V. K., Popova, M. V., Malyukh, M. A. & Dolgova, S. V. (2018). On the participation of hydrogen in the formation of properties of hypereutectic Al–Si alloys. *Metal processing (technology, equipment, tools)*, 20(2), 63–74. (In Russ.).
20. Afanasiev, V. K., Popova, M. V. & Prudnikov, A. N. (2022). The effect of hydrogen on the structure and properties of hypereutectic silumin with 15 % silicon. *Metal science and heat treatment of metals*, 804(6), 10–16. (In Russ.).
21. Popova, M. V., Herzen, V. V., Doronchenko, A. V. & Afanasiev, V. K. A method of modifying aluminum and its alloys. Pat. 2136773 RF. 98104521, dec. 03.05.98, publ. 09.10.99. (In Russ.).

Information about the authors

M. V. Popova – Doctor of Technical Sciences, Professor of the Department of Metalworking and Material Science, EVRAZ ZSMK of the Siberian State Industrial University.

M. A. Malyukh – Candidate of Technical Sciences, Associate Professor of the Department of Metal Processing by Pressure and Material Science, EVRAZ ZSMK of the Siberian State Industrial University.

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.
The authors declare that there is no conflict of interest.

Статья поступила в редакцию 01.03.2024; одобрена после рецензирования 04.04.2024; принята к публикации 02.05.2024.

The article was received by the editorial board on 01 Mar. 24; approved after reviewing 04 Apr. 24; accepted for publication 02 May 24.

Научная статья

2.6.1. Металловедение и термическая обработка металлов и сплавов (технические науки)

УДК 627.777.22:620.186.5:620.17

doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2024.02.013

ИССЛЕДОВАНИЕ МЕХАНИЧЕСКИХ СВОЙСТВ СТАЛИ У10А ДЛЯ ПРОИЗВОДСТВА ВЫСОКОПРОЧНЫХ ХОЛОДНОКАТАНЫХ ЛЕНТ ПОСЛЕ ЦИКЛИЧЕСКОГО ОТЖИГА И ПЛАСТИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ

Иван Дмитриевич Поспелов^{1†}, Дина Вагифовна Матвеева²

^{1,2} Череповецкий государственный университет, пр. Луначарского, 5, 162600, Череповец, Россия

¹ idpospelov@chsu.ru[†], <https://orcid.org/0009-0000-5974-5718>

² dimatvei@list.ru, <https://orcid.org/0009-0006-4598-9715>

Аннотация. В статье рассматривается влияние циклического отжига высокоуглеродистой стали У10А на изменение её механических свойств, микроструктуры и формы графитных включений для дальнейшей оценки пригодности стали к пластической деформации. Исследована исходная горячекатаная структура стали У10А, состоящая из пластинчатого перлита и графитных включений разной формы, которая обладает недостаточной пластичностью через измеренный параметр относительного удлинения $\delta = 3,4\%$. Для увеличения пластичности разработан режим сфероидизирующего циклического отжига на зернистый перлит средним размером 2-5 мкм для снижения прочностных и увеличения пластических характеристик стали. Установлено, что выше представленный отжиг также положительно влияет на изменение формы графитных включений – показано изменение их формы на сферическую, а также уменьшение их размера до 4-8 мкм и равномерное распределение в структуре, что способствует последующей пластической деформации без разрушений. Оценка результатов механических испытаний после пластической деформации прессованием со степенью 65 % отожжённой стали У10А позволяет сделать вывод о возможности получения требуемого временного сопротивления разрыву и твёрдости по ГОСТ 21996–76 для высокопрочных холоднокатаных лент без риска повреждения прокатных валков.

Ключевые слова: высокопрочная стальная лента, высокоуглеродистая сталь У10А, сфероидизирующий циклический отжиг, зернистый перлит, графитные включения, твёрдость по Виккерсу, временное сопротивление разрыву, пластическая деформация, уравнения регрессии, твёрдость по Шору.

Благодарности: Часть исследований выполнены в лабораториях АО «Северсталь Менеджмент».

Для цитирования: Поспелов И.Д., Матвеева Д.В. Исследование механических свойств стали У10А для производства высокопрочных холоднокатаных лент после циклического отжига и пластической деформации // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2024. Т. 21, № 2. С. 247–253. doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2024.02.013.

Original article

RESEARCH OF THE MECHANICAL PROPERTIES OF U10A STEEL FOR THE PRODUCTION OF HIGH-STRENGTH COLD-ROLLED STRIPS AFTER CYCLIC ANNEALING AND PLASTIC DEFORMATION

Ivan D. Pospelov^{1†}, Dina V. Matveeva²

^{1,2} Cherepovets State University, Lunacharskogo Pr., 5, Cherepovets, 162600, Russia

¹ idpospelov@chsu.ru[†], <https://orcid.org/0009-0000-5974-5718>

² dimatvei@list.ru, <https://orcid.org/0009-0006-4598-9715>

Abstract. The article examines the effect of cyclic annealing of high-carbon steel U10A on changes in its mechanical properties, microstructure and shape of graphite inclusions for further assessment of the steel's suitability for plastic deformation. The initial hot-rolled structure of U10A steel consisting of lamellar pearlite and graphite in-

clusions of various shapes which has insufficient ductility through the measured elongation parameter $\delta = 3.4\%$ has been researched. To increase ductility, a mode of spheroidizing cyclic annealing on granular pearlite with an average size of 2-5 μm has been developed to reduce steel strength characteristics and increase the plastic ones. It has been established that the above annealing also has a positive effect on the change in the shape of graphite inclusions – a change in their shape to spherical is shown, as well as a reduction in their size to 4-8 μm and a uniform distribution in the structure, which contributes to subsequent plastic deformation without destruction. Evaluation of the results of mechanical tests after plastic deformation by pressing with a degree of 65 % of annealed U10A steel allows us to conclude that it is possible to obtain the required tensile strength and hardness according to GOST 21996–76 for high-strength cold-rolled strips without the risk of damaging the rolls.

Keywords: high strength steel tape, high carbon steel U10A, spheroidizing cyclic annealing, granular pearlite, graphite inclusions, Vickers hardness, tensile strength, plastic deformation, regression equations, Shore hardness.

Acknowledgements: Some of the research was carried out in the laboratories of JSC Severstal Management.

For citation: Pospelov, I. D. & Matveeva, D. V. (2024). Research of the mechanical properties of steel U10A for the production of high-strength cold-rolled strips after cyclic annealing and plastic deformation. *Fundamental'nye problemy sovremennoy materialovedeniya (Basic Problems of Material Science (BPMS))*, 21(2), 247–253. (In Russ.). doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2024.02.013.

Введение

Расширение производства холоднокатаных полос и лент высокого качества прокаткой из инструментальных, конструкционных, пружинных высокопрочных эвтектоидных и заэвтектоидных сталей является преобладающей тенденцией развития современного прокатного производства. На данный момент наиболее востребованы холоднокатаные ленты из высокоуглеродистых сталей У8А, У10А и их аналогов толщиной до 1,0 мм и шириной 10-100 мм группы прочности 1П по ГОСТ 21996–76, который регламентирует максимальную твёрдость до 485HV и максимальное временное сопротивление разрыву σ_b до 1570 МПа [1].

Одновременно с усложнением холоднокатаного сортамента и повышением требований к его качеству растёт потребность в горячекатаном подкате с определённой микроструктурой и механическими свойствами для производства таких лент и полос. Получение подката с определёнными свойствами объясняется тем, что в процессе непрерывной холодной прокатки из-за больших суммарных обжатий и сильного наклёпа происходит резкое упрочнение и увеличение твёрдости полосы [2], которая может превышать твёрдость самого вала, поэтому появляются риски повреждения поверхности прокатываемой полосы, снижения стойкости или разрушения рабочих валков и аварийных перевалок.

Традиционным методом снижения твёрдости и получения благоприятной структуры сорбита для холодной деформации эвтектоидных и заэвтектоидных сталей является подготови-

тельная, промежуточная и окончательная операция патентирования (изотермической закалки) ленты [3] аналогичная операции патентирования проволоки [4]. Однако, как отмечают авторы работ [3, 4], процент перлитной фазы (сорбита) после патентирования достигает диапазона 85-92 %, остальное в структуре могут занимать нежелательные включения бейнита, которые снижают пластичность, являются концентраторами напряжений и способствуют хрупкому разрушению стали [5]. Помимо нестабильной структуры после патентирования у заготовки для дальнейшей деформации в холодном состоянии имеется ограниченный запас пластичности, характеризуемый параметром относительного удлинения после разрыва в диапазоне $\delta = 5-10\%$ [3, 5].

Резервом повышения пластичности низкоуглеродистых и среднеуглеродистых сталей, по мнению авторов работ [6-10], является рекристаллизационный отжиг первого рода, неполный отжиг второго рода и температурное воздействие на стальные детали, которые приводят к эффектам сфероидизации перлита и графитизации структуры. Наиболее близким вариантом термической обработки высокоуглеродистых сталей для получения в структуре графита за счёт частичного разложения цементита является изотермический отжиг на зернистый перлит [11]. Однако подробные рекомендации выбора режима отжига и оценка микроструктуры для высокоуглеродистых сталей отсутствуют, в работах [11, 12] представлены режимы термической обработки таких сталей по аналогии отжига ковких чугунов.

Цель настоящей работы – разработать режим отжига для высокоуглеродистой горячекатаной стали У10А, обеспечивающий возможность применения такой термической обработки для производства высокопрочных холоднокатаных лент путём исследования механических свойств до и после пластической деформации с разной степенью.

Методика исследований

В качестве исходного материала для термической обработки использовали горячекатаный травленный прокат размером 2,85×10 мм из стали У10А, химический состав и механические свойства которой представлены в таблице 1.

Таблица 1. Химический состав и механические свойства горячекатаной стали У10А

Table 1. Chemical composition and mechanical properties of hot-rolled steel U10A

Содержание химических элементов, % (масс.)												
C	Si	Mn	P	S	Cr	Mo	Ni	Al	Cu	Nb	Ti	V
1,0	0,214	0,31	0,0087	0,0036	0,158	0,008	0,19	0,026	0,161	0,001	0,014	0,002
Временное сопротивление разрыву σ_b , МПа									866,5			
Твёрдость по Виккерсу, HV									299			
Относительное удлинение δ , %									3,4			

Структуру образцов стали до и после термической обработки оценивали по микрошлифам после травления в 2-4 % спиртовом растворе азотной кислоты при помощи оптического инвертированного микроскопа Meiji IM 7530 с автоматическим анализатором структуры по изображению в программе «Thixomet». При автоматическом анализе в выше указанной программе исследуемая горячекатаная сталь на рис.1 имеет в структуре следующее соотношение: пластинчатый перлит 82,2 %; сорбитизированный перлит 11,7 %.

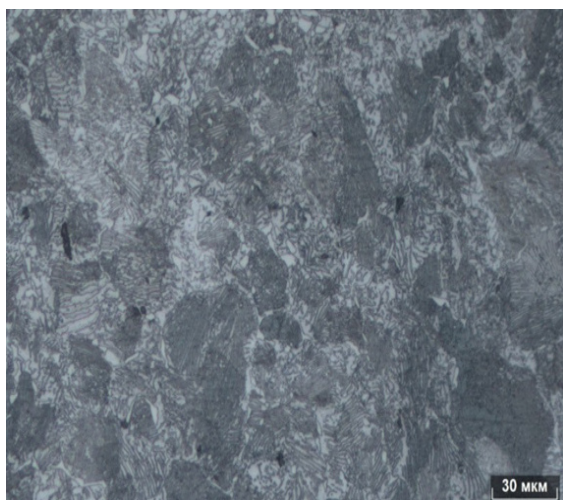


Рис.1. Исходная структура горячекатаной стали У10А, ×500

Fig.1. The initial structure of hot-rolled steel U10A, ×500

Кроме пластинчатого перлита в структуре стали визуально 3-4 % по всей площади изображения рис.1 имеются включения чёрного цвета различной формы и максимальным размером 45-60 мкм, идентификацию таких графитных включений (рис.2) до и после термической обработки проводили на растровом электронном микроскопе (РЭМ) JEOL JSM-6610LV с энергодисперсионной приставкой INCA Energy 350X-Max с программным обеспечением INCA.

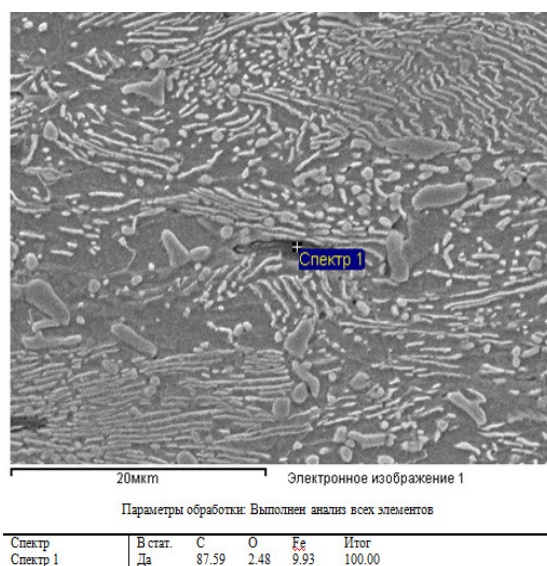


Рис.2. Идентификация включений графита с помощью РЭМ, ×2500

Fig.2. Identification of graphite inclusions using SEM, ×2500

Термическую обработку образцов проводили в муфельной печи МИМР-10ЭУ в защитной атмосфере азота. В качестве термической обработки образцов выше представленной стали на зернистый перлит был разработан отжиг схемой на рис.3, заключающийся в трёхкратном циклическом нагреве и выдержке образцов стали до температуры t_1 выше точки A_{c1} на 40°C и двукратном охлаждении и выдержке до

температуры t_2 ниже точки A_{r1} на 30°C . Температуру критических точек определяли по справочным данным [13] $A_{c1} = 730^\circ\text{C}$ и $A_{r1} = 700^\circ\text{C}$. Скорости нагрева ω_1 до температуры t_1 , охлаждения ω_2 до температуры t_2 и охлаждения с печью до температуры t_3 , а также время выдержек τ_1 и τ_2 представлены на рис.3.

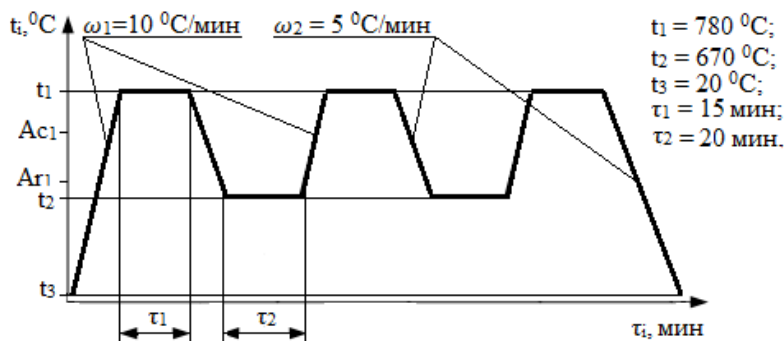


Рис.3. Схема циклического отжига образцов стали У10А

Fig.3. The diagram of cyclic annealing of U10A steel samples

Глубину обезуглероженного слоя после отжига определяли по ГОСТ 1763–68. Холодную прокатку в лабораторных условиях заменяли деформацией образцов исследуемой стали на прессе следующими степенями деформации 15 %, 30 %, 45 % и 65 % соответственно. Испытания временного сопротивления разрыву методом растяжения образцов до и после деформации производили по ГОСТ 11701–84 на универсальной электромеханической испытательной машине Galdabini Quasar 50 с максимальным разрывным усилием 50кН. Твёрдость образцов по Виккерсу до и после деформации измеряли по ГОСТ 9450–76 на микротвёрдомере Future Tech FM-310 с программной системой автоматизации измерений микротвёрдости «Thixomet TRP-19-01».

Результаты и их обсуждение

Средние значения механических свойств стали после циклического отжига приведены в таблице 2. Поскольку горячекатаная сталь У10А на рис.1 имеет изначальную структуру пластинчатого перлита, то процесс циклического отжига направлен на разрушение такой структуры и образование зернистого перлита, данные изменения приводят к повышению пластичности материала, которая требуется для дальнейшей деформации в холодном состоянии с высокой степенью.

Таблица 2. Средние значения механических свойств стали У10А после циклического отжига

Table 2. Average values of mechanical properties of steel U10A after cyclic annealing

Временное сопротивление разрыву σ_b , МПа	570,2
Условный предел текучести $\sigma_{0,2}$, МПа	328,7
Относительное удлинение δ , %	11,1
Твёрдость по Виккерсу, HV	224

Каждая ступень циклического отжига стали У10А определяет структурные изменения. При первом нагреве до температуры выше точки A_{c1} на 40°C происходит превращение пластинчатого перлита в аустенит, дальнейшее охлаждение с печью до температуры ниже точки A_{r1} на 30°C с выдержкой при данной температуре приводит к образованию зернистой структуры с сохранением участками структуры пластинчатого перлита. Для полного образования 100 % структуры зернистого перлита операции нагрева и охлаждения повторяют циклами на рис.3 до устранения в структуре стали пластинчатого перлита (рис.4). После такого отжига средний размер зерна перлита составляет 2-5 мкм. В соответствии с ГОСТ 8233–56, данный размер соответствует крупно- и грубозернистому перлиту. Известно, что большая пла-

стичность наблюдается у сталей с крупным зерном, что обозначает более высокую способность к пластической деформации без разрушения [6].

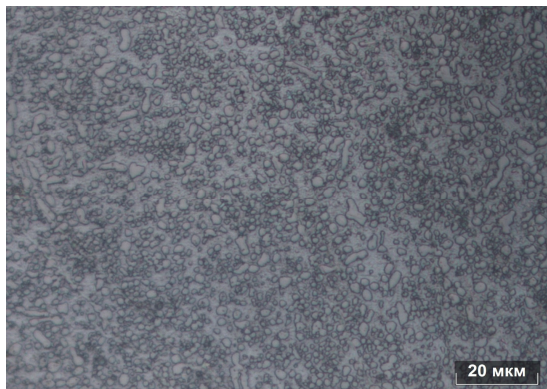


Рис.4. Структура стали У10А после циклического отжига, $\times 1000$

Fig.4. The structure of U10A steel after cyclic annealing, $\times 1000$

Замеры глубины полностью обезуглероженного слоя верхней и нижней стороны образцов после отжига составили 99,9-104 мкм, обезуглероженного и частично обезуглероженного слоя толщина 198-206 мкм.

Также, в процессе сфероидизирующего циклического отжига стали У10А изменения претерпевают графитные включения, происходит их увеличение и более равномерное распределение в структуре стали как это показано на нетравленном шлифе рис.5. Изменяются их форма на сферическую и размер (средний размер графитных включений после отжига составляет 4-8 мкм), что снижает концентрацию напряжений и повышает устойчивость стали к

трещинам и разрушению при холодной деформации с высокой степенью.

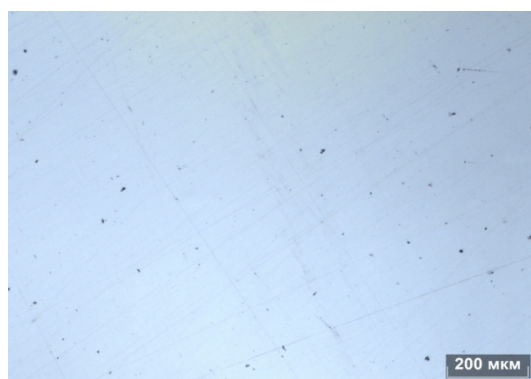


Рис.5. Распределение графитных включений после циклического отжига, $\times 100$

Fig.5. Distribution of graphite inclusions after cyclic annealing, $\times 100$

Для оценки и расчёта увеличения твёрдости по Виккерсу, временного сопротивления разрыву σ_B , условного предела текучести $\sigma_{0,2}$ и снижения относительного удлинения δ_{100} в зависимости от степени деформации образцов ϵ_i после проведения механических испытаний были построены графические зависимости на рис.6 и получены следующие уравнения регрессии:

$$HV = 218,23 + 2,3733 \cdot \epsilon_i, \quad (1)$$

$$\sigma_B = 0,1584 \cdot \epsilon_i^2 + 1,3524 \cdot \epsilon_i + 567,01, \quad (2)$$

$$\sigma_{0,2} = 0,1172 \cdot \epsilon_i^2 + 2,2871 \cdot \epsilon_i + 319,6, \quad (3)$$

$$\delta_{100} = 0,002 \cdot \epsilon_i^2 - 2,262 \cdot \epsilon_i + 10,552, \quad (4)$$

где ϵ_i – степень деформации, %.

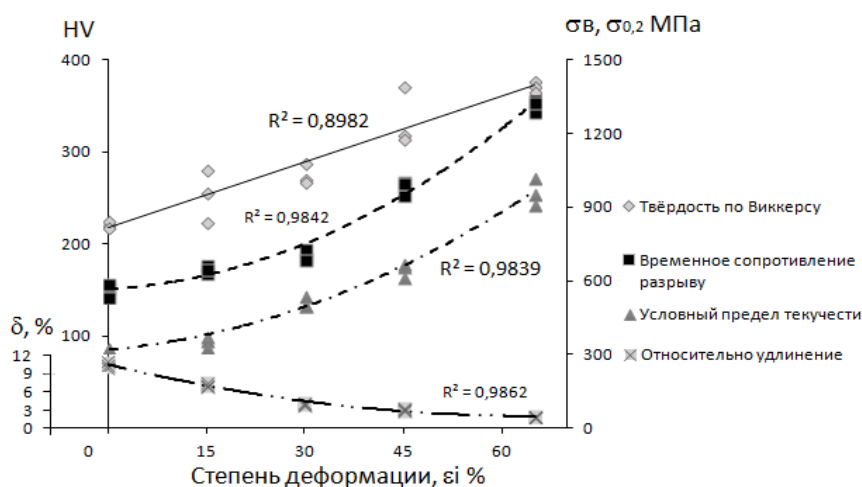


Рис.6. Зависимости механических свойств стали У10А от степени деформации

Fig.6. Dependences of the mechanical properties of steel U10A on the degree of deformation

Коэффициенты детерминации $R^2 = 0,8982$, $R^2 = 0,9842$, $R^2 = 0,9839$ и $R^2 = 0,9862$ уравнений (1)–(4) для численного определения твёрдости HV, σ_b , $\sigma_{0,2}$ и δ_{100} соответственно говорят о хорошей аппроксимации данных, а их расчётные значения критерия Фишера много больше табличных, поэтому выше представленные зависимости значимы и дают точный и достоверный прогноз.

Результаты механических испытаний показали, что временное сопротивление разрыву σ_b находится в диапазоне 1286–1329 МПа и превосходит минимально требуемое значение 1270 МПа по ГОСТ 21996–76 [1] при степени деформации образца 65 % на прессе, которая соответствует прокатке ленты до толщины 1,0 мм. Средняя твёрдость по Виккерсу образцов после деформации с аналогичной степенью равна 372 HV, которая в пересчёте на твёрдость по Шору для определения стойкости валков равна 51,1 HSD [13]. Твёрдость поверхностного слоя рабочих валков, применяемых на современных станах для холодной прокатки лент и полос в среднем равна 57,9–60 HSD [14], поэтому использование полосовой стали У10А после циклического отжига на рис.3 для производства высокопрочных лент возможно без риска повреждения и снижения стойкости валков.

Выводы

В результате проведённых исследований получены следующие результаты:

1. Разработан режим сфероидизирующего циклического отжига заэктоидной стали У10А на зернистый перлит с целью повышения её пластичности для дальнейшей деформации. Для образования 100 % структуры зернистого перлита необходимо повторять циклы нагрева и охлаждения до полного разрушения пластинчатого перлита, который сформировался в исходной структуре и, как показали механические испытания, снижает пластичность горячекатаной высокоуглеродистой стали. Выше представленный отжиг стали У10А изменяет форму, размер и распределение графитных включений, в структуре стали происходит их увеличение, равномерное распределение, изменение их формы на сферическую и уменьшение их размера до 4–8 мкм.

2. Проведение механических испытаний отожжённых образцов стали после пластической деформации позволило получить уравнения регрессии для определения временного сопротивления разрыву и твёрдости по Виккерсу

в зависимости от степени деформации образцов. Результаты механических испытаний показали, что временное сопротивление разрыву и значения твёрдости по Виккерсу превосходят минимальные требуемые значения 1270 МПа и 375HV по ГОСТ 21996–76 [1] после деформации образца до толщины 1,0 мм, что говорит о возможности применения такой отожжённой стали при прокатке высокопрочных лент группы прочности П1 без риска повреждения прокатных валков.

Список литературы

1. ГОСТ 21996–76. Лента стальная холоднокатаная термообработанная. Технические условия.
2. Zhi-Ping W., Deng G. Cold rolling process of 5Cr15MoV martensite stainless steel // Journal of north university of China. 2012. V. 33, N 3. P. 350–352.
3. Нефедов Д.В., Телегин В.Е., Миянов А.Г., Рожков С.В., Борохович И.М. Аспекты качества и технологии производства патентованной высокопрочной упаковочной ленты // Сталь. 2019. № 6. С. 30–33.
4. Shamsheer S.B., Narender M.S., Rajendra M.B. Optimization of lead patenting process for high carbon steel wires // Proceeding of the national academy of science, India section A: Physical science. 2017. V. 87. P. 267–278.
5. Борисенко А.Ю., Луценко В.А., Луценко О.В., Куренкова Т.П., Серегина Е.С., Демидов А.В. Структура и свойства патентованной высокоуглеродистой проволоки // Литьё и металлургия. 2011. № 1. С. 85–89.
6. Atsuki O. Graphite formation in high-purity cold-rolled carbon steels // Metallurgical transactions. 1989. V. 20A. P. 1917–1925.
7. Rubin P., Larker R., Navara E., Antti M.-L. Graphite formation and dissolution in ductile irons and steels having high silicon contents: solid-state transformation // Metallography, microstructure and analysis. 2018. V. 7. P. 587–595.
8. Inam A., Brydson R., Edmonds D.V. Effect of starting microstructure upon the nucleation sites and distribution of graphite particles during a graphitising anneal of an experimental medium-carbon machining steel // Materials characterization. 2015 V. 106. P. 86–92.
9. Tomotaka H., Kota S., Kaoru S., Toru H., Kazuhiro A. TTP Diagrams of Graphitization of Creep Ruptured Carbon Steels and 0.5Mo Steel // ISIJ International. 2021. V. 61, Is. 11. P. 2822–2831.

10. Коваленко Н.Д., Иванов А.М. Влияние комбинированной деформационной обработки и отжига на механические свойства и механизм разрушения низкоуглеродистой стали // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2017. Т. 14, № 1. С. 39–43.

11. Гуляев А.П. *Металловедение*. М.: Металлургия, 1986. 544 с.

12. Остапенко Н.Н., Кропивницкий Н.Н. *Технология металлов*. М.: Высшая школа, 1970. 344 с.

13. Колосков М.М., Долбенко Е.Т., Каширский Ю.В. и др. *Марочник сталей и сплавов*. М.: Машиностроение, 2001. 672 с.

14. Гарбер Э.А. *Станы холодной прокатки (теория, оборудование, технология)*. М.: Черметинформация, 2004. 416 с.

Информация об авторах

И. Д. Поспелов – кандидат технических наук, доцент Череповецкого государственного университета.

Д. В. Матвеева – магистрант Череповецкого государственного университета.

References

1. GOST 21996–76. Steel cold-rolled heat-treated strip. Technical conditions. (In Russ.).

2. Zhi-Ping, W. & Deng, G. (2012). Cold rolling process of 5Cr15MoV martensite stainless steel. *Journal of north university of China*, 33(3), 350–352.

3. Nefedov, D. V., Telegin, V. E., Miyanov, A. G., Rozhkov, S. V. & Boroxovich, I. M. (2019). Aspekty kachestva i tehnologii proizvodstva patentirovannoj vy`sokoprochnoj upakovochnoj lenty. *Stal*, (6), 30–33. (In Russ.).

4. Shamsher, S. B., Narender, M. S. & Rajendra, M. B. (2017). Optimization of lead patenting process for high carbon steel wires. *Proceeding of the national academy of science, India section A: Physical science*, 87, 267–278.

5. Borisenko, A. Yu., Lucenko, V. A., Lucenko, O. V., Kurenkova, T. P., Seregina, E. S. & Demidov, A. V. (2011). Struktura i svojstva

patentirovannoj vy`sokouglerodistoj provoloki. *Litiya i Metallurgiya*, (1), 85–89. (In Russ.).

6. Atsuki, O. (1989). Graphite formation in high-purity cold-rolled carbon steels. *Metallurgical transactions*, 20A, 1917–1925.

7. Rubin, P., Larker, R., Navara, E. & Antti, M.-L. (2018). Graphite formation and dissolution in ductile irons and steels having high silicon contents: solid-state transformation. *Metallography, microstructure and analysis*, 7, 587–595.

8. Inam, A., Brydson, R. & Edmonds, D. V. (2015). Effect of starting microstructure upon the nucleation sites and distribution of graphite particles during a graphitising anneal of an experimental medium-carbon machining steel. *Materials characterization*, 106, 86–92.

9. Tomotaka, H., Kota, S., Kaoru, S., Toru, H. & Kazuhiro, A. (2021). TTP Diagrams of Graphitization of Creep Ruptured Carbon Steels and 0.5Mo Steel. *ISIJ International*, 61(11), 2822–2831.

10. Kovalenko, N. D. & Ivanov, A. M. (2017). Vliyaniye kombinirovannoj deformacionnoj obrabotki i otzhiga na mexanicheskie svojstva i mexanizm razrusheniya nizkouglerodistoj stali. *Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedeniya (Basic Problems of Material Science (BPMS))*, 14(1), 39–43. (In Russ.).

11. Gulyayev, A. P. (1986). *Metallovedeniye*. М.: Metallurgiya. P. 544. (In Russ.).

12. Ostapenko, N. N. & Kropivniczkij, N. N. (1970). *Texnologiya metallov*. М.: Vy`sshaya shkola. P. 344. (In Russ.).

13. Koloskov, M. M., Dolbenko, E. T. & Kashirskij, Yu. V. i dr. (2001). *Marochnik stalej i spлавov*. М.: Mashinostroenie. P. 672. (In Russ.).

14. Garber, E. A. (2004). *Stany` xolodnoj prokatki (teoriya, oborudovanie, tehnologiya)*. М.: Chermetinformatsia. P. 416. (In Russ.).

Information about the authors

I. D. Pospelov – Candidate of Technical Sciences, Associate Professor at Cherepovets State University.

D. V. Matveeva – Undergraduate Student at Cherepovets State University.

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.
The authors declare that there is no conflict of interest.

Статья поступила в редакцию 04.04.2024; одобрена после рецензирования 29.04.2024; принята к публикации 02.05.2024.

The article was received by the editorial board on 04 Apr. 24; approved after reviewing 29 Apr. 24; accepted for publication 02 May 24.

Научная статья

2.6.1. Металловедение и термическая обработка металлов и сплавов (технические науки)

УДК 621.791:621.771

doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2024.02.014

ОЦЕНКА ВЛИЯНИЯ РЕЖИМОВ ТЕРМИЧЕСКОЙ ОБРАБОТКИ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ОТРИЦАТЕЛЬНЫХ ТЕМПЕРАТУР НА МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА СТАЛИ ШХ15. ЧАСТЬ II: ВЛИЯНИЕ РЕЖИМОВ ТЕРМООБРАБОТКИ НА СТРУКТУРНО-ФАЗОВОЕ СОСТОЯНИЕ И МИКРОСТРУКТУРУ

**Сергей Анатольевич Земляков¹, Михаил Николаевич Зенин^{2†}, Сергей Геннадьевич Иванов³,
Михаил Алексеевич Гурьев⁴, Евгения Владимировна Черных⁵,
Алексей Михайлович Гурьев⁶, Денис Игоревич Зюзин⁷**

¹ ООО УК «Алтайский завод прецизионных изделий», пр. Космонавтов, 6/2, 656023, Барнаул

^{1, 2, 3, 4, 5, 6, 7} Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова, пр. Ленина, 46, 656038, Барнаул, Россия

^{1, 3, 4, 6} Уханьский текстильный университет, ул. Фангжи, 1, 430073, Ухань, КНР

⁴ Чжэцзян Бриллиант Холодильное Оборудование Ко., ООО, Руао Промышленный парк, Синчан, провинция Чжэцзян, 312500, КНР

¹ kobalt_20@mail.ru

² Mikhail.zenin.96@mail.ru[†]

³ serg225582@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-5965-0249>

⁴ gurievma@mail.ru[†], <https://orcid.org/0000-0002-9191-1787>

⁵ jane_5@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-1128-8471>

⁶ gurievam@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-7570-8877>

⁷ denis.physic96@gmail.com

Аннотация. Наличие остаточного аустенита нежелательно в случае изготовления из стали ШХ15 деталей прецизионного назначения в силу того, что при эксплуатации неизбежно его превращение в мартенсит, следствием которого является изменение геометрических размеров деталей, что в итоге может привести к заклиниванию прецизионных пар, либо образованию трещин и выходу из строя прецизионного узла или агрегата. В настоящем исследовании показано изменение структурно-фазового состояния и микроструктуры закаленной конструкционной стали ШХ15 в зависимости от режима температуры отпуска и обработки холодом. Установлено, что стимуляция мартенситного превращения путем обработки холодом либо криогенной обработки приводит к дроблению аустенитных включений, незначительно снижая при этом общее содержание остаточного аустенита. Размер карбидных включений в случае обработки холодом либо криогенной обработки можно считать инвариантным, при этом общее количество частиц карбидных выделений увеличивается в 6,5 и в 8,4 раза соответственно в случае обработки холодом при $-60\text{ }^{\circ}\text{C}$ и криогенной обработке при $-196\text{ }^{\circ}\text{C}$ по сравнению с традиционной термической обработкой.

Ключевые слова: конструкционная подшипниковая сталь ШХ15, термическая обработка, микроструктура, временное сопротивление, ударная вязкость, твердость, аустенит, мартенсит.

Для цитирования: Земляков С.А., Зенин М.Н., Иванов С.Г., Гурьев М.А., Черных Е.В., Гурьев А.М., Зюзин Д.И. Оценка влияния режимов термической обработки с использованием отрицательных температур на механические свойства стали ШХ15. Часть II: влияние режимов термообработки на структурно-фазовое состояние и микроструктуру // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. 2024. Т. 21, № 2. С. 254–262. doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2024.02.014.

Original article

ASSESSMENT OF THE INFLUENCE OF HEAT TREATMENT MODES USING NEGATIVE TEMPERATURES ON THE MECHANICAL PROPERTIES OF ShKh15 STEEL.
PART II: THE INFLUENCE OF HEAT TREATMENT MODES ON THE STRUCTURAL-PHASE STATE AND MICROSTRUCTURE

Sergey A. Zemlyakov¹, Mikhail N. Zenin^{2†}, Sergey G. Ivanov³, Mikhail A. Guryev⁴,
Evgeniya V. Chernykh⁵, Alexey M. Guryev⁶, Denis I. Ziuzin⁷

¹ LLC UK «Altai Precision Products Plant», Cosmonauts Str., 6/2, Barnaul, 656023, Russia

^{1, 2, 3, 4, 5, 6, 7} I.I. Polzunov Altai State Technical University, Lenin Pr., 46, Barnaul, 656038, Russia

^{1, 3, 4, 6} Wuhan Textile University, Fangzhi Road, 1, Wuhan, 430073, China

⁴ Zhejiang Brilliant Refrigeration Equipment Co., Ltd., Ruao Industry Park, Xingchang, Zhejiang Province, 312500, China

¹ kobalt_20@mail.ru

² mikhail.zenin.96@mail.ru†

³ serg225582@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-5965-0249>

⁴ guriyevma@mail.ru†, <https://orcid.org/0000-0002-9191-1787>

⁵ jane_5@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-1128-8471>

⁶ guriyam@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-7570-8877>

⁷ denis.physic96@gmail.com

Abstract. The presence of retained austenite is undesirable in the case of manufacturing precision parts from ShKh15 steel due to the fact that during operation its transformation into martensite is inevitable, which results in a change in the geometric dimensions of the parts, which ultimately can lead to jamming of precision pairs, or the formation of cracks and failure building a precision unit or assembly. This study shows the change in the structural-phase state and microstructure of hardened structural steel ShKh15 depending on the temperature regime of tempering and cold treatment. It has been established that stimulation of martensitic transformation by cold treatment or cryogenic treatment leads to fragmentation of austenite inclusions, while slightly reducing the total content of retained austenite. The size of carbide inclusions in the case of cold treatment or cryogenic treatment can be considered invariant, while the total number of particles of carbide precipitates increases by 6.5 and 8.4 times, respectively, in the case of cold treatment at -60 °C and cryogenic treatment at -196 °C compared to traditional heat treatment.

Keywords: structural bearing steel ShKh15, heat treatment, microstructure, tensile strength, impact strength, hardness, austenite, martensite.

For citation: Zemlyakov, S. A., Zenin, M. N., Ivanov, S. G., Guryev, M. A., Chernykh, E. V., Guryev, A. M. & Ziuzin, D. I. (2024). Estimation of the influence of heat treatment modes using negative temperatures on the mechanical properties of ShKh15 steel. Part II: the influence of heat treatment modes on the structural-phase state and microstructure. *Fundamental'nye problemy sovremennoy materialovedeniya (Basic Problems of Material Science (BPMS))*, 21(2), 254–262. (In Russ.). doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2024.02.014.

Введение

Актуальность и необходимость проведения данного исследования представлены в первой части работы [1], там же представлены режимы термической обработки (ТО). В данной работе приводятся результаты исследования структурно-фазового состояния и микроструктурного анализа термообработанных по соответствующим режимам образцов.

Методика

Металлографические темплеты вырезались при помощи прецизионного отрезного металлографического станка «MICRACUT–201», вырезанные темплеты запрессовывались в бакелитовый компаунд на металлографическом прессе

«МЕТАПРЕСС-Р». Шлифовку и полировку осуществляли на автоматическом шлифовально-полировальном станке «DIGIPREP» с применением алмазных шлифовальных кругов зернистостью 54, 30, 15, 6 мкм. Полировку осуществляли на сукнах «МЕТ-FOKS» и «МЕТ-Мамба» при помощи алмазных монокристаллических суспензий зернистостью 3, 1, 0,5, 0,2 мкм. Суперфинишную полировку осуществляли кислой суспензией «МЕТ-OPS» зернистостью 0,05 мкм.

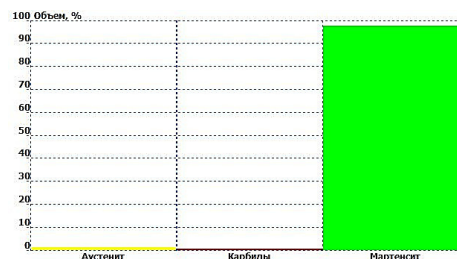
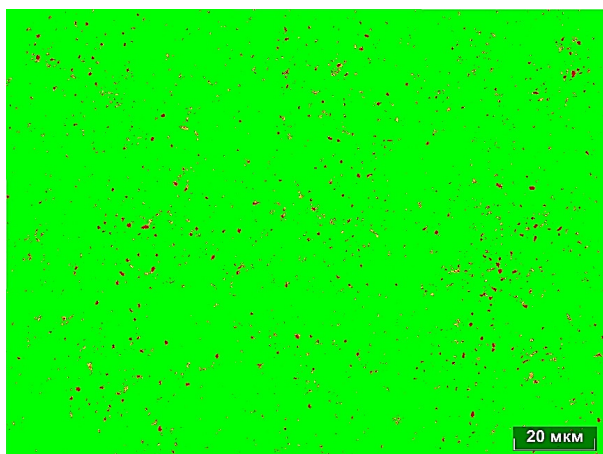
Травление для определения структурно-фазового состояния осуществляли реактивом Бераха (I) а также реактивом Бераха «10/3», для определения содержания остаточного аустенита осуществляли последовательное травление реактивом Бераха «сульфамин-I», затем – реактивом Гроесбека. Анализ структурно-фазового

состояния и структурных составляющих осуществляли при помощи программного комплекса «Thixomet PRO» по методикам [2-6].

Результаты и обсуждение

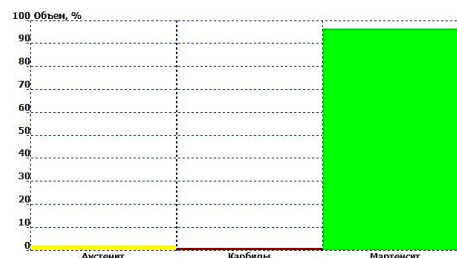
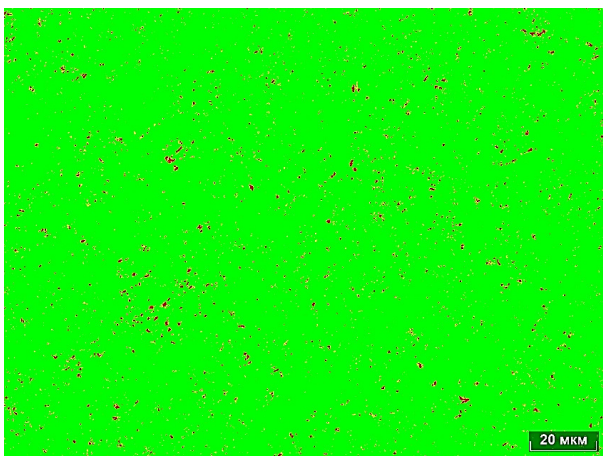
Как видно из представленных на рисунке 1 результатов анализа содержания остаточного

аустенита, его наименьшее содержание (1,06 об. %) наблюдается в случае термообработки по режиму № 4 – закалка с 845 °С, обработка холодом -60 °С, 24 ч, отпуск 260 °С, 2 ч. Во всех остальных случаях содержание остаточного аустенита находится в пределах от 1,44 об. % до 2,21 об. %.



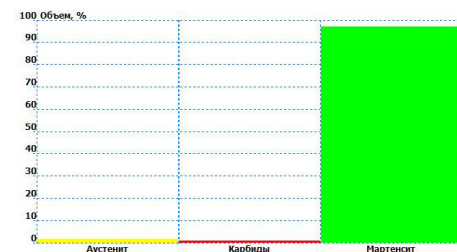
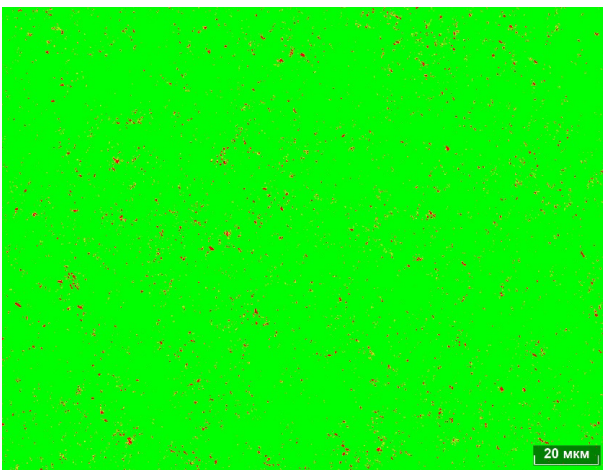
Фаза	Объем, %
Карбиды	0,69
Мартенсит	97,88
Аустенит	1,44

Режим № 1: Закалка с 845 °С, отпуск 170 °С, 2 ч



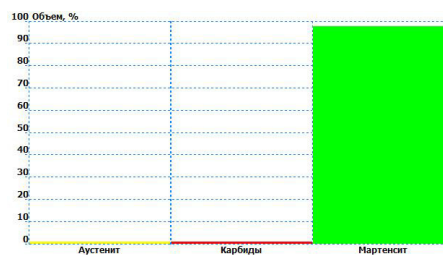
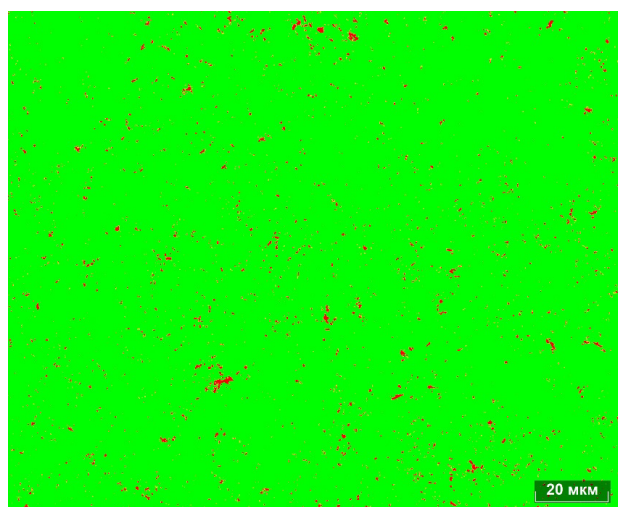
Фаза	Объем, %
Карбиды	1,10
Мартенсит	96,69
Аустенит	2,21

Режим № 2: Закалка с 845 °С, отпуск 260 °С, 2 ч



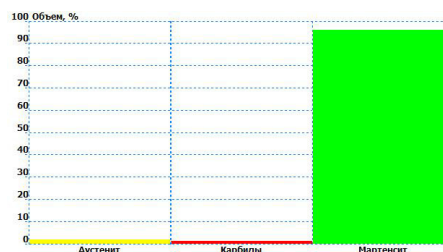
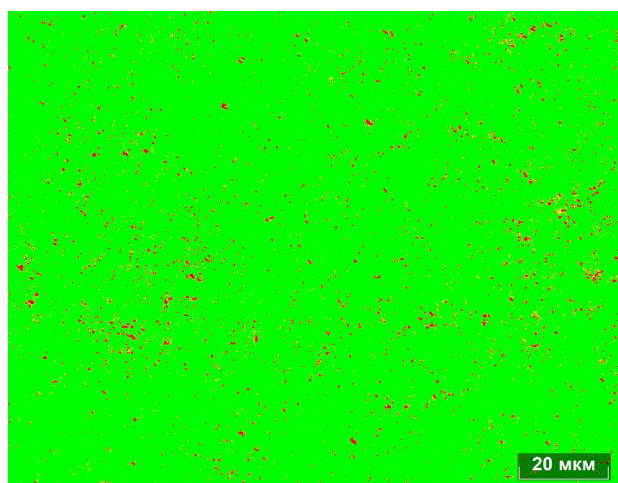
Фаза	Объем, %
Карбиды	1,13
Мартенсит	97,18
Аустенит	1,68

Режим № 3: Закалка с 845 °С, обработка холодом -60 °С, 24 ч, отпуск 170 °С, 2 ч



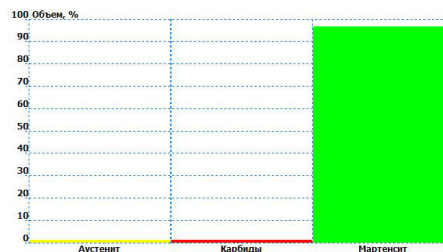
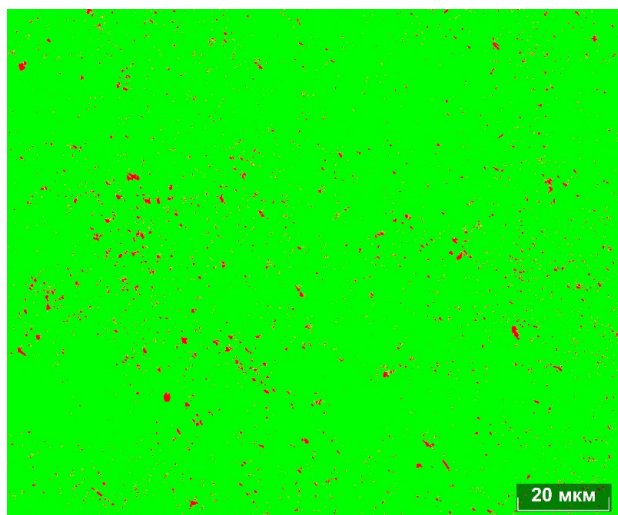
Фаза	Объем, %
Карбиды	1,17
Мартенсит	97,77
Аустенит	1,06

Режим № 4: Закалка с 845 °С, обработка холодом -60 °С, 24 ч, отпуск 260 °С, 2 ч



Фаза	Объем, %
Карбиды	1,40
Мартенсит	96,41
Аустенит	2,20

Режим № 5: Закалка с 845 °С, криогенная обработка -196 °С, 24 ч, отпуск 170 °С, 2 ч



Фаза	Объем, %
Карбиды	1,47
Мартенсит	97,02
Аустенит	1,51

Режим № 6: Закалка с 845 °С, криогенная обработка -196 °С, 24 ч, отпуск 260 °С, 2 ч

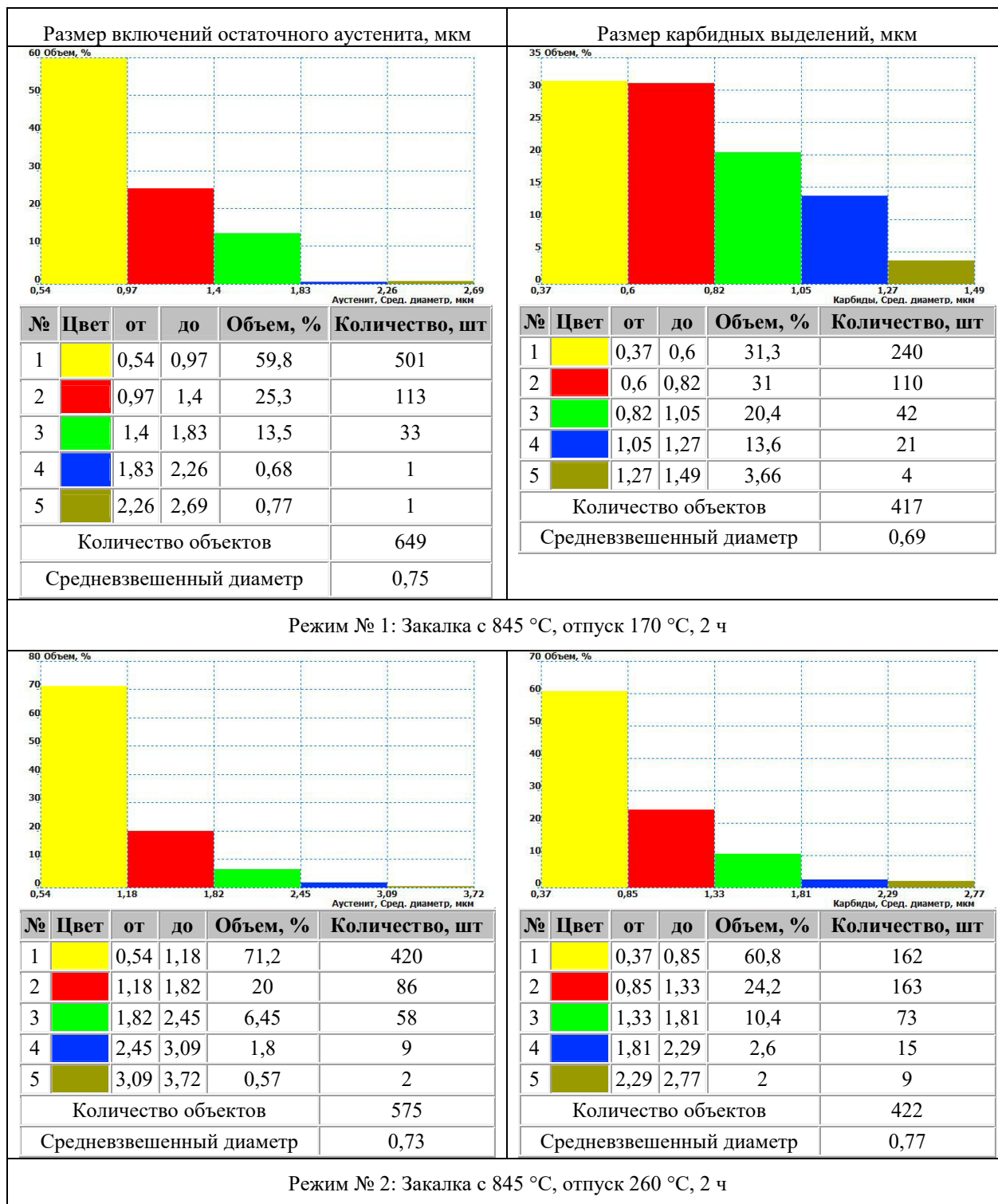
Рис.1. Результаты анализа содержания остаточного аустенита в стали ШХ15 в зависимости от режима температуры отпуска и обработки холодом

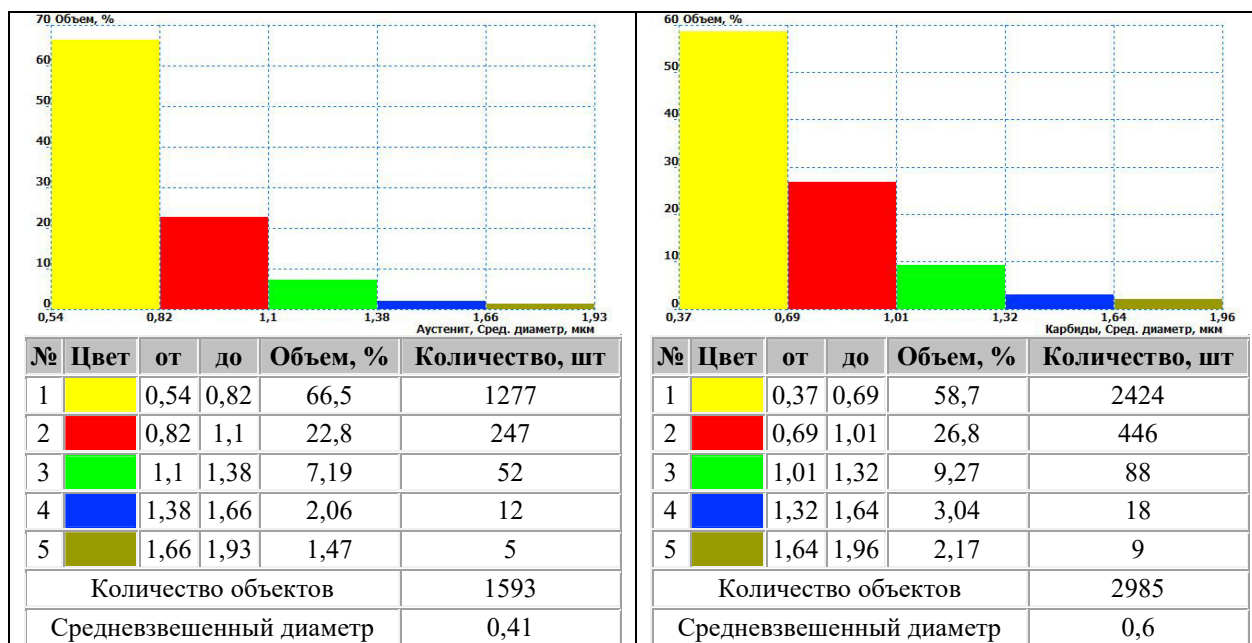
Fig.1. Results of analysis of the content of retained austenite in steel ShKh15 depending on the tempering temperature and cold treatment

Как видно из представленных на рисунке 1 результатов анализа содержания остаточного аустенита, его наименьшее содержание (1,06 об. %) наблюдается в случае термообработки по режиму № 4 – закалка с 845 °С, обработка холодом -60 °С, 24 ч, отпуск 260 °С, 2 ч. Во всех остальных случаях содержание оста-

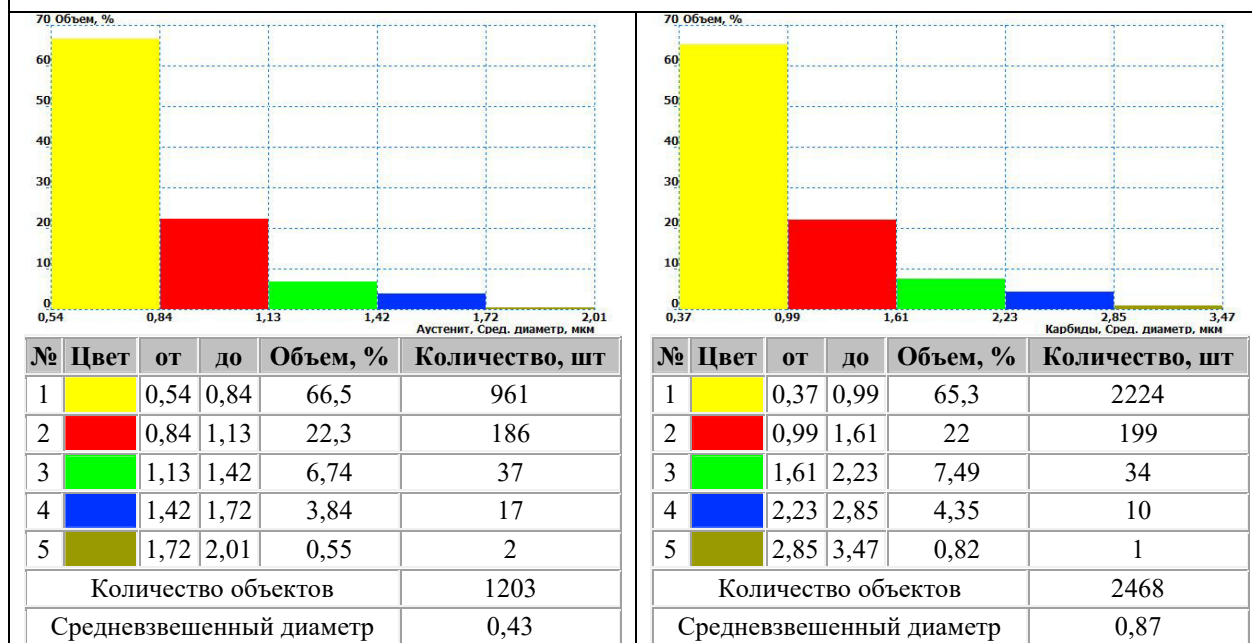
точного аустенита находится в пределах от 1,44 об. % до 2,21 об. %.

Результаты сравнительного анализа среднего приведенного диаметра частиц остаточного аустенита и карбидных выделений представлены на рисунке 2.

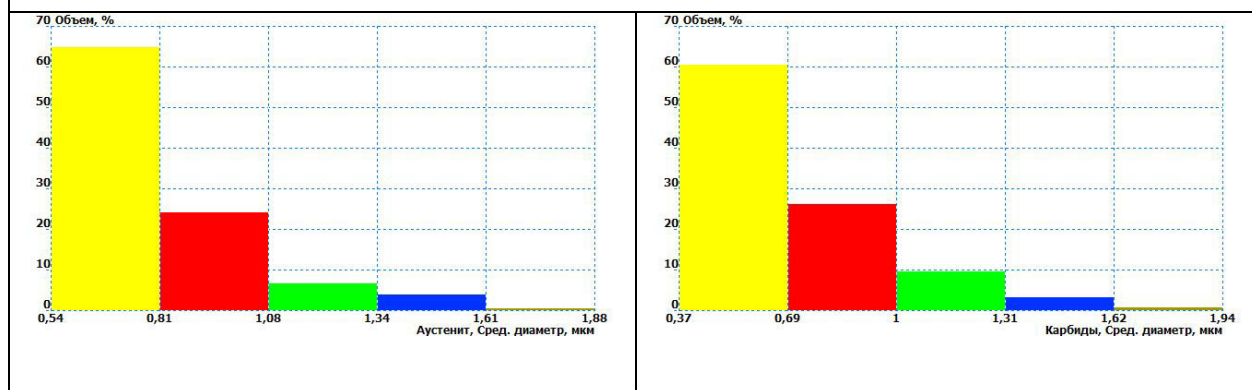




Режим № 3: Закалка с 845 °С, обработка холодом -60 °С, 24 ч, отпуск 170 °С, 2 ч



Режим № 4: Закалка с 845 °С, обработка холодом -60 °С, 24 ч, отпуск 260 °С, 2 ч



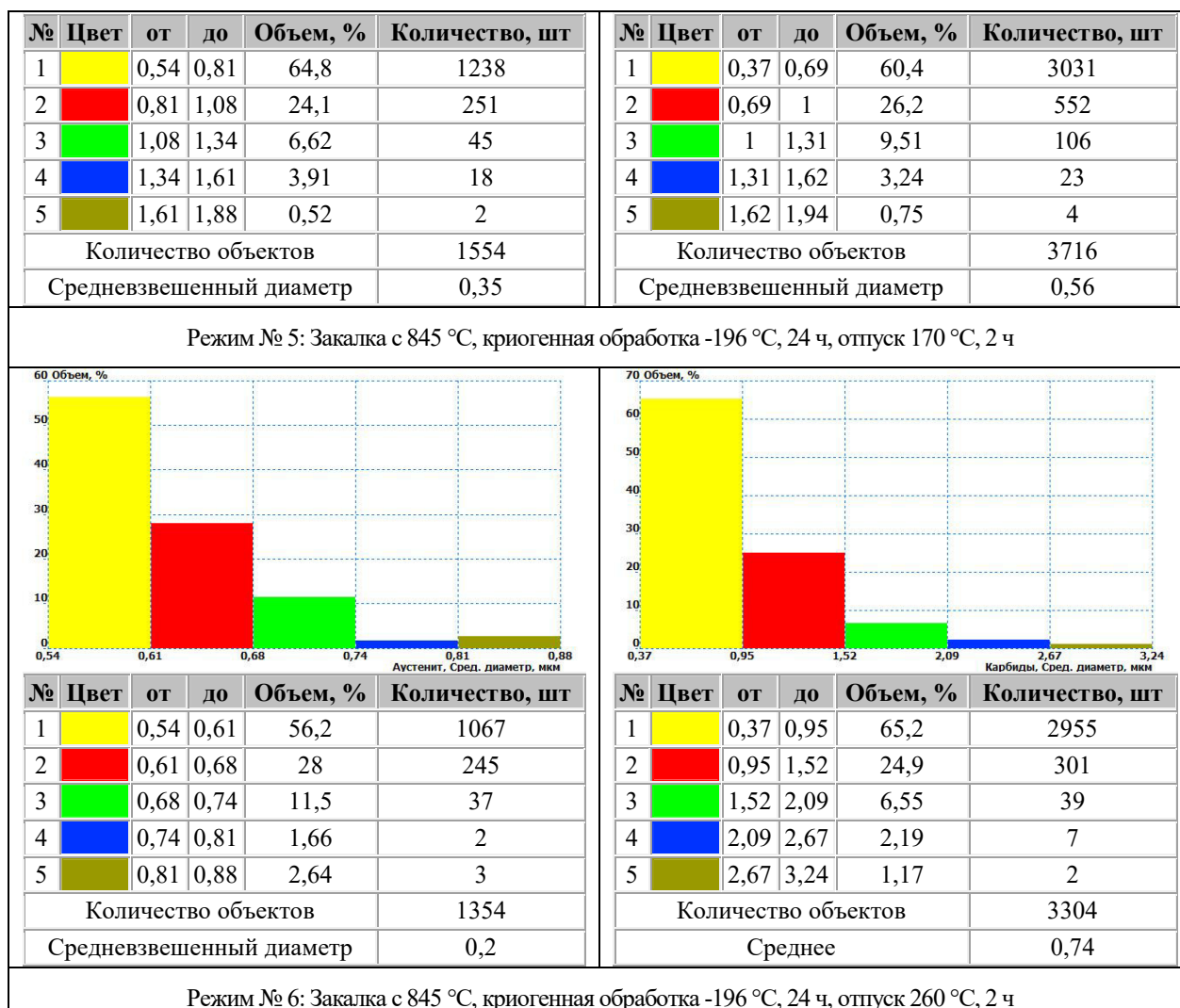


Рис.2. Сравнение средневзвешенных диаметров карбидных и аустенитных включений в стали ШХ15 в зависимости от режима температуры отпуска и обработки холодом

Fig.2. Comparison of weighted average diameters of carbide and austenite inclusions in steel ShKh15 depending on the tempering temperature and cold treatment

Как видно из приведенных на рисунке 2 диаграмм и данных, режим температура отпуска и наличие обработки холодом либо криогенной обработки в значительной степени оказывают влияние прежде всего на размер и содержание аустенитных включений: при традиционной термообработке, заключающейся в закалке и отпуске, средневзвешенный размер аустенитных включений составляет 0,73-0,75 мкм при средневзвешенном количестве аустенитных включений – порядка 46 000 шт/мм². В случае обработки холодом при температуре -60 °С в качестве продолжения процесса закалки, средневзвешенный диаметр аустенитных включений уменьшается до 0,42 мкм, а количество аустенитных включений – увеличивается

до 107 500 шт/мм². В случае замены обработки холодом на криогенную обработку, средневзвешенный размер аустенитных включений уменьшается до 0,28 мкм, тогда как плотность включений незначительно увеличивается до 111 800 шт/мм². При этом повышение температуры отпуска закономерно понижает количество аустенитных включений. Средневзвешенный диаметр карбидных включений при изменении условий термообработки изменяется не так кардинально, оставаясь практически инвариантным к условиям термообработки и незначительно реагируя на температуру отпуска. Однако количество карбидных выделений в случае введения обработки холодом при -60 °С, увеличивается в среднем в 6,5 раза по сравнению

традиционной термообработкой. Замена обработки холодом на криогенную обработку приводит к увеличению плотности частиц выделенных карбидов в 8,4 раза по сравнению с традиционной термообработкой, состоящей из закалки и отпуска.

Заключение

Исходя из проведенного анализа влияния режимов термической обработки на структурно-фазовое состояние стали ШХ15, можно прийти к следующим выводам:

1. Независимо от применяемого режима термообработки, содержание остаточного аустенита регламентируется, прежде всего, температурой нагрева под закалку, а также температурой отпуска.

2. Стимуляция мартенситного превращения путем обработки холодом либо криогенной обработки приводит к дроблению аустенитных включений, незначительно снижая при этом общее содержание остаточного аустенита.

3. Размер карбидных включений в случае стимуляции мартенситного превращения путем обработки холодом либо криогенной обработки можно считать инвариантным, при этом общее количество частиц карбидных выделений увеличивается в 6,5 и в 8,4 раза соответственно в случае обработки холодом при $-60\text{ }^{\circ}\text{C}$ и криогенной обработке при $-196\text{ }^{\circ}\text{C}$ по сравнению с традиционной термической обработкой.

4. Определяющее влияние на комплекс механических свойств (прочность, ударная вязкость и твердость) термообработанной по разным режимам стали ШХ15, согласно анализу механических свойств будет оказывать соотношение между количеством остаточного аустенита и карбидных выделений, а также соотношение их размерных факторов.

5. Исходя из вышеприведенных доводов, логично ввести некий комплексный параметр, определяющий требуемые механические свойства и при этом объединяющий соотношение размеров остаточного аустенита и карбидных выделений, при этом определяемый в свою очередь, через параметры термической обработки.

Список литературы

1. Земляков С.А., Зенин М.Н., Иванов С.Г., Гурьев М.А., Черных Е.В. и др. Оценка влияния

режимов термической обработки с использованием отрицательных температур на механические свойства стали ШХ15. Часть I: влияние режимов термообработки на твердость, прочность и ударную вязкость // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. 2024. Т. 21, № 1. С. 82–90.

2. Иванов С.Г., Гурьев А.М., Земляков С.А., Гурьев М.А., Романенко В.В. Особенности методики подготовки образцов для автоматического анализа карбидной фазы стали Х12Ф1 после цементации в вакууме с применением программного комплекса "Thixomet PRO" // *Ползуновский вестник*. 2020. № 2. С. 165–168.

3. Иванов С.Г., Гурьев А.М., Земляков С.А., Гурьев М.А. Методика пробоподготовки образцов высоколегированных сталей для автоматического анализа карбидной фазы // *Ползуновский вестник*. 2020. № 3. С. 102–105.

4. Иванов С.Г., Гурьев М.А., Гурьев А.М., Романенко В.В. Фазовый анализ боридных комплексных диффузионных слоев на углеродистых сталях при помощи цветного травления // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. 2020. Т. 17, № 1. С. 74–77.

5. Гурьев А.М., Гурьев М.А., Земляков С.А., Иванов С.Г. Выявление особенностей морфологии и фазового состава сталей методами специального металлографического травления // В сб. тезисов XVI Международной школы-семинара «Эволюция дефектных структур в конденсированных средах». 2020. С. 83–84.

6. Гурьев М.А., Иванов С.Г., Алонцева Д.Л., Иванова Т.Г., Гурьев А.М. Взаимосвязь химического состава насыщающей среды и диффузионного покрытия на сталях 45 и 45Л // *Письма о материалах*. 2014. Т. 4, № 3(15). С. 179–181.

Информация об авторах

С. А. Земляков – кандидат технических наук, главный металлург, ООО УК «Алтайский завод прецизионных изделий», Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова, Уханьский текстильный университет.

М. Н. Зенин – аспирант, инженер, младший научный сотрудник Алтайского государственного технического университета им. И.И. Ползунова.

С. Г. Иванов – доктор технических наук, ведущий научный сотрудник, доцент, заведующий лабораторией микроскопии, Алтайский государственный технический университет

им. И.И. Ползунова, Уханьский текстильный университет.

М. А. Гурьев – кандидат технических наук, доцент, Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова, Уханьский текстильный университет, Чжэцзян Бриллиант Холодильное Оборудование Ко., ООО.

Е. В. Черных – кандидат физико-математических наук, доцент Алтайского государственного технического университета им. И.И. Ползунова.

А. М. Гурьев – доктор технических наук, профессор, заведующий кафедрой Алтайского государственного технического университета им. И.И. Ползунова, профессор Уханьского текстильного университета.

Д. И. Зюзин – аспирант Алтайского государственного технического университета им. И.И. Ползунова.

References

1. Zemlyakov, S. A., Zenin, M. N., Ivanov, S. G., Guryev, M. A. & Chernykh, E. V. et al. (2024). Estimation of the influence of heat treatment modes using negative temperatures on the mechanical properties of ShKh15 steel. Part I: the influence of heat treatment modes on hardness, strength and toughness. *Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedeniya (Basic Problems of Material Science (BPMS))*, 21(1), 82–90. (In Russ.).
2. Ivanov, S. G., Gur'yev, A. M., Zemlyakov, S. A., Gur'yev, M. A. & Romanenko, V. V. (2020). Osobennosti metodiki podgotovki obraztsov dlya avtomaticheskogo analiza karbidnoy fazy stali Kh12F1 posle tsementatsii v vakuume s primeneniym programmnoy kompleksa "Thixomet PRO". *Polzunovskiy vestnik*, (2), 165–168. (In Russ.).
3. Ivanov, S. G., Gur'yev, A. M., Zemlyakov, S. A. & Gur'yev, M. A. (2020). Metodika probopodgotovki obraztsov vysokolegirovannykh staley dlya avtomaticheskogo analiza karbidnoy fazy. *Polzunovskiy vestnik*, (3), 102–105. (In Russ.).
4. Ivanov, S. G., Gur'yev, M. A., Gur'yev, A. M. & Romanenko, V. V. (2020). Fazovyy analiz

boridnykh kompleksnykh diffuzionnykh sloyev na uglerodistykh stalyakh pri pomoshchi tsvetnogo travleniya. *Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedeniya (Basic Problems of Material Science (BPMS))*, 17(1), 74–77. (In Russ.).

5. Gur'yev, A. M., Gur'yev, M. A., Zemlyakov, S. A. & Ivanov, S. G. (2020). Vyyavleniye osobennostey morfologii i fazovogo sostava staley metodami spetsial'nogo metallograficheskogo travleniya. *V sb. tezisov XVI Mezhdunarodnoy shkoly-seminara «Evolutsiya defektnykh struktur v kondensirovannykh sredakh»*, 83–84. (In Russ.).

6. Gur'yev, M. A., Ivanov, S. G., Alontseva, D. L., Ivanova, T. G. & Gur'yev, A. M. (2014). Vzaimosvyaz' khimicheskogo sostava nasyshchayushchey sredy i diffuzionnogo pokrytiya na stalyakh 45 i 45L. *Pis'ma o materialakh*, 4(3(15)), 179–181. (In Russ.).

Information about the authors

S. A. Zemlyakov – Candidate of Technical Sciences, Chief Metallurgist, LLC UK «Altai Precision Products Plant», I.I. Polzunov Altai State Technical University, Wuhan Textile University.

M. N. Zenin – Graduate Student, Engineer, Junior Researcher, I.I. Polzunov Altai State Technical University.

S. G. Ivanov – Doctor of Technical Sciences, Chief Researcher, Associate Professor, Head of the Laboratory of Microscopy, I.I. Polzunov Altai State Technical University, Wuhan Textile University.

M. A. Guryev – Candidate of Technical Sciences, Assistant professor, I.I. Polzunov Altai State Technical University, Wuhan Textile University, Zhejiang Brilliant Refrigeration Equipment Co., Ltd.

E. V. Chernykh – Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Assistant professor, I.I. Polzunov Altai State Technical University.

A. M. Guryev – Doctor of Technical Sciences, Professor, Head of department, I.I. Polzunov Altai State Technical University, Wuhan Textile University.

D. I. Ziuzin – Graduate Student, I.I. Polzunov Altai State Technical University.

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.
The authors declare that there is no conflict of interest.

Статья поступила в редакцию 04.04.2024; одобрена после рецензирования 29.04.2024; принята к публикации 02.05.2024.

The article was received by the editorial board on 04 Apr. 24; approved after reviewing 29 Apr. 24; accepted for publication 02 May 24.

Отпечатано в типографии АлтГТУ. Адрес: 656038, Алтайский край, г. Барнаул, пр. Ленина, д. 46

Сдано в набор 19.06.2024 г. Подписано в печать 25.06.2024 г. Дата выхода в свет 28.06.2024 г.
Формат 60x84 1/8 Бумага офсет Гарнитура Таймс Печать цифровая
Усл. печ. л. 14,88 / Тираж 250 экз. Заказ № 67