

УДК 621.78.011:621.81

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ УПРОЧНЯЮЩЕЙ ТЕРМОЦИКЛИЧЕСКОЙ ОБРАБОТКИ ЭВТЕКТОИДНОЙ СТАЛИ

Шматов А.А.

Белорусский национальный технический университет, Минск, e-mail: shmatovalexander@gmail.com

Настоящая статья посвящена компьютерному и математическому моделированию структурно-фазовых превращений процесса упрочняющей термоциклической обработки (УТЦО) эвтектоидной стали У8 путем решения уравнения Фоккера – Планка при условии нанокластерного образования зернистого цементита Fe_3C во время многократного неравновесного распада γ -твердого раствора перед проведением закалки. Для этого с помощью специального программного комплекса проведены квантово-химические расчеты концентрации углерода и цементита в стальной матрице, а также определены размеры нанокластеров Fe_3C в зависимости от числа термоциклов. Установлено, что в результате предварительного термоциклирования стали У8 формируется композиционная структура, состоящая из двух видов зерен: с высокой и низкой концентрацией углерода. Поскольку эта композиционная структура фиксируется при закалке и имеет мартенситную природу, то в одних мартенситных зернах твердость и хрупкость повышаются, а в других зернах – снижаются. С помощью теории эффективной среды и статистических методов рассчитаны показатели механических свойств стали У8, подвергнутой УТЦО. Сравнительный анализ показал, что расчетная зависимость твердости и ударной вязкости стали У8 от числа циклов УТЦО носит такой же экстремальный характер, как и в реальном процессе УТЦО, а разница расчетных и реальных значений указанных свойств стали составляет от 5 до 30%.

Ключевые слова: компьютерное моделирование, упрочняющая термоциклическая обработка, композиционная структура, эвтектоидная сталь

COMPUTER MODELING OF THE STRENGTHENING THERMOCYCLIC TREATMENT OF EUTECTOID STEEL

Shmatov A.A.

Belarusian National Technical University, Minsk, e-mail: shmatovalexander@gmail.com

This article is devoted to computer and mathematical modeling of the structural-phase transformations of the strengthening thermocyclic treatment (STCT) of the eutectoid steel У8 by solving the Fokker-Planck equation under the condition of nanocluster formation of granular cementite Fe_3C during multiple nonequilibrium decomposition of the γ -solid solution before quenching. For this, using a special software package, quantum-chemical calculations of the concentration of carbon and cementite in the steel matrix were carried out, and the sizes of Fe_3C nanoclusters were determined depending on the number of thermal cycles. It was found that as a result of preliminary thermal cycling of steel У8, a composite structure is formed, consisting of two types of grains: with a high and low carbon concentration. Since this composite structure is fixed during quenching and has a martensitic nature, in some martensite grains the hardness and brittleness increase, while in other grains it decreases. With the help of the effective medium theory and statistical methods, the indicators of the mechanical properties of steel У8 subjected to STCT are calculated. Comparative analysis showed that the calculated dependence of the hardness and impact toughness of steel У8 on the number of STCT cycles is of the same extreme nature as in the real STCT process, and the difference between the calculated and real values of these steel properties is from 5 to 30%.

Keywords: computer modeling, strengthening thermocyclic treatment, composite structure, eutectoid steel

Для оценки возможности композиционного построения структуры в инструментальной стали при упрочняющей термоциклической обработке (УТЦО) в настоящей работе впервые проведено физико-математическое и компьютерное моделирование процесса упрочняющей термоциклической обработки эвтектоидной стали У8 путем решения нелинейного уравнения Фоккера – Планка с использованием данных работ [1–3].

Физическая и математическая модели упрочняющей термоциклической обработки эвтектоидной стали

Для построения физической модели и математического описания процесса

УТЦО условно принято нанокластерное образование [1] зернистого цементита Fe_3C на предварительных перед закалкой стадиях неравновесного распада γ -твердого раствора в условиях незавершенных циклических твердофазных $\alpha \leftrightarrow \gamma$ превращений стали У8. Поэтому для упрощения моделирования термоциклической обработки (ТЦО) принято считать, что основной стадией формирования термоциклированной (ТЦ) структуры (рис. 1) является процесс распада аустенита с образованием глобулярного цементита Fe_3C . На рис. 2 представлен фрагмент модельного зерна с нанокластерами Fe_3C до и после ТЦО эвтектоидной стали. Как видно, момент времени t_0 соответствует структуре фрагмента зерна с двумя ис-

ходными нанокластерами Fe_3C до термообработки стали, а проведение ТЦО в период $t_0 + \Delta t$ приводит к зародышеобразованию трех новых нанокластеров Fe_3C , а также росту всех (новых и исходных) нанокластеров Fe_3C за счет диффузии атомов углерода из железоуглеродистой ($Fe + C$) матрицы в процессе распада γ -твердого раствора.

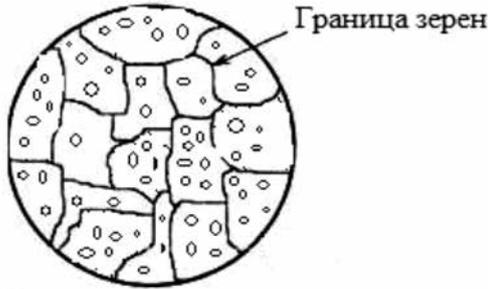


Рис. 1. Модельное представление структуры стали У8 после ТЦО

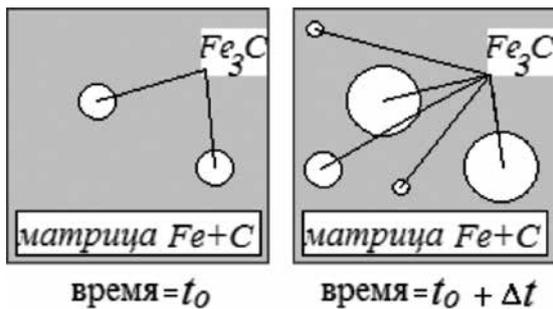


Рис. 2. Модельное представление фрагмента отдельного зерна стали У8 до и после ТЦО

При ТЦ нагреве стали происходит обратный процесс растворения в аустените нанокластеров Fe_3C . Рост или растворение нанокластеров Fe_3C приводит к изменению концентрации атомов углерода в $Fe + C$ матрице зерна. Таким образом, в каждый момент времени t при ТЦО стали, предшествующей ее закалке на мартенсит, модельное зерно стали характеризуется следующими параметрами:

- концентрацией $N(t)$ нанокластеров Fe_3C ;
- радиусом $R(t)$ нанокластера Fe_3C ;
- концентрацией углерода $C(t)$ в $Fe + C$ матрице для данного зерна;
- функцией распределения $F(R, t)$ нанокластеров по их радиусу в данный момент времени.

Зная функцию распределения $F(R, t)$, можно рассчитать число нанокластеров Fe_3C в зерне стали $N(t)$, а также концентрацию атомов углерода $C(t)$ в $Fe + C$ матрице

зерна стали после ТЦО на данный момент времени [2, 3] следующим образом:

$$N(t) = \int_0^{\infty} F(R, t) dR, \quad (1)$$

$$C(t) = C_0(t=0) - \int_0^{\infty} \frac{4\pi R^3}{3 \cdot v} \cdot F(R, t) dR, \quad (2)$$

где v – объём, приходящийся на один атом углерода C в фазе Fe_3C ; $C(t=0)$ – концентрация атомов углерода в $Fe + C$ матрице (рис. 2) до проведения ТЦО эвтектоидной стали.

Изменение функции распределения нанокластеров со временем на диффузионной стадии роста и растворения фазы Fe_3C было получено путем решения нелинейного уравнения Фоккера – Планка [2, 3], которое для изучаемой системы с нанокластерами фазы Fe_3C (см. рис. 2) имеет следующий вид:

$$\frac{\partial F(R, t)}{\partial t} = - \frac{\partial}{\partial R} J(R, t), \quad (3)$$

где $J(R, t)$ представляется [2, 3] следующим образом:

$$J(R, t) = -B(R, t) \frac{\partial F(R, t)}{\partial R} + A(R, t) \cdot F(R, t). \quad (4)$$

Функция $A(R, t)$ определяется скоростью изменения эффективного радиуса нанокластера фазы Fe_3C и имеет следующий вид:

$$A(R, t) = \frac{dR}{dt} = \frac{D_0 v_0}{R} [C(t) - C_0^{if}(R)], \quad (5)$$

где D_0 – коэффициент диффузии атомов углерода в кристаллической решетке железа;

$C_0^{if}(R)$ – концентрация углерода на границе растущего нанокластера Fe_3C , определялась по следующей формуле:

$$C_0^{if}(R) = C_0^{eq} \exp\left(\frac{2\sigma v_0}{kTR}\right), \quad (6)$$

где C_0^{eq} – равновесная растворимость углерода в кристалле железа при данной температуре; k – постоянная Больцмана; T – абсолютная температура; σ – эффективная энергия единицы поверхности нанокластера Fe_3C в $Fe + C$ матрице; v_0 – объём, приходящийся на один атом углерода в фазе Fe_3C .

Задача построения функции распределения $F(R, t)$ для численного моделирования процесса ТЦО была решена с помощью метода DAF (distributed approximating functional), основным свойством которого явля-

ется возможность аналитического представления производных с помощью значений функции, заданных на дискретной сетке. В настоящей работе используется представление DAF через полиномы Эрмита.

Для решения уравнения Фоккера – Планка использовали физико-химические параметры (таблица), которые были определены с помощью квантово-химических расчетов [1, 4].

Для решения уравнения Фоккера – Планка задаются следующие начальные условия:

1) функция распределения $F(R, 0)$ нанокластеров Fe_3C в $Fe + C$ матрице до ТЦО стали У8;

2) концентрация $N_0(R, t=0)$ и радиус $R_0(t=0)$ нанокластеров Fe_3C до ТЦО стали У8;

3) концентрация атомов углерода $C_0(t=0)$ в $Fe + C$ матрице до ТЦО стали У8.

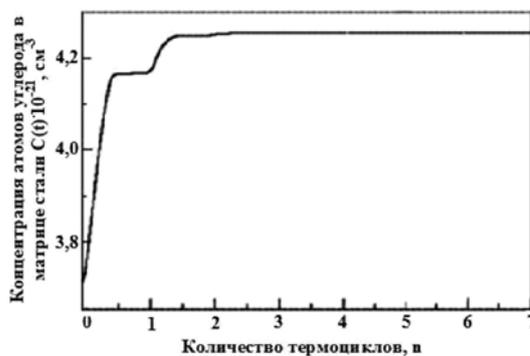
В конечном итоге с помощью уравнения Фоккера – Планка рассчитаны структурные параметры эвтектоидной стали во всех циклах проведения ТЦО.

Построение композиционной структуры термоциклированной стали в результате компьютерного моделирования

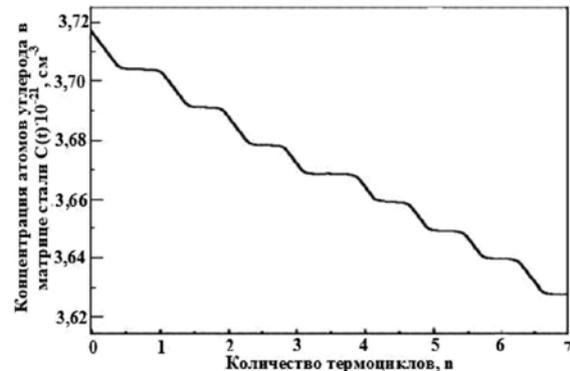
Компьютерное моделирование изучаемого процесса УТЦО осуществляли с помощью специальной программы, которая позволила в графическом виде представить результаты квантово-химических расчетов концентрации углерода и цементита в $Fe + C$ матрице стали, а также радиуса нанокластеров цементита Fe_3C в зависимости от числа циклов ТЦО, проходящей до проведения окончательной операции заковки стали. Анализ результатов при разных начальных структурных параметрах концентрации N_0 и среднего радиуса R_0 нанокластеров Fe_3C показал, что с увеличением числа термоциклов ТЦО эвтектоидной стали формируются две группы зерен; в одних зернах $Fe + C$ матрицы концентрация углерода $C(t)$ возрастает (рис. 3, а), а в других зернах – уменьшается (рис. 3, б).

Расчетные параметры для решения уравнения Фоккера – Планка

Параметр	Значение
D – коэффициент диффузии атомов углерода в α -Fe	$D_0 = 0,62 \cdot 10^{-2}$ см ² /с; $\Delta E = 0,86$ эВ
D – коэффициент диффузии атомов углерода в γ -Fe	$D_0 = 0,49$ см ² /с; $\Delta E = 1,6$ эВ
C_0^{eq} – равновесная растворимость углерода в кристалле железа при данной температуре	0,025% C в α -Fe; 2,14% C в γ -Fe
σ – эффективная энергия единицы поверхности нанокластера Fe_3C в $Fe+C$ матрице	2,0–2,5 Дж/м ²
v_0 – объем, приходящийся на один атом углерода в новой фазе Fe_3C	$3,86 \cdot 10^{-23}$ м ³



а



б

Рис. 3. Зависимость концентрации углерода $C(t)$ в железоуглеродистой матрице в зависимости от числа циклов ТЦО эвтектоидной стали:

а – $N_0 = 1 \cdot 10^{13}$ см⁻³; $R_{sr} = 8 \cdot 10^{-8}$ см; б – $N_0 = 5 \cdot 10^{12}$ см⁻³; $R_{sr} = 8 \cdot 10^{-5}$ см

1. Первая группа включает в себя кристаллиты, в которых по мере увеличения числа термоциклов концентрация углерода возрастает, а концентрация нанокластеров цементитной фазы в стали уменьшается за счет растворения более крупных и образования более мелких включений цементита в Fe + C матрице [5]. Поэтому зерна первого типа все больше легируются углеродом в процессе прохождения ТЦО. А когда в Fe + C матрице большинство цементитных включений растворится, объемная доля зерен первого типа увеличится, а структура стали станет более однородной. Так как твердость стали зависит от содержания углерода в Fe + C матрице, можно предположить, что для зерен первой группы характерен рост их твердости, что после закалки делает сталь более твердой.

2. Вторая группа включает в себя кристаллиты, в которых в ходе термоциклирования концентрация углерода уменьшается, а концентрация нанокластеров цементитной фазы в стали не меняется, в то время как средний радиус цементитных включений увеличивается за счет роста старых и зародышеобразования новых включений цементита при диффузионном притоке углерода из Fe + C матрицы [5]. В результате ТЦО зерна второго типа становятся менее легированными углеродом с развитой зернограницной поверхностью и более пластичными. Поэтому можно предположить,

что зерна второй группы обеспечат после закалки стали более высокие показатели пластичности и ударной вязкости.

В результате анализа отмечено, что при термоциклировании стали конкурируют два взаимно противоположных процесса: растворение цементитных фаз, с одной стороны; укрупнение и зародышеобразование включений цементита, – с другой, в результате чего после проведения ТЦО эвтектоидной стали формируется композиционная структура, состоящая из двух видов зерен с большой и малой концентрациями углерода. Модельный образец такой структуры представлен на рис. 4. Поскольку такая композиционная структура фиксируется при закалке и имеет мартенситную природу, показатели твердости и хрупкости у одних мартенситных зерен повышаются, а у других – снижаются.



Рис. 4. Модель структуры стали, состоящей из двух типов зерен

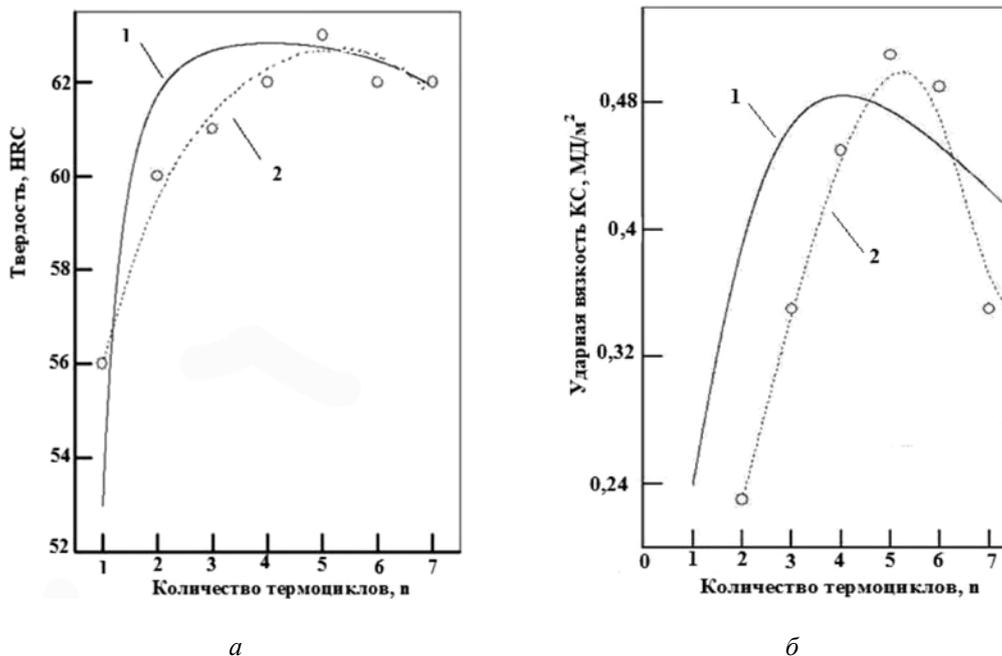


Рис. 5. Расчетная и экспериментальная зависимости твердости (а) и ударной вязкости (б) стали У8 от числа циклов упрочняющей термоциклической обработки:
1 – расчетные данные, 2 – экспериментальные данные

С помощью теории эффективной среды и статистических методов расчета [6, 7] выведены формулы для определения эффективных параметров твердости HRC и ударной вязкости КС, которые учитывают значения HRC, КС в соответствии с относительным объемом каждого из двух типов зерен, имеющих разное содержание углерода. В результате получены расчетные значения эффективной твердости и ударной вязкости эвтектоидной стали У8 в зависимости от количества циклов УТЦО.

Графическая интерпретация расчетных и экспериментальных значений твердости и ударной вязкости эвтектоидной стали, подвергнутой УТЦО, представлена на рис. 5. Сравнительный анализ показал, что расчетная зависимость эффективной твердости и ударной вязкости стали У8 от числа циклов УТЦО носит экстремальный характер, такой же как в реальном процессе УТЦО (рис. 5), а разница расчетных и реальных значений твердости и ударной вязкости эвтектоидной стали У8 в оптимальной области варьируется от 5 до 30%.

Заключение

1. Проведенное квантово-химическое моделирование процесса УТЦО эвтектоидной стали научно доказало возможность формирования дискретной по углероду композиционной структуры, рационально сочетающей высокие показатели прочностных

и пластичных свойств термоциклически обработанной стали.

2. С помощью математических методов расчета установлено скачкообразное повышение твердости и ударной вязкости стали У8 в зависимости от числа циклов УТЦО; такой же характер экстремальной зависимости получен в результате экспериментальных исследований влияния количества циклов процесса УТЦО на указанные механические свойства эвтектоидной стали.

Список литературы

1. Chiou Wun C. Jr., Carter Emily A. Structure and stability of Fe,C-cementite surfaces from first principles. *Surface Science*. 2003. Vol. 530. P. 87–100.
2. Валл А.Н., Растегин А.Э., Первалова И.А. Физическая кинетика. Иркутск: Изд-во ИГУ, 2014. 103 с.
3. Босов А.Д., Орлов Ю.Н. Эмпирическое уравнение Фоккера – Планка для нестационарных временных рядов // Препринт ИПМ им. М.В. Келдыша РАН. 2013. № 3. 30 с.
4. Игнатов С.К. Квантово-химическое моделирование атомно-молекулярных процессов. Нижний Новгород: Изд-во НГУ, 2019. 94 с.
5. Шматов А.А. Научные и технологические основы термохимических и термоциклических методов упрочняющей обработки металлообрабатывающих инструментов: дис. ... докт. техн. наук: 05.16.01 и 05.02.07. Минск, 2020. 344 с.
6. Апресян Л.А., Власов Д.В., Задорин Д.А., Красовский В.И. О модели эффективной среды для частиц со сложной структурой // *Журнал технической физики*. 2017. Т. 87. С. 76–78.
7. Стаценко А.С., Пархачёв А.Н. Определение механических характеристик образцов упрочненных статико-импульсной обработкой // *Современные наукоемкие технологии*. 2014. № 5 (2). С. 10–17.