

УДК 544.015.35: 004.942

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ФАЗОВЫХ ПРЕВРАЩЕНИЙ В КОМПЛЕКСНО ЛЕГИРОВАННОЙ СТАЛИ

ТРОЦАН А. И.¹ *д.т.н., проф.*,
КАВЕРИНСКИЙ В. В.² *к.т.н., н. с.*,
БРОДЕЦКИЙ И. Л.^{3*} *к.т.н., с.н.с.*
СУХЕНКО З. П.⁴ *гл. констр.*

¹ отдел материаловедения стали, Институт проблем материаловедения НАН Украины, ул. Кржижановского, 3, 03680, Киев, Украина, тел. +38050-656-3604, e-mail: don1945@ukr.net, ORCID ID: 0000-0002-1435-5377

² отдел материаловедения стали, Институт проблем материаловедения НАН Украины, ул. Кржижановского, 3, 03680, Киев, Украина, тел. +38050-212-1724, e-mail: hisie@ukr.net, ORCID ID: 0000-0002-6940-579X

³ отдел материаловедения стали, Институт проблем материаловедения НАН Украины, ул. Кржижановского, 3, 03680, Киев, Украина, тел. +38050-964-2900, e-mail: brodig@mail.ru, ORCID ID: 0000-0002-1918-4976

⁴ отдел материаловедения стали, Институт проблем материаловедения НАН Украины, ул. Кржижановского, 3, 03680, Киев, Украина, тел. +38050-918-8113, e-mail: ipmm@mail.ru, ORCID ID: 0000-0001-8578-5473

Аннотация. *Цель.* Разработка и реализация компьютерной модели для анализа влияния химического состава стали на равновесные температуры начала и окончания $\gamma \rightarrow \alpha$ превращения, положение линий сольвуса феррита и аустенита, а также температуру и концентрацию углерода соответствующие эвтектоиду (перлиту). *Методика.* Термодинамическое моделирование, основанное на определении условий равенства химических потенциалов для α , γ и θ (цементит) фаз. При определении формы кривых или поверхностей потенциалов (геометрическое представление концентрационной зависимости энергии Гиббса) каждой из фаз использован подход подрешеточной модели Сундмана-Агрена с применением полиномов Редлиха-Кистера для вычисления избыточной энергии смешения. Для определения уравнений общих касательных к кривым потенциалов использовались методы численного дифференцирования в комбинации с методом наименьших квадратов для отыскания равных значений углового коэффициента и свободного члена (условия совпадения касательных). Для реализации вычислений применялся написанный на языке C++ модуль, являющийся частью программного проекта для моделирования фазовых превращений. *Результаты.* Разработана компьютерная модель, позволяющая определить температуры фазовых превращений в стали и равновесный состав фаз по углероду при заданной температуре. Приведены примеры расчёта влияния Mn, Si, Ni, Cr и Mo на вид участка политемического квазибинарного разреза диаграммы состояния Fe-C с легирующими элементами в области эвтектоидного (перлитного) превращения. *Научная новизна.* С применением физически обоснованного метода моделирования показана количественная связь между составом комплекснолегированной стали и положением её критических точек. *Практическая значимость.* Построенная компьютерная модель, с применением ранее разработанных программ, даёт возможность с высокой степенью достоверности рассчитать образование карбонитридных фаз в сталях, в частности условия протекания процесса выделения избыточных фаз, а также получить информацию для корректировки температур проведения эффективной термической и/или термомеханической обработки стали заданного состава.

Ключевые слова: фазовые превращения, термодинамика, аустенит, перлит, сталь, легирование, компьютерная модель

КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ФАЗОВИХ ПЕРЕТВОРЕНЬ У КОМПЛЕКСНО ЛЕГОВАНОЇ СТАЛІ

ТРОЦАН А. І.¹ *д.т.н., проф.*,
КАВЕРІНСКИЙ В. В.² *к.т.н., н. с.*,
БРОДЕЦЬКИЙ І. Л.³ *к.т.н., с.н.с.*
СУХЕНКО З. П.⁴ *гл. констр.*

¹ відділ матеріалознавства сталі, Інститут проблем матеріалознавства НАН України, вул. Крижанівського, 3, 03680, Київ, Україна, тел. +38050-656-3604, e-mail: don1945@ukr.net, ORCID ID: 0000-0002-1435-5377

² відділ матеріалознавства сталі, Інститут проблем матеріалознавства НАН України, вул. Крижанівського, 3, 03680, Київ, Україна, тел. +38050-212-1724, e-mail: hisie@ukr.net, ORCID ID: 0000-0002-6940-579X

³ відділ матеріалознавства сталі, Інститут проблем матеріалознавства НАН України, вул. Крижанівського, 3, 03680, Київ, Україна, тел. +38050-964-2900, e-mail: brodig@mail.ru, ORCID ID: 0000-0002-1918-4976

⁴ відділ матеріалознавства сталі, Інститут проблем матеріалознавства НАН України, вул. Крижанівського, 3, 03680, Київ, Україна, тел. +38050-918-8113, e-mail: ipmm@mail.ru, ORCID ID: 0000-0001-8578-5473

Анотація. Мета. Розробка і реалізація комп'ютерної моделі для аналізу впливу хімічного складу сталі на рівноважні температури початку і закінчення $\gamma \rightarrow \alpha$ перетворення, положення ліній сольвусу фериту і аустеніту, а також температуру і концентрацію вуглецю відповідні до евтектоїду (перліту). **Методика.** Термодинамічне моделювання, засноване на визначенні умов рівності хімічних потенціалів для α , γ і θ (цементит) фаз. При визначенні форми кривих для потенціалів кожної з фаз використаний підхід підґраткової моделі Сундмана-Агрена із застосуванням поліномів Редліха-Кістера для обчислення надлишкової енергії змішування. Для визначення рівнянь спільних дотичних до кривих та поверхонь потенціалів (геометричне представлення концентраційної залежності енергії Гіббса) використовувалися методи чисельного диференціювання в комбінації з методом найменших квадратів для відшукування рівних значень кутового коефіцієнта і вільного члена (умови збігу дотичних). Для реалізації обчислень застосовувався написаний на мові C++ модуль, що є частиною програмного проекту для моделювання фазових перетворень. **Результати.** Розроблено комп'ютерну модель, що дозволяє визначити температури фазових перетворень в сталі і рівноважний склад фаз по вуглецю при заданій температурі. Наведені приклади розрахунку впливу Mn, Si, Ni, Cr і Mo на вигляд ділянки політермічних квазібінарних розрізів діаграми стану Fe-C з легуючими елементами в області евтектоїдного (перлітного) перетворення. **Наукова новизна.** Із застосуванням фізично обґрунтованого методу моделювання показаний кількісний зв'язок між складом комплекснолегованої сталі і положенням її критичних точок. **Практична значимість.** Побудована комп'ютерна модель, яка із застосуванням раніше розроблених програм, дає можливість з високим ступенем достовірності розрахувати утворення карбонітридних фаз в сталях, зокрема умови протікання процесу виділення надлишкових фаз, а також отримати інформацію для коригування температур проведення ефективної термічної і/або термомеханічної обробки сталі заданого складу.

Ключові слова: фазові перетворення, термодинаміка, аустеніт, перліт, сталь, легування, комп'ютерна модель

COMPUTER SIMULATION OF PHASE TRANSFORMATIONS IN A COMPLEX ALLOYED STEEL

TROTSAN A. I.¹ *Dr. Sc. (Tech.), Prof.,*
KAVERINSKY V. V.² *Ph.D. (Tech.), Researcher,*
BRODETSKY I. L.³ *Ph.D. (Tech.), Senior Scientist,*
SUKHENKO Z. P.⁴ *Chief Constructor*

¹ Department of Steel Materials, Institute for Problems of Materials Science, Krzyzanowsky st., 3, 03680, Kiev, Ukraine, tel. +38050-656-3604, e-mail: don1945@ukr.net, ORCID ID: 0000-0002-1435-5377

² Department of Steel Materials, Institute for Problems of Materials Science, Krzyzanowsky st., 3, 03680, Kiev, Ukraine, tel. +38050-212-1724, e-mail: hisie@ukr.net, ORCID ID: 0000-0002-6940-579X

³ Department of Steel Materials, Institute for Problems of Materials Science, Krzyzanowsky st., 3, 03680, Kiev, Ukraine, tel. +38050-964-2900, e-mail: brodig@mail.ru, ORCID ID: 0000-0002-1918-4976

⁴ Department of Steel Materials, Institute for Problems of Materials Science, Krzyzanowsky st., 3, 03680, Kiev, Ukraine, tel. +38050-918-8113, e-mail: ipmm@mail.ru, ORCID ID: 0000-0001-8578-5473

Annotation. Purpose. Development and implementation of a computer model to analyze the effects of steel chemical composition of at the equilibrium temperature of the beginning and end of the $\gamma \rightarrow \alpha$ transformation, the position of the solvus lines of ferrite and austenite, as well as the temperature and carbon concentration corresponding to the eutectoid (pearlite). **Methodology.** Thermodynamic modelling based on conditions of the chemical potentials equality of α , γ and θ (cementite) phases determination. When determining the shape of the curves for the potential (geometric representation of Gibbs energy concentration dependence) of each phase used approach of Sundman-Ågren sublattice model with Redlich-Kister polynomial to calculate the excess energy of mixing. To determine the equations of common tangents to the curves of potentials used methods for numerical differentiation in combination with the method of least squares in order to find equal values of the slope and intercept. To implement calculations used written in C++ module, which is a part of a software project for the simulation of phase transformations. **Results.** The computer model allows determining the phase transformation temperature of the steel and the equilibrium content of the carbon in phases at a predetermined temperature. Examples of the effect of Mn, Si, Ni, Cr and Mo on the shape of a quasi-binary polythermal section of phase Fe-C with alloying elements diagrams near eutectoid (pearlite) transformation calculations are given. **Originality.** Using physically grounded modelling method a quantitative relationship between the composition of complex alloyed steel and the position of its critical points was shown. **Practical value.** Was build a computer model which using previously developed software, enables a high degree of reliability calculation of carbonitride phases formation in steels, in particular the conditions of excessive phase precipitation process, as well as gives information for adjusting the temperature of an effective thermal and/or thermo-mechanical processing for specified composition steel.

Keywords: phase transitions, thermodynamics, austenite, pearlite, steel alloying, computer model

Введение

Современные стали характеризуются разнообразием фаз и структурных составляющих,

значительная часть которых образуется в ходе распада аустенита [7]. Именно процессы прямого и обратного $\gamma \rightarrow \alpha$ превращения лежат в основе большинства методов как упрочняющей, так

Таблица 1

**Составы стали, использованные для иллюстрации работы компьютерной модели/
Compositions of the steels used for illustration of the computer model working**

| № п/п | Содержание элементов, % | | | | | |
|-------|-------------------------|-----|------|------|------|------|
| | C | Mn | Si | Ni | Cr | Mo |
| 1 | 0 – 1,4 | 0,5 | 0,25 | 0,02 | 0,02 | 0,02 |
| 2 | | 2,0 | 0,3 | 0,02 | 0,02 | 0,02 |
| 3 | | 1,7 | 0,3 | 0,03 | 0,03 | 0,15 |
| 4 | | 0,6 | 0,3 | 1,0 | 1,0 | 0,02 |
| 5 | | 0,4 | 2,0 | 0,03 | 0,03 | 0,5 |

Методика

В основе использованной методики лежит реализация CALPHAD-метода (Calculation of Phase Diagrams) термодинамического моделирования [15], подрешеточной модели, разработанной Б. Сундманом и Дж. Агреном в работе [16] с применением полиномов Редлиха-Кистера [1] для вычисления избыточной энергии смешения при образовании твёрдых растворов [4].

Функцией состояния системы при изобарно-изотермических условиях является энергия Гиббса [15, 1]. Согласно использованным методам, полная мольная энергия Гиббса G^φ для твёрдого раствора замещения представляется в виде суммы [1, 14, 15]:

$$G^\varphi = \sum_{i=1}^K x_i \cdot {}^0G_i^\varphi + {}^{id}G^\varphi + {}^{ex}G^\varphi + {}^{mg}G^\varphi \quad (1)$$

где x_i – атомная доля компонента i в растворе, ${}^0G_i^\varphi$ – энергия Гиббса чистого компонента i в модификации φ в гипотетическом немагнитном состоянии, ${}^{id}G^\varphi$ – идеальная компонента энергии смешения, ${}^{ex}G^\varphi$ – избыточная энергия Гиббса, ${}^{mg}G^\varphi$ – поправка на магнитное упорядочение (существенна только для ферромагнитных и антиферромагнитных фаз).

Данные о ${}^0G_i^\varphi$ и её температурной зависимости имеются в справочной литературе и приводятся в виде полиномиальных функций или таблиц [14]. Идеальная составляющая энергии Гиббса равна изменению энтропии при образовании смеси, умноженному на температуру [1]:

$${}^{id}G^\varphi = R \cdot T \cdot \sum_{i=1}^K x_i \cdot \ln x_i \quad (2)$$

Избыточная энергия Гиббса ${}^{ex}G^\varphi$ представляется полиномом Редлиха-Кистера в виде [1]:

$${}^{ex}G^\varphi = \sum_{i<j}^K x_i \cdot x_j \cdot \sum_{r=0}^r J_{i,j} \cdot (x_i - x_j)^r \quad (3)$$

разупрочняющей термической и термомеханической обработки и делают возможным формирование свойств стали в широких пределах значений [5].

Для корректного назначения режима термообработки необходимо иметь представления о температурах фазовых превращений в материале, а также часто о составе фаз при различных температурах [5, 8]. Эти данные можно получить из диаграмм состояния. Но построение диаграмм более чем трёхкомпонентных систем затруднительно, что связано как с отсутствием наглядности их графических представлений, так и стремительным возрастанием необходимого количества экспериментальных данных при добавлении каждого следующего компонента. Если первый недостаток может быть решён путём применения набора политермических квазибинарных разрезов, то второй представляет значительную практическую трудность в любом случае.

Исходя из вышеизложенного, критические точки (температуры фазовых переходов) обычно определялись экспериментально для стали заданного состава, но информация об изменении состава фаз от температуры даже в этом случае требует достаточно объёмных исследований [6, 7, 12]. При этом состав стали колеблется даже в пределах одной марки, не говоря уже о значительном разнообразии легирования и неаддитивности влияния набора легирующих элементов [9].

Поэтому использование точных и физически обоснованных количественных расчётных методов прогнозирования фазовых превращений в легированных сталях представляет интерес как для назначения эффективных режимов термической или термомеханической обработки, так и для оптимизации их химического состава. Применение компьютерного моделирования позволяет значительно сократить необходимый объём экспериментов и быстро, с минимальными затратами, получить необходимые данные [7].

Цель

Разработка и применение компьютерной модели для анализа влияния химического состава на температуры фазовых превращений и определения равновесного состава фаз в двухфазных областях комплекснолегированной стали.

Материал

В качестве материала исследования выбран набор составов сталей содержащих в качестве легирующих элементов Si, Mn, Cr, Ni и Mo. Это распространённые легирующие элементы, которые могут входить в состав стали в значительных количествах и заметно влиять на фазовые превращения [6, 9, 12]. Составы, использованные для иллюстрации работы компьютерной модели приведены в таблице 1.

где J_{ij} – параметры взаимодействия между компонентами i и j , r – номер (порядок) параметра взаимодействия.

Параметры взаимодействия линейно зависят от температуры и являются справочными величинами, при этом, в расчетах используются лишь параметры взаимодействия от нулевого до второго порядка [4]. Вклад магнитного упорядочения в энергию Гиббса учитывался по методу из работ [1, 14], формулы в нашей статье не приводим в виду их громоздкости.

Несколько сложнее выглядит модель для твёрдого раствора внедрения, который образуют с железом С, N и другие элементы с малым радиусом атома. Для этих случаев применяется подрешёточная модель [16], в рамках которой рассматривают твёрдый раствор, как состоящий из подрешёток замещения и внедрения, элементы которого взаимодействуют между собой, как внутри одной подрешётки, так и между разными подрешётками [1]. В систему включается ещё один компонент – вакансии узлы подрешётки не занятые атомами.

В ГЦК твёрдом растворе на один узел подрешётки замещения приходится одна «пора», т. е. позиция в подрешётке внедрения $a=b=1$. Для ОЦК твёрдого раствора на один узел подрешётки замещения приходится 3 поры $a=1$, $b=3$. Таким образом, компонентами раствора являются атомы введенных в него химических элементов и вакансии. Для проведения расчётов в рамках подрешёточной модели атомные доли компонентов x_i заменяют на доли узлов y_i , занятых компонентами в его подрешётке [13]. Подрешёточная модель полной энергии Гиббса для твёрдых растворов имеет вид:

$$G_m = \sum_i \sum_j y_i^1 \cdot y_j^{2,0} G_{i,j}^0 + RT[a \cdot \sum_i y_i^1 \ln y_i^1 + b \cdot \sum_j y_j^2 \ln y_j^2] + {}^{ex}G_m + {}^{mg}G_m \quad (4)$$

$${}^{ex}G_m = \prod_i [y_i^1 \cdot \sum_j y_j^2 \cdot J_{(зам.эл.)j}] + \prod_j [y_j^2 \cdot \sum_i y_i^1 J_{i(va,вн.эл.)}] \quad (5)$$

где верхние индексы 1 и 2 при y_i и y_j указывают на концентрации атомов компонента в подрешётках замещения и внедрения, соответственно.

При описании энергии Гиббса цементита, его представляют состоящим из двух подрешёток: металлической (Fe с легирующими элементами (Mn, Cr – при их наличии)), внедренными в цементит и углеродной [3]. На один атом металла приходится 3 атома углерода. Концентрация углерода в его подрешётке считается равной 1, наличием вакансий (как следствие - отклонениями от стехиометрии) пренебрегаем, т.к. область гомогенности цементита мала [5]. Во всех фазах равновесной гетерогенной системы химические потенциалы каждого компонента во всех фазах равны между собой [1, 4]. На этом основании можно составить независимые

уравнения, так как химический потенциал одного и того же компонента в различных фазах описывается различными функциями концентраций и температуры [15]. Геометрическое отображение равенства химических потенциалов двухкомпонентной системы означает, что найдено положение общей касательной к кривым потенциалов (концентрационной зависимости энергии Гиббса) имеющихся в равновесии при заданной температуре фаз. Точки касания этой прямой к кривым потенциалов определяют состав фаз, отвечающий состоянию равновесия.

В многокомпонентной системе требуется отыскать положение не прямой, а гиперплоскости соответствующей размерности, которая касается многомерных поверхностей, описывающих термодинамические потенциалы фаз. Задача отыскания химического потенциала компонента в многокомпонентной системе при использовании приведенных выше сложных моделей температурно-концентрационной зависимости энергии Гиббса может быть решена только численно с применением компьютерной техники. Математические методы численного решения нелинейных систем уравнений подобного типа приведены в работе [2].

Результаты

В качестве примера на рисунке 1 приведены результаты расчёта при помощи разработанной нами компьютерной модели участка политермического разреза диаграммы состояния Fe-C с легирующими элементами. Данные для состава 1 из таблицы 1 приведены на рисунках (а) и (б) в качестве сравнительных и соответствуют углеродистой стали, содержащей из легирующих элементов лишь Mn и Si в относительно небольших количествах; остальные элементы на типичном уровне их примесей – 0,02 %.

Результаты расчётов хорошо согласуются с известными в литературе данными [5, 6, 8, 9, 12]. Это говорит об адекватности компьютерной модели и её применимости для практических задач.

Так из рисунка 1 видно, что легирование марганцем в количестве 2,0 %, что характерно, например, для низкоуглеродистых сталей повышенной прочности, ведёт к существенному ~ 90 °С понижению температуры начала $\gamma \rightarrow \alpha$ превращения. Температура перлитного превращения также снизилась, но в несколько меньшей степени. Таким образом, наблюдается сужение двухфазной области. Точка эвтектоида сместилась влево, что как известно, характерно для большинства легирующих элементов в стали [5, 6, 8, 12]. Но с помощью компьютерной модели мы можем оценить, что в рассмотренном случае концентрация углерода в перлите будет 0,68 %, тогда как сталь с ~ 0,8 % C в данном случае будет заэвтектоидной и может иметь в структуре избыточный цементит. При этом положение линии, соответствующей началу выделения из аустенита цементита в данном случае практически не изменяется.

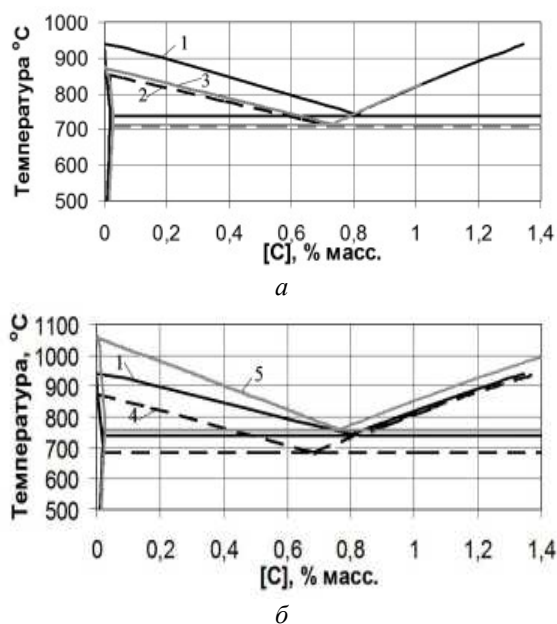


Рис. 1. Пример расчёта по компьютерной модели влияния состава стали на фрагмент политермического разреза диаграммы состояния Fe-C с легирующими элементами:

а) составы 1, 2, 3 из табл. 1

б) составы 1, 4, 5 из табл. 1/

An example of the computer model calculation result about influence of steel composition on the part of Fe-C(+ Si, Mn, Cr, Ni, Mo) phase diagram polythermal cut

a) compositions 1, 2, 3 from table 1

b) compositions 1, 4, 5 from table 1

На этом же рисунке показан пример одновременного понижения содержания Mn (состав 3 в сравнении с составом 2) до 1,7 % и некоторого повышения содержания Mo (до 0,15 %). Подобное легирование (с сильными карбидообразователями – V, Nb) характерно как для штрипсовых сталей категорий прочности X70 и выше, так и для тонколистового проката для глубокой штамповки-вытяжки [9]. Из полученных результатов следует, что одновременное изменение содержания легирующих элементов приводит к повышению температуры начала $\gamma \rightarrow \alpha$ превращения в составе 3 по сравнению с составом 2 лишь незначительно, а по мере приближения к точке эвтектоида разница становится практически незаметной. Прочие линии диаграммы практически не сместились. Это может говорить о компенсации взаимного влияния элементов при совместном легировании. Точка эвтектоида при такой схеме легирования, согласно компьютерной модели, несколько сместилась вправо в составе 3 по сравнению с составом 2 и соответствует 0,73 % C.

Состав 4 отвечает хромоникелевой стали. Такое легирование, характерно для машиностроительных сталей при изготовлении высоконагружаемых деталей механизмов (зубчатых колёс, валов и т. п.) [9]. Из рисунка 1 (б) видно сильное смещение линии начала $\gamma \rightarrow \alpha$ превращения в область более низких температур, сопоставимое с составами 2 и 3. В этом

случае также наблюдается некоторое увеличение этого смещения по мере приближения к точке эвтектоида. Снижение температуры перлитного превращения близко к таковому для составов 2 и 3, но более выражено. Согласно компьютерной модели, температура перлитного превращения составит для данного состава 682 °C. Смещение линии начала образования избыточного цементита малозаметно, но расчёт показывает её снижение (до 10...20 °C), которое увеличивается при больших концентрациях углерода. Существенно смещается точка эвтектоида в область меньших концентраций углерода и, по расчётам, для состава 4 соответствует 0,69 % C.

Состав 5 характеризуется заметно повышенным содержанием Si и Mo при низком содержании прочих легирующих элементов. Приведенный состав в целом является скорее модельно-иллюстративным, но подобные высокие содержания кремния характерны для некоторых марок пружинных сталей (например, 55C2) [9]. Для данного случая характерно повышение температуры начала $\gamma \rightarrow \alpha$ [5, 6], что и показывают результаты модели – рис. 1 (б). Из представленных результатов видно, что это повышение тем более выражено, чем ниже содержание углерода в стали. Также более заметным по сравнению с предыдущими случаями выглядит смещение в область более высоких температур (примерно на 40 °C) линии начала выделения цементита. Степень этого повышения мало изменяется от содержания углерода. Температура перлитного превращения также несколько возрастает и составляет для приведенного случая 760 °C. Точка эвтектоида смещается влево, но меньше чем в предыдущих составах и соответствует 0,76 % C, за исключением состава 1, где перлит соответствует концентрации 0,79 % C.

Научная новизна и практическая ценность

Разработана компьютерная модель, позволяющая предсказать влияние химического состава комплекснолегированной стали на вид политермического разреза диаграммы состояния в окрестности эвтектоидного превращения. Модель представляет модуль программного проекта по моделированию фазовых превращений в сталях, позволяющего, в частности, определять условия протекания процессов выделения избыточных фаз, компьютерное моделирование которых рассмотрено в наших предыдущих работах [10, 11, 17], а также получить целый ряд данных, необходимых для расчёта кинетики фазовых превращений.

Кроме того, модель имеет и самостоятельную практическую ценность т.к. даёт определенную информацию, необходимую для корректировки температур проведения термической и/или термомеханической обработки стали заданного состава. Например, для доэвтектоидных сталей температуру закалки и полного отжига назначают выше точки A3, то есть в полностью аустенитной области, но значительный перегрев выше неё

нежелателен [8, 12]. Расчёт по предложенной модели позволяет достаточно точно оценить эту температуру, даже если экспериментальные справочные данные для данного состава неизвестны или труднодоступны. Нагрев под закалку заэвтектоидных сталей проводится обычно лишь незначительно выше A1 (неполная закалка) [12], но легирование смещает точку эвтектоида, и для среднеуглеродистых легированных сталей может стоять вопрос: она до- или заэвтектоидная. Расчёт по разработанной модели позволяет на него ответить.

Выводы

1. Разработана основанная на термодинамических расчётах компьютерная модель для определения влияния комплексного легирования стали на

температуры фазовых превращений и равновесный состав фаз.

2. С помощью разработанной компьютерной модели проведен ряд иллюстрирующих расчётов для пяти типичных способов легирования. Показаны особенности смещения линий диаграммы Fe-C при изменении количества и соотношения легирующих элементов в стали.

3. Получаемые при помощи разработанной модели данные о температурах фазовых превращений и положении точки эвтектоида позволяют существенно сократить необходимый объём экспериментов при назначении температур закалки, различных видов отжига и деформации при проведении эффективных термической и/или термомеханической обработки сталей заданного конкретного состава.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

1. Голод В. М. Вычислительная термодинамика в материаловедении / В. М. Голод, К. Д. Савельев. – Санкт-Петербург: Издательство Политехнического университета, 2010. – 217 с.
2. Голод В. М. Моделирование и компьютерный анализ кристаллизации многокомпонентных сплавов на основе железа / В. М. Голод, К. Д. Савельев, А. С. Басин. – Санкт-Петербург: Изд.-во СПбГПУ, 2008. – 372 с.
3. Люпис К. Химическая термодинамика материалов / К. Люпис. – М.: Metallurgia, 1989. – 503 с.
4. Морачевский А. Г. Термодинамика расплавленных металлических и солевых систем / А. Г. Морачевский. – М.: Metallurgia, 1987. – 240 с.
5. Новиков И. И. Теория термической обработки металлов / И. И. Новиков. – М.: Metallurgia, 1978. – 392 с.
6. Попов А. А. Изотермические и термокинетические диаграммы распада переохлаждённого аустенита./ А.А. Попов, Л. Е. Попова. – М.: Metallurgia, 1965. – 495 с.
7. Соколов Д. Ф. Разработка моделей распада аустенита и прогнозирования механических свойств сталей при контролируемой прокатке : дис. канд. техн. наук : 05.16.05, 05.16.01 / Соколов Дмитрий Фёдорович – Санкт-Петербург, 2013. – 202 с.
8. Соколов К. Н. Технология термической обработки и проектирование термических цехов / К. Н. Соколов, И. К. Коротич – М.: Metallurgia, 1988. – 384 с.
9. Стали и сплавы. Марочник. / Сорокин В. Г Гервасьев М. А., Палеев В. С., Гервасьева И. В., Палеева С. Я. М.: «ИнгерметИнжиниринг», 2001. – 608 с.
10. Троцан А. И. Моделирование карбонитридообразования в микролегированных сталях. Сообщение 1: сущность математической модели; влияние температуры изотермической выдержки на усреднённый состав и количество избыточной фазы / А. И. Троцан, В. В. Каверинский, И. Л. Бродецкий // Металл и литьё Украины. – 2014. – №2. – С. 9 – 13.
11. Троцан А. И. Прогнозирование выделения карбонитридов и карбидов в микролегированной стали с применением термодинамических расчётов / А. И. Троцан, В. В. Каверинский, И. Л. Бродецкий // Металлофизика и новейшие технологии. – 2013. – № 7. – С. 919 – 931.
12. Тылкин М. А. Справочник термиста ремонтной службы / М. А. Тылкин. – М.: Metallurgia, 1981. – 660 с.
13. Christian J. W. The theory of phase transformations in metals and alloys / J. W. Christian. – Oxford: Pergamon Press, 1981. – 476 p.
14. Dinsdale A. T. SGTE data for pure elements / A. T. Dinsdale. – Teddington: NPL Materials Center, 1990. – 174 p. – (Division of Industry and Innovation).
15. Saunders N. CALPHAD. Calculation of phase diagrams / N. Saunders, A. P. Miodownik. – Guildford: Pergamon, 2005. – 497 p.
16. Sundman B. A regular solution model for phases with several components and sub-lattices, suitable for computer applications / B. Sundman, J. Agren // J. Phys. Chem. Solids. – 1981. – V. 42. – p. 297–301
17. Trotsan A. I. The influence of carbon concentration at the isothermal precipitation of carbonitride phases based on Ti, Nb and Al / A. I. Trotsan, V. V. Kaverinsky, I. L. Brodetsky // Строительство, материаловедение, машиностроение: Сборник науч. трудов. Вып.73. – Днеп.- вск., ПГАСА. – 2014. – С.24 – 28.

REFERENCES

1. Golod V.M. and Saveliev K.D. *Vychislitel'naya termodinamika v materialovedenii* [Computational thermodynamics in materials]. St. Petersburg: Publishing of the Polytechnic University, 2010, 217 p. (in Russian)
2. Golod V.M., Savelyev K.D. and Bassin A. S. *Modelirovanie i kompyuternyi analiz kristalizatsyi mnogokomponentnykh splavov na osnove zheleza* [Modelling and computer analysis of crystallisation of iron based multicomponent alloys]. St. Petersburg: Publ. of STU, 2008, 372 p. (in Russian)
3. Lupis K. *Himicheskaya termodinamika materialov* [Chemical thermodynamics of materials]. Moscow: Metallurgy, 1989, 503 p. (in Russian)

4. Morachevsky A.G. *Termodinamika rasplavlennykh metalicheskikh i solevykh sistem* [Thermodynamics of metal molten and salt systems]. Moscow: Metallurgy, 1987. – 240 p. (in Russian)
5. Novikov I. *Teoriya termicheskoy obrabotki metallov* [Theory of heat processing of metals]. M: Metallurgy, 1978, 392 p. (in Russian)
6. Popov A.A. and Popova L.E. *Izotermicheskie i termokineticheskie diagramy raspada pereohlazhdyonogo austenita* [Isothermal and thermo-kinetic decay diagram of supercooled austenite]. Moscow: Metallurgy, 1965. – 495 p. (in Russian)
7. Sokolov D.F. *Razrabotka modeley raspada austenita i prognozirivanie mehanicheskikh svoystv stali pri kontroliruemiy prokatke: dissertatsiya kandidata tehnikeskikh nauk: 05.16.05, 05.16.01* [Development of models of austenite decay prediction and mechanical properties of steel at a controlled rolling: dis. cand. tech.: 05.16.05, 05.16.01] St. Petersburg, 2013, 202 p. (in Russian)
8. Sokolov K.N. and Korotych I.K. *Tehnologiya termicheskoy obrabotki i proektirovanie termicheskikh tsekhov* [Heat processing technology and design of thermal plants]. Moscow: Metallurgy, 1988, 384 p. (in Russian)
9. Sorokin V.G., Gervasi M.A., Palais V.S., Gervaseva I.V. and Paleeva S.Y. *Stali i cplavy. Spravochnik* [Steel and steel alloys. Database]. M: "IntermetInzhiniring", 2001, 608 p. (in Russian)
10. Trotsan A.I., Kaverinsky V.V. and Brodetsky I.L. *Modelirovanie karbonitridoobrazovaniya v mikrolegirovannykh stalyah. Soobshchenie 1. sushtshnost matematicheskoy modeli, vliyaniye temperatury izotermicheskoy vyderzhki na usrednyonnnyy sostav i kolichestvo karbonitridnoy fazy* [Modeling of carbide and nitride formation in micro-alloyed steels. Message 1: The essence of the mathematical model; the effect of isothermal holding temperature on averaged composition and amount of the excess phase]. Metall i lityo Ukrainy [Metal and casting of Ukraine]. 2014, no.2, pp. 9 – 13. (in Russian)
11. Trotsan A.I., Kaverinsky V.V. and Brodetsky I.L. *Prognozirovanie vydeleniya karbonitridov I karbidov v mikrolegirovannoy stali s primeneniyyem termodinamicheskikh raschyotov* [Prediction of carbonitrides and carbides allocation in a micro-alloyed steel with using thermodynamic calculations]. *Metallofizika i noveyshie tehnologii* [Metal Physics and the latest technologies]. 2013, no. 7, pp. 919 – 931. (in Russian)
12. Tylkin M. A. *Spravochnik termista remontnoy sluzhby* [Guide of repair service treater]. Moscow: Metallurgy, 1981, 660 p. (in Russian)
13. Christian J.W. *The theory of phase transformations in metals and alloys*. Oxford: Pergamon Press, 1981, 476 p.
14. Dinsdale A. T. *SGTE data for pure elements*. Teddington: NPL Materials Center, 1990, 174 p.
15. Saunders N. and Miodownik A.P. *CALPHAD. Calculation of phase diagrams*. Guildford: Pergamon, 2005, 497 p.
16. Sundman B. and Ågren J. *A regular solution model for phases with several components and sub-lattices, suitable for computer applications*. *J. Phys. Chem. Solids*, 1981, Vol. 42., pp. 297 – 301
17. Trotsan A.I., Kaverinsky V.V. and Brodetsky I.L. *The influence of carbon concentration at the isothermal precipitation of carbonitride phases based on Ti, Nb and Al*. *Construction, materials science, mechanical engineering: Collection of Scientific works*. Vol.73. - Dnep.- sk, PGASA., 2014, C. 24 – 28.

Статья рекомендована к публикации д-ром техн. наук, В.И. Большаковым и д-ром техн. наук, Д.В. Лаухиным (Украина)