

# ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА АТОМНО-ДИСКРЕТНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ К ПРОГНОЗИРОВАНИЮ МЕХАНИЧЕСКИХ СВОЙСТВ СПЛАВОВ АУСТЕНИТНОГО КЛАССА

**М. А. Баранов, В. М. Щербаков, Е. В. Черных, В. В. Романенко**  
Алтайский государственный технический университет им. И. И. Ползунова,  
г. Барнаул, Россия

*Выполнено атомно-дискретное моделирование равновесного состояния  $\gamma$ -фазы аустенитных сплавов сложного химического состава. Хаотическое размещение атомов различного сорта по узлам решётки модельного блока имитирует таковое в неупорядоченном многокомпонентном кристалле. Несимметричное окружение каждого из атомов приводит к тому, что их равновесные положения оказываются смещёнными относительно геометрически правильных положений узлов, а сам кристалл превращается в объёмный дефект. Для набора из ~30 промышленно выпускаемых сплавов установлены корреляционные зависимости между измеряемыми показателями их механических свойств (МС) и усреднёнными вычисляемыми параметрами  $\gamma$ -фазы модельного блока – энергии связи и степени искажённости решётки. Графическое представление корреляционных функций позволяет прогнозировать МС сплавов в пределах рассматриваемого класса сплавов и открывает возможность программировать составы сплавов в зависимости от заданного набора МС.*

Создание сталей и сплавов с заранее заданным комплексом механических свойств (МС) представляет собой одну из важнейших задач материаловедения. Основными способами управления МС сплавов является варьирование их химического состава и режимов термообработки. Эмпирические методы поиска химического состава и режимов термообработки в сочетании с методом проб и ошибок являются самыми надёжными и необходимыми, но в то же время и самыми затратными и длительными. Поэтому хотя бы на начальной стадии прогнозирования МС было бы желательно применять другие, менее затратные и эффективные методы.

Компьютерные методы прогнозирования доказали свою эффективность практически во всех областях человеческой деятельности. Не является исключением и материаловедение. Прямой расчёт показателей МС предполагает компьютерную имитацию на атомном уровне механического испытания, соответствующего данному МС. Для многофазного многокомпонентного поликристаллического образца макроскопических размеров такая задача невыполнима. Но и прямое эмпирическое установление взаимосвязей типа состав-свойство [1–3] оказывается эффективным лишь в узких диапазонах концентраций. В этой связи для целей прогнозирования МС сталей и сплавов имеет смысл объединить возможности уже зарекомендовавших себя методов атомно-дискретного моделирования, эмпирические знания [4–5] и бесценную информацию о МС уже созданных материалов [6–7].

Поскольку любое МС представляет собой отклик материала в виде пластической деформации на тот или иной вид механического испытания, то в первую очередь «откликнуться» на внешнее воздействие должны кристаллы фазы, наиболее склонной к пластической деформации. Таковыми являются высокосимметричные кристаллы с большим числом систем скольжения. Как правило, это  $\alpha$  или  $\gamma$  фаза. С учётом преобладающей доли этой фазы в составе сплава её влияние на МС становится очевидным. Поскольку подвижность дислокаций в искажённом кристалле ограничена по сравнению с подвижностью в совершенном кристалле, то и прочностные свойства материала, содержащего в своем объёме искажённые кристаллы должны быть более высокими.

Под микросостоянием неупорядоченного многокомпонентного кристалла будем пони-

мать совокупность координат и сортов атомов его образующих. Макросостояние этого же кристалла – это совокупность усреднённых по его объёму параметров. Очевидно, что одному и тому же макросостоянию соответствует гигантское число микросостояний [8]. Аналогично, под макросостоянием материала в целом будем понимать совокупность количественных параметров, усреднённых по его объёму – фазовый и химический состав, дисперсность фаз, характер их распределения по объёму и др. Очевидно, что под влиянием всех этих факторов и формируются МС материала. Поскольку измерить МС уже изготовленного материала сравнительно легко, то их правомерно рассматривать как измеряемые параметры его состояния.

Особенностью многокомпонентных неупорядоченных кристаллов является то, что они искажены не столько в результате наклёпа, который, как правило, снимается на окончательной стадии обработки (заковки, нормализации, отжига), сколько вследствие хаотического размещения атомов по узлам решётки. Несимметричное окружение каждого из атомов приводит к тому, что их равновесные положения оказываются смещёнными относительно геометрически правильных положений узлов, а решётка в целом искажённой. Это позволяет рассматривать многокомпонентный неупорядоченный кристалл как объёмный дефект. Поскольку основная фаза, безусловно, должна оказывать влияние на состояние материала в целом, то в качестве исходного предположения дальнейшего исследования было принято: «механические свойства стали или сплава определяются, главным образом, состоянием кристаллической решётки его основной фазы». Подтверждением данного предположения могло бы стать установление корреляционной зависимости между экспериментально измеренными показателями МС реальных сплавов и рассчитанными параметрами состояния основной фазы.

Базовый набор был составлен из сплавов аустенитного класса, то есть низкоуглеродистых сплавов на основе никеля. Состав  $\gamma$  фазы полагался таким же как и состав сплава в целом. Микросостояние  $\gamma$  фазы воссоздавалось для модельного блока размером 15x15x15 элементарных ГЦК ячеек

[9]. Взаимодействия между атомами произвольного сорта определялись по методике, изложенной в [10]. В качестве параметров макро-состояния  $\gamma$  фазы рассматривалась степень искажённости кристалла и среднее значение энергии связи  $E_{CB}$  в расчёте на атом. За количественную меру степени искажённости принималась среднее значение смещения  $S_m$  атомов относительно положений узлов идеальной решётки. Параметры  $S_m$  и  $E_{CB}$   $\gamma$  фазы рассчитывались как результат усреднения для четырёх различных микросостояний модельного блока. Рассчитанные и измеренные [7] величины сопоставляются в таблице 1, а проекция одного из микросостояний сплава ХН65КВМЮТБ-ВД на плоскость куба представлена на рисунке 1. Вид корреляционной функции, связывающей показатели МС с вычисляемыми параметрами  $\gamma$ -фазы выбирался одинаковым для всех МС.

$$MC(S_m, E_{CB}) = p_0 + p_1 E_{CB} S_m + p_2 E_{CB} + p_3 S_m \quad (1)$$

Значения параметров  $p_0, p_1, p_2, p_3$  для рассматриваемого класса сталей подбирались из условия максимальной близости набора значений, рассчитанных по формуле (1) к соответствующему экспериментальному набору. Значения коэффициентов  $p_1, p_2, p_3, p_4$  для каждого механического свойства в соответствующих единицах измерения приводятся в таблице 2, а рассчитанные значения показателей МС – также в таблице 1 в качестве знаменателя.

Из таблицы 1 видно, более близкими к эксперименту оказываются аппроксимированные значения предела текучести и твердости. И это не удивительно, поскольку при измерении этих МС испытания заканчиваются на начальной стадии пластической деформации, то есть, когда она протекает вследствие скольжения дислокаций. Измерение же предела прочности и относительного удлинения проводится вплоть до разрушения образца, то есть, когда образец деформируется за счёт роста трещин. Влияние искажённости решётки на последнем этапе испытания оказывается незначительным.

Графическое представление МС с помощью функций вида (1) выполнено на рисунке 2 в виде номограмм – линий постоянных значений в одинаковом масштабе  $S_m$  и  $E_{CB}$ .

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА АТОМНО-ДИСКРЕТНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ  
К ПРОГНОЗИРОВАНИЮ МЕХАНИЧЕСКИХ СВОЙСТВ СПЛАВОВ АУСТЕНИТНОГО КЛАССА

Таблица 1 – Показатели МС – предела текучести  $\sigma_{02}$ , предела прочности  $\sigma_B$ , относительного удлинения  $\delta$ , твердости НВ (эксперимент/аппроксимация) и рассчитанные значения энергии связи  $E_{CB}$  и степени искажённости  $S_m$  сплавов аустенитного класса

№	Марка стали	$\sigma_{02}$ , МПа	$\sigma_B$ , МПа	$\delta$ , %	НВ	$E_{CB}$ , эВ/атом	$S_m$ , Å
1	03X23H28Ю4Т	490/541	216/207	30/25	-/181	4,295	0,039
2	06ХН46Б	535/570	206/205	28/26	159/193	4,381	0,041
3	06ХН28МДТ	540/586	216/231	33/25	200/200	4,388	0,044
4	ХН65ВМТЮЛ	581/758	461/447	14/17	-/279	4,547	0,072
5	ХН75ВМЮ	588/824	-/556	6/12	288/310	4,554	0,085
6	ХН78Т	588/581	196/196	27/27	200/197	4,427	0,041
7	ХН45Ю	590/612	215/285	15/23	-/213	4,378	0,050
8	ХН70ВМТЮФ	590/843	-/616	6/9	320/320	4,520	0,091
9	ХН15Н60-Н	645/645	264/230	20/27	-/223	4,555	0,048
10	ХН35ВТК	650/662	350/356	15/20	236/236	4,415	0,059
11	Х20Н80	656/625	-/191	23/28	-/214	4,550	0,044
12	ХН70ВМТЮ	670/841	-/605	3/10	320/319	4,532	0,090
13	ХН70БДТ	680/671	280/387	33/19	-/241	4,393	0,062
14	05ХН46МВБЧ	686/742	343/434	30/18	-/272	4,521	0,070
15	ХН60КВМЮТБЛ	700/696	500/454	3/16	-253	4,361	0,069
16	ХН60Ю	720/610	360/274	50/24	-/211	4,389	0,049
17	ХН35ВТР	750/686	400/400	20/19	-/247	4,416	0,064
18	ХН60ВТ	750/810	-/540	30/13	-/304	4,542	0,083
19	03X25H25ЮТЛ	770/545	-/223	-24	-183	4,292	0,040
20	ХН65ВКМБЮТЛ	784/842	-/665	3/8	-/321	4,451	0,095
21	ХН64ВМКЮТЛ	800/915	700/798	3/2	-/356	4,458	0,110
22	ХН60КВМЮТЛ	833/843	735/700	3/7	-/322	4,403	0,098
23	ХН80ТБЮА	833/670	441/351	20/21	-/239	4,443	0,059
24	ХН65КВЮТБ	-/838	-/643	-/8	285/319	4,469	0,093
25	ХН70КВМЮТЛ	883/883	686/780	3/3	-/342	4,397	0,107
26	ХН65КМВЮБ-ВД	900/848	600/607	11/10	-/322	4,555	0,090
27	ХН60КВЮМБ-ВД	-/924	-/732	-/4	362/359	4,569	0,105
28	ХН67МВТЮ	930/797	550/542	16/13	291/298	4,512	0,082
29	ХН65КМВЮТЛ	930/910	800/768	3/3	-/353	4,484	0,107
30	ХН58ВКМТЮБЛ	950/842	850/667	5/8	-/321	4,451	0,095
31	ХН62МБВЮ	960/898	635/672	22/7	-/345	4,595	0,098
32	ХН70ВМЮТ	980/847	588/630	20/9	-/322	4,518	0,092
33	ХН65КВМЮТБ-ВД	1000/856	655/637	18/9	-/326	4,534	0,093

Таблица 2 – Коэффициенты аппроксимирующих функций (1) для различных МС

Механическое свойство	$p_0$	$p_1$	$p_2$	$p_3$
$\sigma_B$ – предел прочности	-472,00	906,41	194,51	685,88
$\sigma_{02}$ – предел текучести	1248,05	1362,33	-318,95	2727,61
$\delta$ – относительное удлинение	-126,27	-356,91	38,01	1216,64
НВ – твердость	-138,03	656,40	54,67	-648,27

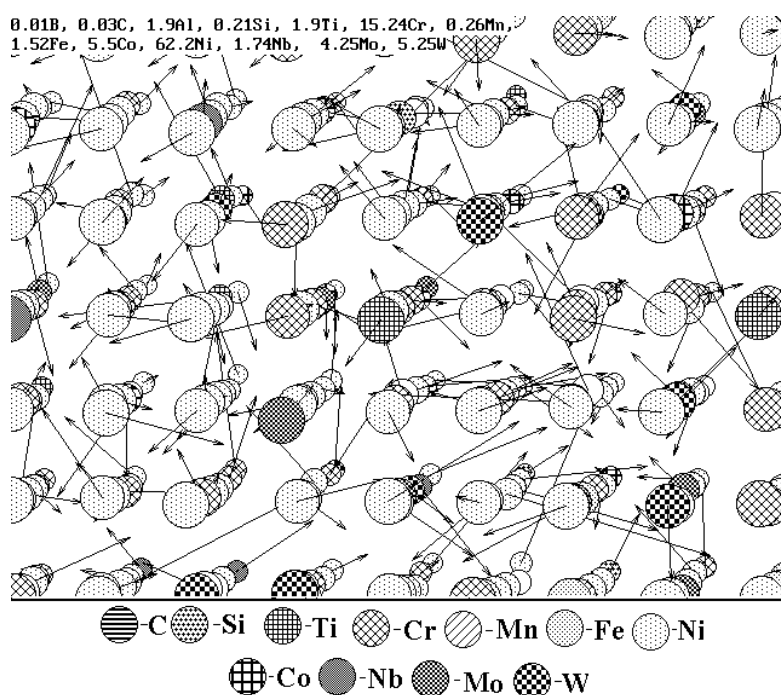


Рисунок 1 – Микросостояние кристалла  $\gamma$ -фазы сплава ХН65КМЮТБ-ВД

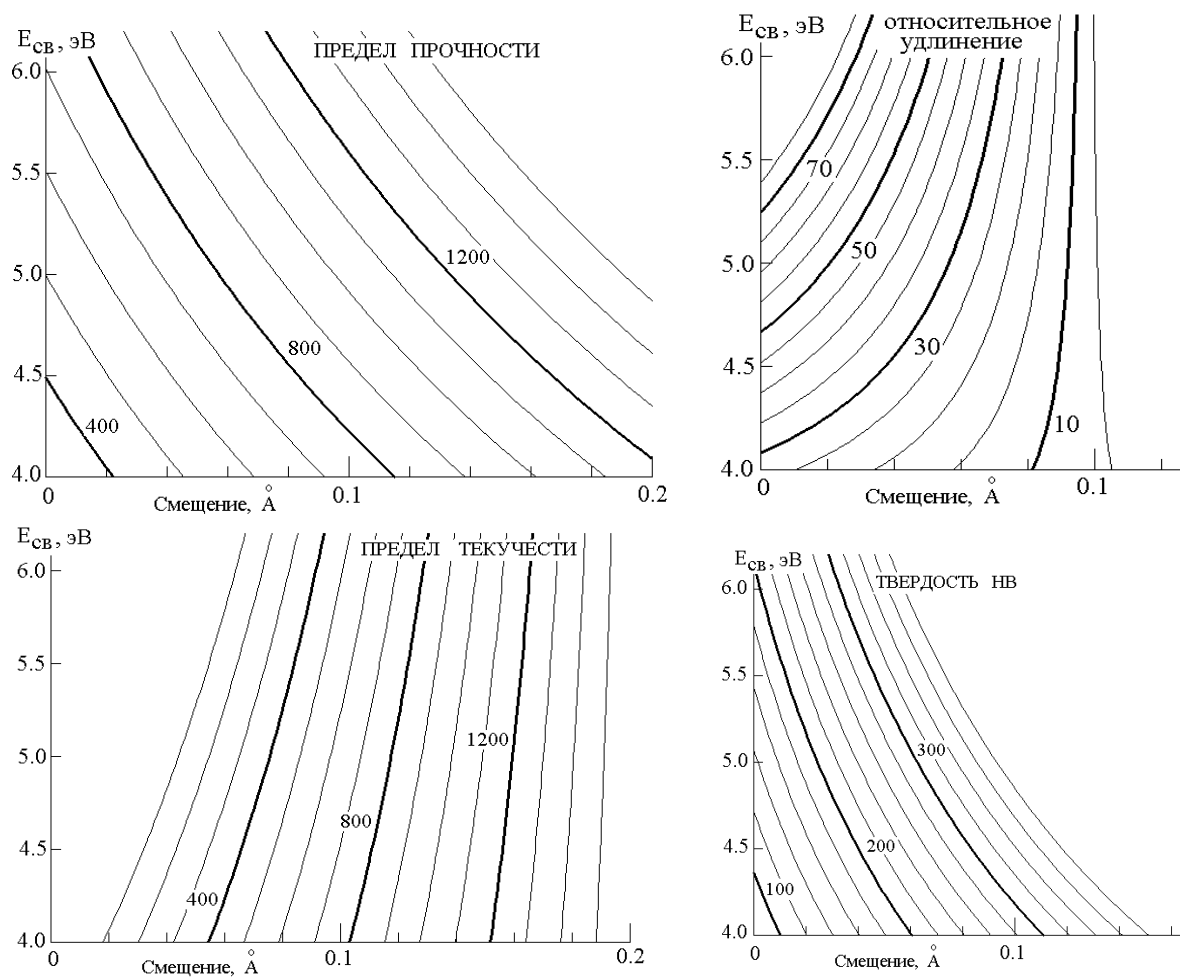


Рисунок 2 – Линии постоянных значений МС сплавов аустенитного класса

## ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА АТОМНО-ДИСКРЕТНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ К ПРОГНОЗИРОВАНИЮ МЕХАНИЧЕСКИХ СВОЙСТВ СПЛАВОВ АУСТЕНИТНОГО КЛАССА

Естественно, что аппроксимирующие функции каждого из МС распространены на более широкий диапазон изменения макропараметров  $\gamma$  фазы, что и отражено на графиках. Из полученных номограмм следует, что МС наиболее чувствительны к изменению степени искажённости решётки  $\gamma$  фазы – любая горизонталь пересекает несколько изолиний. Чувствительность же МС к изменению энергии связи меньшая – например, некоторые из изолиний на номограмме для предела текучести близки к вертикальным. Наклон изолиний зависит от соотношения концентраций элементов внедрения (углерода) и замещения (Cr, Nb, Mo, W) – увеличение концентрации углерода приводит к понижению энергии связи, а концентрации тяжёлых металлов – к её повышению, хотя оба фактора приводят к искажению решётки. В рассматриваемом классе материалов определяющей является концентрация металлов.

Полученные номограммы применимы к определению состава сплава с заранее заданным набором МС. Для этого на каждой из них необходимо выделить полосу, ограниченную парой изолиний, соответствующих минимальному и максимальному пределам изменения МС. Тогда ожидаемые допустимые значения  $E_{CB}$  и  $S_m$ , обеспечивающие требуемый набор МС должны находиться в области пересечения выделенных полос при их взаимном наложении. Подбор химического состава сплава с заданным набором МС должен выполняться путем его варьирования с последующим выполнением моделирования микросостояния так, чтобы соответствующие значения макропараметров оказались в выделенной области. Это вовсе не означает, что пара ( $E_{CB}$ ,  $S_m$ ) соответствует единственному химическому составу. Он может быть различным в зависимости от имеющихся исходных компонент, стоимости и с учетом требований эксплуатации будущей детали.

Таким образом, в предлагаемом методе прогнозирования установлена корреляционная зависимость МС лишь от одного, но основного фактора – фактора преобладающей фазы. В то же время, химические составы фаз в многофазном образце могут существенно отличаться от среднего состава сплава. Кроме того, влияние «второстепенных»

фаз может быть существенным в зависимости от их дисперсности, формы кристаллов, характера распределения по объёму и др. Для более точного прогнозирования МС сплавов необходимо выполнение моделирования микросостояния нескольких фаз и, как следствие, построение другого набора корреляционных функций.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Александров С. В., Хулка К., Степашин А. М., Морозов Ю. Д. Влияние марганца и ниобия на свойства низколегированных сталей. 6-я международная научно-техническая конференция «Современные металлические материалы, технологии их использования в технике». *Металловедение и термообработка металлов*, № 11, 2005, с 17-22.
2. Шпайдель М. О. Новые азотосодержащие аустенитные нержавеющие стали с высокими прочностью и пластичностью. Там же, с. 9-14.
3. Ганеев А. А., Нургаянова О. С. Моделирование зависимости состав-свойство жаропрочных никелевых сплавов многомерным корреляционным сплайном. *Ползуновский альманах*, № 4, 2004, с. 135-137.
4. Гуляев А. П. *Металловедение*. М.: Металлургия, 1977. 647 с.
5. Хоникомб Р. *Пластическая деформация металлов*. М.: Мир, 1972, 408 с.
6. Марочник сталей и сплавов / В. Г. Сорокин, А. В. Волосникова, С. А. Вяткин и др. Под общ. ред. В. Г. Сорокина. М.: Машиностроение, 1989. 640 с.
7. Марочник сталей и сплавов. Под ред. А.С. Зубченко. 2-е изд. М.: Машиностроение, 2003, 783 с.
8. Ч. Киттель. *Статистическая термодинамика*. М.: Наука, 1977, 336 с.
9. Баранов М. А., Щербаков В. М., Черных Е. В., Романенко В. В. Сопоставление механических свойств нормализованных сталей с состоянием их кристаллических решёток. *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. Т.6., № 3, 2009, с. 105-110.
10. Баранов М. А. Сферическая симметрия электронных оболочек атомов и стабильность кристаллов // *Электронный физико-технический журнал*. т. 1. в.1. 2006. С 34-48. <http://eftj.secna.ru/0501/06013r.pdf>.

*Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований проект № 08–08–98007р\_Сибирь и администрации Алтайского края.*