

КОРРЕЛЯЦИЯ МЕХАНИЧЕСКИХ СВОЙСТВ СТАЛЕЙ И СПЛАВОВ АУСТЕНИТНОГО КЛАССА С ПАРАМЕТРАМИ СОСТОЯНИЯ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЁТКИ

Баранов М.А., Щербаков В.М.

Алтайский государственный технический университет им. И.И.Ползунова
e-mail: Baranov183@mail.ru

Аннотация. Исходя из гипотезы о том, что механические свойства сталей и сплавов полностью определяются состоянием материала – фазовым составом, распределением элементов в каждой из фаз, их дисперсностью, границами зёрен и др. – и в предположении, что материал образован одной единственной фазой выполнено моделирование состояния кристаллических решёток γ -фазы 30 промышленно выпускаемых сталей и сплавов аустенитного класса. В качестве рассчитываемых усредненных параметров состояния рассматривались среднеквадратичное смещение атомов относительно узлов идеальной решётки, обусловленное т.н. сортовым беспорядком, энергия связи в расчете на атом, и энергия образования дефекта упаковки. Между этими параметрами и экспериментальными значениями показателей механических свойств рассматриваемых материалов установлены линейные корреляционные зависимости. Соотношение коэффициентов корреляционных функций и интервалов изменения параметров состояния показывают, что механические свойства – предел текучести, предел прочности, относительное удлинение, твердость находятся в хорошей корреляции с величиной среднеквадратичного смещения и энергией связи. В то же время, величина энергии образования дефекта упаковки почти не влияет на механические свойства.

Ключевые слова: атом, кристалл, сплав, многокомпонентность, взаимодействие, смещения, моделирование.

Стали и сплавы были и остаются незаменимыми материалами для изготовления деталей машин, подвергающихся одновременному воздействию больших ударных нагрузок, резких перепадов температур, агрессивных сред. Хотя к настоящему времени накоплена огромная номенклатура сталей и сплавов специального назначения, требования технического прогресса заставляют разрабатывать материалы со всё более высокими показателями механических свойств. Необходимо признать, что возможности для этого далеко не исчерпаны. Изменить показатель вполне определенного механического свойства – предела текучести, ударной вязкости, твердости – без изменения показателей остальных свойств невозможно. Причина этого состоит в том, что все механические свойства формируются в зависимости от состояния материала, под которым, в свою очередь, понимается его фазовый состав, распределение химических элементов в каждой из фаз, их дисперсность, средний размер зерна, степень остаточной деформации и др. Состояние материала поддается непосредственному воздействию со стороны человека путем задания химического состава на этапе отливки и путем термомеханической обработки на этапе изготовления детали. Прогнозирование свойств сталей и сплавов представляет собой важнейшую задачу материаловедения. Однако прямым эмпирическим восстановлением зависимостей типа состав – свойство, как правило, не удается добиться точных предсказаний механических свойств в широком диапазоне концентраций [1-3]. Это объясняется тем, что состояние материала определяется в основном взаимодействием атомов, которое в эмпирическом варианте не учитывается.

Механические свойства представляют собой отклик стали или сплава на тот или иной вид пластической деформации и могут быть определены только в процессе измерения [4-6]. Прямой же расчет механических свойств сплавов исходя из их химического состава с использованием методов атомно-дискретного моделирования пока нереализуем, так как для этого пришлось бы рассмотреть гигантское число взаимодействующих между собой кристаллитов (зерен), находящихся в процессе деформирования. В этом смысле механические свойства следует понимать как невычисляемые параметры состояния

материала. С другой стороны, с помощью атомно-дискретного моделирования возможно предугадать состояние сплава в зависимости от исходного химического состава. Поскольку учесть все факторы, влияющие на состояние материала невозможно, имеет смысл выделить только главные из них. Во-первых, будем считать, что весь материал представлен единственной основной фазой и, во-вторых, что в этой фазе отсутствуют дефекты остаточной пластической деформации. Эти предположения, естественно, сужают круг исследуемых материалов, однако многие промышленно выпускаемые стали и сплавы действительно представлены одной преобладающей фазой, а влияние наклепа в ассортименте, представленном, главным образом, прокатом снимается заключительным отжигом или нормализацией.

Конфигурационное и энергетическое состояние кристалла многокомпонентного сплава формируется в результате взаимодействия атомов различного сорта, хаотически распределенных по узлам решётки. Беспорядок в распределении сортов атомов порождает беспорядок позиционный, когда в равновесной конфигурации атомы оказываются смещенными относительно положений узлов идеальной решётки, так что в целом решётка оказывается искажённой. Поскольку общепризнанно [4, 5, 7], что скольжение дислокаций в более искаженной решётке затруднено, то, в конечном счете, сортовой беспорядок приводит к более высоким прочностным свойствам сплава. Упомянутые смещения атомов и обусловленная ими искаженность решётки являются естественными в том смысле, что их нельзя уничтожить искусственным путем – нагревом или последующей механической обработкой. С учетом данного обстоятельства наиболее ответственные детали машин, подвергающиеся одновременному воздействию высоких температур и механических напряжений (детали поршневой и клапанной группы ДВС, силовых установок ракет, лопатки паровых и газовых турбин и др.) всегда изготавливаются из сплавов сложного химического состава.

Представление о состоянии материала в целом создавалось из рассмотрения конфигурации модельного блока размером 17x17x17 ГЦК ячеек. В стартовой конфигурации блока атомы различных элементов в соответствии с молярным составом стали или сплава размещались по узлам идеальной решётки. При этом атомы металлов и кремния размещались в узлах решётки, а атомы углерода, бора и азота – в междоузлиях. Вначале путём минимизации внутренней энергии по параметру решётки находилось его равновесное значение a_0 . Затем внешние границы блока закреплялись, а атомам внутренней области размером 13x13x13 ячеек предоставлялась возможность смещаться в направлениях действующих на них сил вплоть до достижения положения равновесия. Одна из полученных таким образом конфигураций для стали 3X16H22B6Б представлена на рисунке 1 а). При этом векторы смещений атомов относительно узлов идеальной решётки для наглядности показаны увеличенными в 25 раз. В качестве меры искажённости решётки и первого параметра состояния рассматривалась величина S среднеквадратичного смещения атомов из их стартовых положений.

$$S = \sqrt{\frac{\sum_i (\vec{r}_i - \vec{r}_{i0})^2}{N}}, \quad (1)$$

где N – число атомов, \vec{r}_i – радиус вектор атома, \vec{r}_{i0} – радиус вектор узла идеальной решетки. Величина энергии связи $E_{св}$, понимаемая как внутренняя энергия кристалла, приходящаяся в среднем на атом, рассматривалась как второй усредненный параметр состояния. В качестве неявного параметра состояния может выступать и энергия образования дефекта упаковки $\gamma_{ду}$. «Неявный» в том смысле, что дефект упаковки (ДУ) может и не присутствовать в кристалле, но проявляться в процессе скольжения дислокаций, то есть при его пластической деформации. Поэтому для определения $\gamma_{ду}$

требуется дополнительная реализация ДУ в первоначально сформированном модельном блоке. Для этого примерно посередине блока проводился разрез плоскостью октаэдра и выполнялся сдвиг полукристаллов на $a_0/6\langle 211 \rangle$. Сформированная таким образом конфигурация рассматривалась как стартовая для ДУ. В ходе последующей релаксации определялись векторы атомных смещений, обусловленные только присутствием ДУ. Возникающая при этом конфигурация в стали 3X16H22B6Б показана на рисунке 1 б). Точное экспериментальное измерение s , E_{CB} , $\gamma_{ДУ}$ представляет собой чрезвычайно сложную задачу. Поэтому их правомерно считать неизмеряемыми параметрами состояния решётки. Поскольку неизмеряемые и невычисляемые параметры так или иначе описывают состояние одного и того же материала, то между ними должна существовать корреляционная зависимость. Для проверки этой гипотезы были рассмотрены 30 промышленно выпускаемых сталей и сплавов аустенитного класса. Их механические свойства [8] и рассчитанные значения s , E_{CB} , $\gamma_{ДУ}$ приведены в таблице 1.

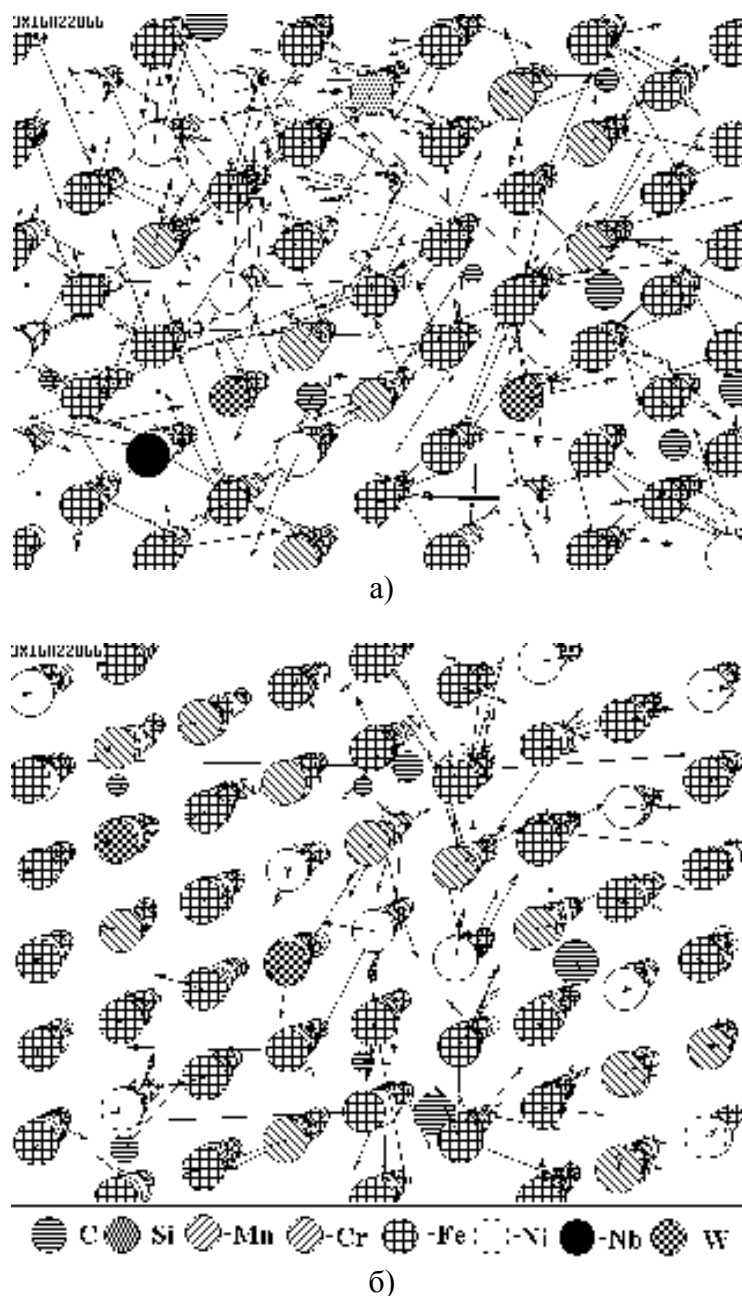


Рисунок 1. Поля смещений атомов в кристалле стали 3X16H22B6Б, обусловленные только сортовым беспорядком – а) и только присутствием дефекта упаковки – б).

Таблица 1. Экспериментальные значения показателей механических свойств и рассчитанные значения параметров состояния кристаллической решетки.

Марка Стали или сплава	Параметры состояния						
	Невычисляемые				Неизмеряемые		
	Предел прочности σ_B , Мпа	Предел Теку- чести $\sigma_{0,2}$, МПа	Относитель ное Удлинение δ , %	Твердос ть НВ	Смеще ние S , Å	Энергия связи $E_{св}$, эВ/атом	Энергия обр. ДУ, γ мДж/м ²
12X18H9	490	196	45	179	0,108	4,675	186,5
03X23H28Ю4Т	490	216	30	-	0,065	4,661	199,5
12X18H9Т	510	196	39	169	0,246	4,625	100
09X14H19B2БР	510	220	35	200	0,106	4,718	166,5
08X18H10Т	510	205	43	143	0,104	4,730	175
09X14H19B2БР1	510	215	30	158	0,085	4,568	190
20X23H18	510	250	35	178	0,149	4,737	190,5
08X18H10	510	205	45	143	0,087	4,665	198,5
10X16H14B2БР	520	220	38	200	0,127	4,717	201
02X17H11M2	520	250	35	150	0,059	4,74	220
12X18H10Т	530	205	38	179	0,106	4,668	200,5
08X21H6M2Т	539	343	20	170	0,100	4,672	190,5
08X22H6Т	539	345	20	170	0,141	4,716	243
20X23H13	540	295	35	-	0,147	4,715	159,5
08X16H9M2	540	220	38	200	0,090	4,695	199,5
08X16H13M2Б	550	230	40	160	0,134	4,744	190
1X14H14B2M	550	220	35	175	0,125	4,747	215
17X18H9	590	185	35	-	0,174	4,648	163
12X18H12Т	592	216	35	200	0,107	4,640	210
3X16H22B6Б	600	300	20	-	0,229	4,779	170
10X14Г14H4Т	640	245	35	-	0,114	4,649	216
ХН35ВТК	650	350	15	236	0,149	4,855	176,5
12X25H16Г7АР	690	325	40	-	0,177	4,870	177
45X14H14B2M	700	300	-	210	0,287	4,663	116
31X19H9MBBT	700	340	28	189	0,235	4,656	211,5
ХН60Ю	720	360	50	-	0,126	4,881	206,5
ХН35ВТР	750	400	20	-	0,143	4,875	204,5
ХН65ВМТЮ	830	490	20	-	0,198	5,063	165
ХН60КВМЮТЛ	833	735	3	-	0,141	5,851	337
ХН58ВКМТЮБ ДЛ	950	850	5	-	0,090	5,940	334

Количественная взаимосвязь между неизмеряемыми и невычисляемыми параметрами состояния устанавливалась с помощью с помощью линейных аппроксимирующих функций, коэффициенты которых находились из условий минимальности суммы квадратов отклонений ожидаемых показателей механических свойств от экспериментальных для рассматриваемой группы сплавов. Ниже эти функции приводятся для указанных в таблице 1 механических свойств.

$$\sigma_{0,2} = 291,2 + 489,3s + 425,6(E_{св} - E_{0св}) + 0,319(\gamma - \gamma_0)$$

$$\sigma_B = 519,9 + 894,7s + 296,2(E_{cв} - E_{0cв}) + 0,054(\gamma - \gamma_0)$$

(2)

$$\delta = 37,9 - 66,0s - 18,0(E_{cв} - E_{0cв}) - 0,057(\gamma - \gamma_0)$$

$$HB = 180,6 + 209,5s + 123,0(E_{cв} - E_{0cв}) - 0,070(\gamma - \gamma_0),$$

где $E_{0cв}$ и γ_0 – соответствующие средние для рассматриваемой группы сплавов. В этом случае постоянные составляющие в σ_{02} , σ_B , δ , HB приобретают смысл их средних значений. Из сравнения данных таблицы 1 и соотношений (1) видно, что наибольший «вклад» в механические свойства обусловлен сортовым беспорядком, т.е. среднеквадратичным смещением атомов и в меньшей степени энергией связи. Влияние же энергии образования ДУ совсем незначительно. В таблице 2 проводится сравнение экспериментальных и найденных с помощью соотношений (1) значений показателей механических свойств.

Таблица 2. Экспериментальные и рассчитанные значения показателей механических свойств

Марка стали или Сплава	Предел текучести σ_{02} , Мпа		Предел прочности σ_B , Мпа		Относительное удлинение δ , %		Твердость HB	
	эксп-т	Прогноз	Эксп-т	Прогноз	Эксп-т	Прогноз	эксп-т	Прогноз
12X18H9	196	232	490	540	45	36	179	173
03X23H28Ю4Т	216	209	490	498	30	38	–	161
12X18H9Т	196	183	510	520	39	42	169	173
09X14H19B2БР	220	263	510	587	35	34	200	187
8X18H10Т	205	250	510	552	43	36	143	179
09X14H19B2БР1	215	176	510	488	30	39	158	154
20X23H18	250	280	510	595	35	32	178	189
8X18H10	205	221	510	519	45	37	143	166
10X16H14B2БР	220	264	520	571	38	33	200	181
02X17H11M2	250	247	520	518	35	36	150	168
12X18H10Т	205	233	530	537	38	35	179	170
08X21H6M2Т	343	228	539	533	20	36	170	170
08X22H6Т	345	284	539	585	20	30	170	181
20X23H13	295	260	540	586	35	34	–	188
08X16H9M2	220	236	540	531	38	36	200	170
08X16H13M2Б	230	275	550	584	40	33	160	186
1X14H14B2М	220	280	550	578	35	32	175	183
17X18H9	185	245	590	590	35	33	–	185
12X18H12Т	216	224	592	530	35	35	200	166
3X16H22B6Б	300	330	600	679	20	27	–	212
10X14Г14H4Т	245	233	640	540	35	34	–	169
ХН35ВТК	350	326	650	630	15	30	236	204
12X25H16Г7АР	325	346	690	659	40	28	–	212
45X14H14B2М	300	292	700	693	–	28	210	214
31X19H9МВБТ	340	294	700	649	28	26	189	195
ХН60Ю	360	335	720	619	50	30	–	200
ХН35ВТР	400	340	750	632	20	29	–	203

ХН65ВМТЮ	490	435	830	735	20	24	–	240
ХН60КВМЮТЛ	735	797	833	926	3	4	–	314
ХН58ВКМТЮБ ДЛ	850	809	950	907	5	6	–	314

Как видно из таблицы, максимальная относительная разность σ_{02} (~33%) достигается для стали 08Х21Н6М2Т. Для предела прочности максимальная разность составляет 16% для сплава ХН35ВТР. Для большинства же материалов прогнозируемые и экспериментальные значения различаются не более чем на 10%. Таким образом, выбор в качестве рассчитываемых параметров состояния среднеквадратичного смещения S и энергии связи $E_{св}$ оказывается удачным в том смысле, что показатели механических свойств оказываются хорошо коррелирующими с S и $E_{св}$. Аппроксимирующие функции в сочетании с компьютерным моделированием могут существенно облегчить поиск оптимального состава многокомпонентного сплава и поэтому оказываются не только инструментом прогнозирования, но и программирования материалов с заданным набором механических свойств.

Список литературы

1. Ганеев А.А., Нургаянова О.С. Моделирование зависимости состав-свойство жаропрочных никелевых сплавов многомерным корреляционным сплайном// Ползуновский альманах. – № 4. – 2004. – с. 135-137.
2. Ганеев А.А., Нургаянова О.С. Подходы к автоматизации проектирования новых литейных жаропрочных никелевых сплавов// Вестник АлтГТУ. – № 3-4. – 2005. – с. 112-115.
3. Полянский В.М., Гаврилюк В.В. и др. Структура, свойства и механизм разрушения никелевого литейного жаропрочного сплава// Металловедение и термообработка металлов. – № 9. – 2004. – с. 32-36.
4. Хоникомб Р. Пластическая деформация металлов. – М.: Мир, 1972. – 408 с.
5. Дударев Е.Ф. Микропластическая деформация и предел текучести поликристаллов. – Томск: ТГУ, 1988. – 255 с.
6. Баранов М.А. Применение атомно-дискретного моделирования к прогнозированию механических свойств сталей и сплавов. – Наука – Алтайскому краю. Сб. научных статей по результатам НИР, выполненных за счет средств краевого бюджета. С. 262-272.
7. Хирт Дж., Лоте И. Теория дислокаций. – М.: Атомиздат, 1972. – 599 с.
8. Марочник сталей и сплавов/ Под ред. А.С. Зубченко. 2-е изд. – М.: Машиностроение, 2003. – 783 с.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований и администрации Алтайского края. Проект № 08-08-98007, ГК 1-09Ф