

На правах рукописи

Пасынков Александр Юрьевич

**Термодинамика и кинетика эволюции структуры и фазового состава  
низколегированных сталей при аустенитизации и горячей деформации**

01.04.07 – Физика конденсированного состояния

**АВТОРЕФЕРАТ**  
диссертации на соискание ученой степени  
кандидата физико-математических наук

Екатеринбург – 2019

Работа выполнена в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Институте физики металлов имени М.Н. Михеева Уральского отделения Российской академии наук (ИФМ УрО РАН)

<b>Научный руководитель:</b>	Попов Владимир Владимирович, доктор технических наук, профессор, главный научный сотрудник, заведующий лабораторией диффузии, ФГБУН Институт физики металлов им. М.Н. Михеева УрО РАН, г. Екатеринбург
<b>Официальные оппоненты:</b>	Мирзаев Джалал Аминулович, доктор физико-математических наук, профессор кафедры компьютерного моделирования и нанотехнологий ЮУрГУ, г. Челябинск  Овчинников Владимир Владимирович, доктор физико-математических наук, профессор, главный научный сотрудник, заведующий лабораторией пучковых воздействий ИЭФ УрО РАН, г. Екатеринбург
<b>Ведущая организация:</b>	Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт машиноведения Уральского отделения Российской академии наук (ИМАШ УрО РАН), г. Екатеринбург

Защита состоится «24» мая 2019 г. в 11:00 часов на заседании диссертационного совета Д 004.003.01 при ФГБУН Институте физики металлов им. М.Н. Михеева УрО РАН по адресу: 620108, Екатеринбург, ул. С. Ковалевской, 18.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ИФМ УрО РАН и на сайте института [www.imp.uran.ru](http://www.imp.uran.ru)

Автореферат разослан «\_\_\_» \_\_\_\_\_ 2019 г.

Ученый секретарь  
диссертационного совета,  
доктор физико-математических наук

Чарикова Татьяна Борисовна

## ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

**Актуальность темы исследования и степень ее разработанности.** Фазовые и структурные превращения в многокомпонентных сплавах, традиционно привлекают повышенное внимание исследователей в области физики конденсированного состояния и физического металловедения. Изучение закономерностей фазовых и структурных превращений и умение моделировать их являются необходимыми средствами для решения задачи получения материалов с заданными эксплуатационными свойствами. При этом соотношение экспериментальных исследований и новых методов компьютерного моделирования в данной области последние десятилетия неизменно смещается в сторону последних. Это связано и с взрывным развитием вычислительной техники и с трудностями, которые возникают при обработке экспериментальных данных по многокомпонентным системам без привлечения каких-либо методов компьютерного моделирования.

Значительное число исследований по данной научной проблеме посвящено сталям и сплавам на основе железа. Это обусловлено как многими особенностями самого железа – элемента, обладающего ферромагнитными свойствами, полиморфизмом, большим разнообразием протекающих в нём и его сплавах структурных превращений, так и высокой практической значимостью сталей и сплавов на основе железа, по сей день являющихся одними из основных конструкционных материалов.

Современная промышленность предъявляет высокие требования к конструкционным материалам, и порой требует от них технологически трудно сочетаемых свойств. Такой класс материалов, как малоуглеродистые низколегированные стали с микродобавками сильных карбонитридообразующих элементов, таких как V, Nb и Ti, обладают уникальным комплексом механических свойств: высокая прочность, пластичность, вязкость, хорошая свариваемость, хладостойкость. Состояние ансамбля карбонитридных выделений в ряде случаев решающим образом определяет свойства сталей этого класса. Обработка таких сталей обычно включает операции аустенитизации и горячей деформации.

Существующие на сегодняшний день модели, претендующие на описание эволюции структуры микролегированных сталей при аустенитизации и горячей деформации, как правило, опираются на упрощенные методы кинетического моделирования эволюции карбонитридных фаз. В связи с этим для решения как фундаментальных, так и прикладных задач существует необходимость в создании физически обоснованных моделей эволюции выделений вторых фаз, которые были бы не только совместимы с современными методами и подходами, описывающими деформацию материала, но и могли учитывать взаимное влияние процессов деформации, эволюции выделений и эволюции структуры. Разработка подобных моделей и построенных на их основе алгоритмов и программных комплексов позволит моделировать эволюцию структуры при аустенитизации и горячей деформации и оптимизировать составы и режимы обработки микролегированных сталей.

**Цель работы** является построение модели и программного комплекса на её основе для описания эволюции размера зерна аустенита и эволюции нескольких полидисперсных ансамблей карбонитридных частиц сложного состава в многокомпонентной многофазной системе, близкой по составу к реальной низкоуглеродистой микролегированной стали, при аустенитизации и деформации в температурном диапазоне стабильного аустенита.

**Для достижения этой цели ставились следующие задачи:**

1. На основе CALPHAD-метода построить термодинамическое описание системы Fe–V–Nb–Ti–C–N–Al–Cr–Mn–Ni–Si для температурной области существования аустенита, и выполнить расчеты для анализа влияния таких часто присутствующих в стали элементов как Al,

Cr, Mn, Ni, Si на фазовый состав стали для диапазона концентраций элементов, соответствующей реальной промышленной стали 10Г2ФБЮ.

2. Разработать модель для описания эволюции нескольких полидисперсных ансамблей выделений сложного состава в многокомпонентных системах в процессе изотермической выдержки на всех стадиях процесса: зарождения, роста, растворения и коагуляции. Выполнить расчеты эволюции выделений в низколегированных сталях с добавками нескольких карбонитридообразующих элементов и проанализировать их результаты.

3. Разработать метод для прогнозирования размера зерна при аустенитизации сталей с карбонитридным упрочнением на основе результатов моделирования эволюции выделений и существующих моделей зинеровского типа для предсказания размера зерна материалов, содержащих дисперсные частицы.

4. Построить единую модель для описания эволюции структуры аустенита и состояния карбонитридных выделений при горячей деформации и рекристаллизации с учетом взаимного влияния процессов эволюции карбонитридных выделений и структуры аустенита.

**Научная новизна работы** заключается в следующем:

1. На основе CALPHAD-метода построено термодинамическое описание системы Fe–V–Nb–Ti–C–N–Al–Cr–Mn–Ni–Si для температурной области существования аустенита, включающее фазы, которые могут образовываться при аустенитизации низкоуглеродистых сталей с карбонитридным упрочнением. Разработана программа, предназначенная для проведения расчетов для этой системы. Выполнены расчеты растворимости карбонитридов в аустените для низколегированных малоуглеродистых сталей с V, Nb и Ti на примере стали 10Г2ФБ. Оценено влияние легирующих элементов и примесей (Al, Cr, Mn, Ni и Si) на растворимость карбонитридов.

2. Разработана модель для описания эволюции нескольких ансамблей карбонитридных выделений сложного состава в многофазных многокомпонентных системах. Метод основан на использовании приближения среднего поля для описания эволюции выделений вторых фаз и классической теории зарождения для расчета скорости образования новых зародышевых центров. Он учитывает полидисперсность ансамблей выделений, диффузионное взаимодействие элементов в матрице и может использоваться на всех стадиях эволюции выделений: зарождение, рост, растворение, коагуляция выделений.

3. Предложена модель, в рамках которой описывается эволюция структуры аустенита при горячей деформации и рекристаллизации для случая, когда процессы деформации и рекристаллизации могут сопровождаться выделением карбонитридных фаз, с учетом взаимного влияния этих процессов.

**Практическая значимость работы** заключается в том, что разработанные модели и алгоритмы направлены на решение задачи прогнозирования фазового состава и структуры многокомпонентных многофазных систем при горячей деформации. В данной работе эти методы нашли приложение для малоуглеродистых микролегированных сталей. Это имеет весьма высокую практическую значимость из-за широкого использования и постоянного развития сталей данного класса.

Разработанные модели и программные комплексы на их основе можно использовать как самостоятельный или вспомогательный инструмент инженера-исследователя для изучения фазового состава, эволюции среднего размера зерна и кинетики выделения частиц избыточных фаз, как при отжиге, так и при деформации сталей в температурной области стабильного аустенита. Предложенные модели могут быть применены для других многофазных многокомпонентных систем.

Полученная с помощью программного комплекса информация может быть полезна предприятиям металлургической промышленности для оптимизации химического состава и режимов термической обработки и горячей деформации малоуглеродистых микролегированных сталей.

Научная и практическая значимость работы подтверждается тем, что она создавалась при поддержке государственных фондов, а разработанные модели применялись в ряде хозяйственных договоров.

#### **Методология и методы исследования.**

Построение термодинамического описания для многокомпонентной, многофазной системы Fe–V–Nb–Ti–C–N–Al–Cr–Mn–Ni–Si осуществлялось на основе CALPHAD метода. При построении модели для прогнозирования состояния ансамблей карбонитридных выделений использовались приближение среднего поля и квазистационарное приближение. Для решения систем нелинейных уравнений применялся метод Ньютона-Рафсона. Для прогнозирования среднего размера зерна аустенита использовались модели Зинеровского типа. Моделирование эволюции структуры низколегированной стали осуществлялось с использованием метода внутренней переменной (internal variable method).

Предложенные методы и алгоритмы реализованы в виде программ на языке программирования C#.

#### **Основные положения, выносимые на защиту.**

1. Термодинамическое описание системы Fe–V–Nb–Ti–C–N–Al–Cr–Mn–Ni–Si для температурной области существования аустенита, результаты термодинамических расчетов фазового равновесия для малоуглеродистых низколегированных сталей с добавками V, Nb и Ti и анализ влияния легирующих элементов (Al, Cr, Mn, Ni, Si) на растворимость карбонитридов.
2. Модель для описания эволюции нескольких полидисперсных ансамблей выделений сложного состава в многокомпонентных системах в процессе изотермического отжига на всех стадиях процесса: зарождения, роста, растворения и коагуляции. Результаты расчетов эволюции нескольких полидисперсных ансамблей выделений сложного состава для различных исходных состояний при изотермической выдержке.
3. Метод прогнозирования размера зерна при аустенитизации сталей с карбонитридным упрочнением на основе результатов моделирования эволюции выделений и существующих моделей зинеровского типа.
4. Модель для прогнозирования состояния ансамбля карбонитридных выделений и размера аустенитного зерна в стали, подвергаемой горячей пластической деформации, в температурном диапазоне стабильного аустенита.
5. Результаты расчетов влияния горячей деформации на размер аустенитного зерна и эволюцию карбонитридных частиц сложного состава при горячей деформации микролегированной стали.

#### **Личный вклад автора.**

Автор принимал непосредственное участие в обсуждении постановки цели и задач работы. Все результаты, приведенные в диссертации, получены либо самим автором, либо при его непосредственном участии под руководством научного руководителя В.В. Попова и при научной и методической консультации И.И. Горбачёва. Диссертант принимал непосредственное участие в построении моделей, написании программ и их отладке, в обсуждении результатов, а также в написании статей и тезисов докладов. Результаты исследований неоднократно докладывались лично диссертантом на научных конференциях.

**Достоверность результатов** термодинамического моделирования обеспечивается применением моделей, имеющих строгую физическую основу, использованием в данных моделях

широко апробированных термодинамических параметров, хорошо зарекомендовавших себя в описаниях систем, базовых по отношению к описываемой системе Fe–V–Nb–Ti–C–N–Al–Cr–Mn–Ni–Si. Корректность работы программы контролировалась на всех этапах её создания различными способами, в том числе путём сравнения результатов её работы с литературными данными по фазовому составу ряда систем.

В разработанных методах и моделях используются упрощения и допущения, уже применявшиеся ранее (по отдельности) в ряде физических моделей и доказавшие свою адекватность. Кроме того, достоверность предложенных методов следует из удовлетворительного согласия результатов расчётов, выполненных с использованием данных алгоритмов, с существующими экспериментальными данными.

Результаты исследований, приведенные в диссертационной работе, хорошо согласуются между собой и не противоречат известным научным представлениям и результатам.

#### **Соответствие диссертации паспорту специальности.**

Содержание диссертации соответствует пункту 5 «Разработка математических моделей построения фазовых диаграмм состояния и прогнозирование изменения физических свойств конденсированных веществ в зависимости от внешних условий их нахождения» паспорта специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния.

Диссертационная работа соответствует требованиям, установленным в п. 14 Положения о присуждении ученых степеней. Текст диссертации представляет собой научно-квалификационную работу, не содержит заимствованного материала без ссылок на автора и (или) источник заимствования, не содержит результатов научных работ, выполненных в соавторстве, без ссылок на соавторов.

#### **Апробация работы.**

Результаты работы и отдельные ее разделы были доложены и обсуждены на ряде Всероссийских и Международных конференций: XI Уральская школа-семинар молодых учёных-металловедов и Международная научная школа для молодёжи «Материаловедение и металлофизика лёгких сплавов» (Екатеринбург, 8-12 ноября, 2010 г.); XII Международная научно-техническая Уральская школа-семинар металловедов-молодых учёных (Екатеринбург, 14-18 ноября, 2011 г.); XII, XIII, XIV, XV Всероссийская молодёжная школа-семинар по проблемам физики конденсированного состояния вещества (Екатеринбург, 2011, 2012, 2013, 2014 г.); Научная сессия Института физики металлов УрО РАН по итогам 2015 года (Екатеринбург, 2016 г.); 25th Anniversary International Conference on Metallurgy and Materials METAL 2016 (Brno, Czech Republic, 2016); Пятый Национальный суперкомпьютерный форум (НСКФ-2016) (Переславль-Залесский, 29 ноября – 2 декабря, 2016 г.).

#### **Научные программы и проекты, связанные с диссертацией.**

Диссертационная работа выполнена в рамках государственного задания по теме «Спин» (№01201463330 и АААА-А18-118020290104-2) при поддержке программы фундаментальных исследований УрО РАН (проекты № 12-П-2-1016, № 15-9-2-44 и 18-10-2-37), гранта президиума УрО РАН № 14-2-ИП-43 и проектов РФФИ (№12-08-31539, 16-38-00164).

#### **Публикации по результатам работы.**

Основные результаты диссертации изложены в 6 статьях из перечня рецензируемых журналов, рекомендованных ВАК, а так же получены 4 свидетельства о Государственной регистрации программ для ЭВМ.

## **Структура и объем диссертации.**

Диссертационная работа состоит из введения, пяти глав, заключения и списка цитируемой литературы, который включает 183 наименования. Полный объем работы составляет 118 страниц, включая 238 формулы, 5 таблиц и 22 рисунка.

## **ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ ДИССЕРТАЦИИ**

**Во введении** обоснована актуальность темы исследования, сформулированы цель, задачи и положения, выносимые на защиту. Указана научная новизна и практическая значимость. Приведены сведения об апробации результатов и личном вкладе автора, структуре и объеме диссертации.

**В первой главе** представлен литературный обзор методов и подходов, используемых при моделировании фазовых и структурных превращений. В разделе, посвященном термодинамическому моделированию, кратко изложена суть CALPHAD – метода, который является наиболее подходящим для построения описания и проведения расчётов термодинамического равновесия многокомпонентных систем.

Кроме того, в первой главе проведен анализ существующих методов по моделированию кинетики диффузионных фазовых превращений, который показал, что, несмотря на значительный прогресс, достигнутый к настоящему времени в области моделирования эволюции выделений в матрице, большинство работ не лишены существенных недостатков. В частности, в большинстве исследований рассматривается эволюция выделений относительно простого состава в двухфазной системе. Это достаточно далеко от того, что имеет место в реальных сталях. Большинство моделей имеют дело с частицами стехиометрического состава и предназначены для описания эволюции только одной избыточной фазы, хотя на практике в низколегированных сталях может быть несколько карбонитридных фаз имеющих сложный состав.

Рассмотрены модели и аналитические решения, которые позволяют оценить средний размер зерна материала, основываясь на информации об объемной доле и среднем радиусе дисперсных частиц фаз выделения.

Подробно описаны существующие методы моделирования эволюции структуры при горячей деформации. Имеющиеся модели крайне упрощённо учитывают влияние со стороны выделений вторых фаз на структурообразование, либо не учитывают его вовсе, а для ряда сталей и сплавов именно это влияние решающим образом определяет спектр получаемых свойств.

**Во второй главе** на основе CALPHAD метода построено термодинамическое описание для аустенитной области системы Fe–V–Nb–Ti–C–N–Al–Cr–Mn–Ni–Si. На основе построенного описания выполнен ряд расчётов, в которых исследовалась влияние Al, Cr, Mn, Ni, Si на растворимость карбонитридов в малоуглеродистых низколегированных сталях. Стали моделировались системой Fe–M–V–Nb–Ti–C–N (где M – это Al, Cr, Mn, Ni или Si). Расчёты были выполнены для диапазона составов, соответствующих малоуглеродистым низколегированным сталям, в диапазоне температур, который охватывает аустенитную область и может представлять практический интерес. За основу была выбрана трубная сталь 10Г2ФБЮ, производимая на ряде предприятий.

Таблица 1 – Состав стали 10Г2ФБЮ, мас. %, по ТУ 14-3-1573-96

Al	C	Cr	Mn	N	Nb	Ni	Si	Ti	V
0.02 ÷ 0.05	0.09 ÷ 0.12	≤0.3	1.55 ÷ 1.75	≤0.012	0.02 ÷ 0.05	≤0.3	0.15 ÷ 0.5	0.01 ÷ 0.035	0.08 ÷ 0.12

Исходя из определённого ТУ диапазона составов стали, для проведения расчётов были выбраны следующие концентрации элементов: 0.1 мас. % С, 0.01 мас. % N, 0.035 мас. % Nb, 0.1 мас. % V и 0.01 мас. % Ti.

В исследованном диапазоне составов и температур в равновесии с аустенитом сосуществуют две карбонитридные фазы, одна из них ближе по составу к Nb(C,N), а другая – к (V,Ti)N. Именно таким образом и обозначены данные фазы на рисунке 1, где приводятся результаты расчётов зависимости равновесного фазового состава стали от температуры и количества Al в стали. Расчёты, приведённые на рисунке 1, показывают, что Al может заметно влиять на карбонитридообразование даже в том небольшом количестве, в котором он присутствует в данном сплаве. Наличие Al в аустените меняет растворимость карбонитридов V, Nb и Ti, но главным образом он оказывает влияние через связывание азота в нитрид алюминия AlN. Особенно сильно образование AlN влияет на количество (V,Ti)N: чем больше в сплаве Al и, соответственно, чем больше азота связано в AlN, тем меньше доля (V,Ti)N. Интересно также отметить, что в присутствии в сплаве AlN с увеличением температуры количество (V,Ti)N не уменьшается, а возрастает. По-видимому, такой характер зависимости обусловлен связыванием азота, перешедшего из растворяющегося AlN в (V,Ti)N.

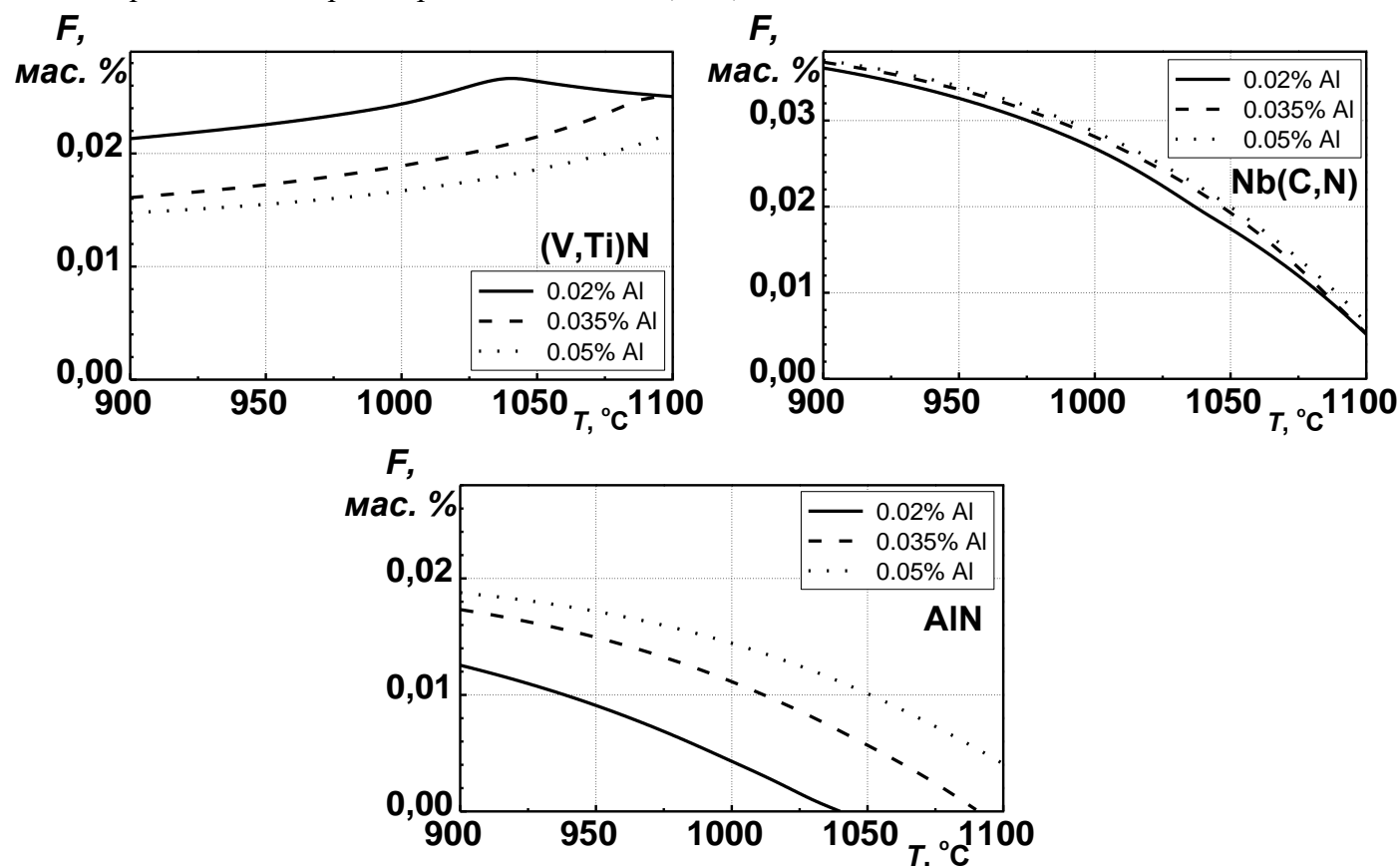


Рисунок 1 – Зависимость количеств вторых фаз от температуры и содержания Al в стали с 0.1 мас. % С, 0.01 мас. % N, 0.035 мас. % Nb, 0.1 мас. % V и 0.01 мас. % Ti.

Проведённые расчёты также показывают, что доля (V,Ti)N практически не зависит от количества Al в системе для температур, при которых AlN полностью растворяется. Кроме того, из рисунка 1 видно, что количество Al в системе оказывает весьма незначительное влияние на растворимость ниобиевого карбонитрида во всём исследованном температурном интервале.

Другие легирующие добавки – Cr, Mn, Ni, Si – могут присутствовать в стали в большем количестве. Mn – почти до 2 мас. %. Чтобы сравнить степень их влияния, были построены зависимости равновесного фазового состава стали от количества этих элементов. Так же, как и для



Al, сталь моделировалась системой Fe-M-V-Nb-Ti-C-N, где M – Cr, Mn, Ni, Si. Состав системы был взят тот же, что и для Al. Результаты расчетов приведены на рисунках 2.

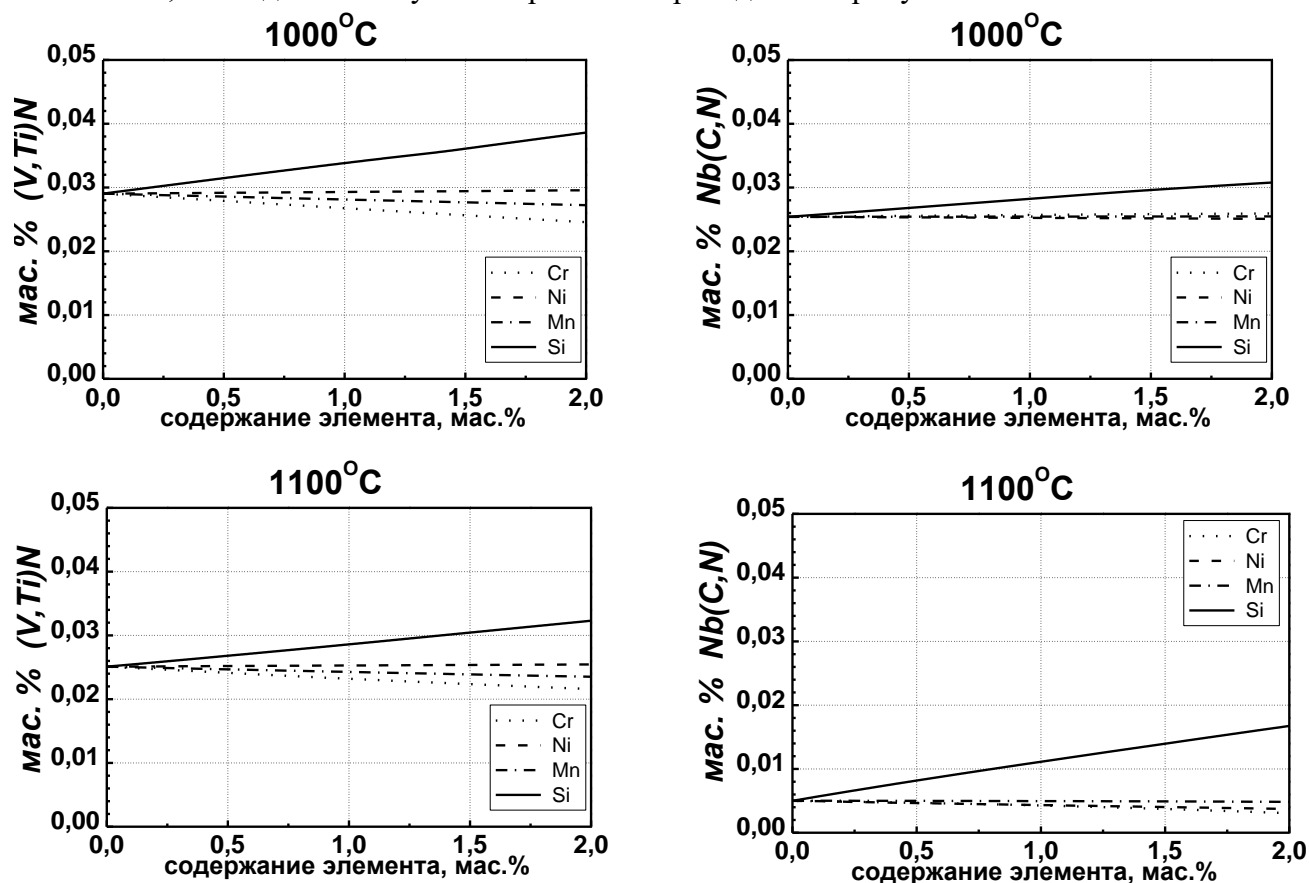


Рисунок 2 – Зависимость количества вторых фаз от температуры от содержания легирующих элементов в стали с 0.1 мас. % C, 0.01 мас. % N, 0.035 мас. % Nb, 0.1 мас. % V и 0.01 мас. % Ti при 1000°C

Результаты расчётов показывают, что из числа рассмотренных легирующих элементов (Al, Cr, Mn, Ni и Si) наибольшее влияние на растворимость карбонитридов оказывают Si и Al (последний – только в том случае, если, кроме кубических карбонитридов, образуется нитрид алюминия AlN). Остальные элементы в диапазоне составов, характерном для низколегированных сталей, на растворимость карбонитридов влияют незначительно.

**В третьей главе** предложен метод моделирования эволюции полидисперсного ансамбля карбонитридных частиц в сталях. Метод учитывает многокомпонентность системы, диффузионное взаимодействие элементов в твёрдом растворе, конечную объёмную долю выделений и описывает эволюцию выделений на всех стадиях: зарождения, роста, растворения и коагуляции. Его основными особенностями являются возможность моделирования поведения выделений сложного состава, а также совместной эволюции ансамблей выделений нескольких составов (с учетом образования новых зародышевых центров).

#### Краткое описание модели

При построении модели предполагалось, что все выделения имеют сферическую форму и постоянный состав, на межфазных границах устанавливается локальное термодинамическое равновесие, а массоперенос осуществляется объёмной диффузией в матрице. Кроме того, не учитывалось влияние упругих напряжений на условия локального равновесия и массоперенос в системе.

Исходными данными для модели служат объёмная доля выделений ( $F$ ) и распределение частиц по размерам в исходном состоянии. Распределения частиц по размерам задаются

гистограммами, соответствующих выделениям различного состава. В этих гистограммах  $k$ -му размерному классу частиц ставится в соответствие доля частиц, попадающая в данный размерный интервал. Метод основан на использовании приближения среднего поля, согласно которому концентрации всех элементов на границах полевых ячеек одинаковы (одинаковое среднее окружение). Радиус полевой ячейки, связанной с частицей фазы  $f$   $l$ -го размерного интервала, рассчитывается по формуле:

$${}^f R_l = {}^f R_l \left( \sum_f F_f \right)^{-1/3}, \quad (1)$$

где  $F_f$  – объёмная доля фазы  $f$ , а  ${}^f R_l$  – радиус частицы. Система уравнений диффузии, описывающих потоки вещества в ячейке, связанной с частицей фазы  $f$   $l$ -го размерного интервала, для  $(N+1)$ -компонентной системы имеет вид:

$$\frac{\partial C_i^{fl}}{\partial \tau} = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \cdot \sum_{j=1}^N \tilde{D}_{ij} \frac{\partial C_j^{fl}}{\partial r} \right), \quad (2)$$

где  $C_j^{fl}$  – концентрация  $i$ -го компонента в полевой ячейке  $l$ -го интервала размеров для выделений состава  $f$ ;  $\tilde{D}_{ij}$  – парциальные коэффициенты взаимной диффузии в матрице, а  $r$  – пространственная переменная. При нахождении распределений концентраций элементов использовалось приближение стационарного поля. В этом случае уравнения (2) приобретают вид:

$$\sum_{j=1}^N \tilde{D}_{ij} \frac{\partial C_j^{fl}}{\partial r} = \frac{{}^f K_i^l}{r^2}, \quad (3)$$

где  ${}^f K_i^l$  – константа для  $i$ -го элемента в ячейке размерного интервала  $l$  для выделений состава  $f$ .

Условия баланса масс на межфазной границе между частицей  $k$ -го размерного класса и матрицей имеют вид:

$$\left[ {}^P C_i \nu_m^M / \nu_m^P - {}^{M/P} C_i^k \right] \frac{dR_k}{d\tau} = \frac{K_i^k}{r^2} \Bigg|_{r=R_k}, \quad (4)$$

где  $\nu_m^P$  и  $\nu_m^M$  – молярные объемы фазы выделения и матрицы соответственно;  ${}^{M/P} C_i$  и  ${}^P C_i$  – концентрации  $i$ -го компонента в матрице на границе с выделением и в выделении, соответственно,  $\tau$  – время, а  $R_k$  – средний радиус частиц  $k$ -го интервала размеров. Условия локального термодинамического равновесия на межфазной границе имеют вид:

$$\bar{G}_i^{p/m} + \frac{2 \cdot \sigma \cdot \nu^p}{R_k} = \bar{G}_i^{m/p}, \quad (5)$$

где  $\bar{G}_i^{p/m}$  и  $\bar{G}_i^{m/p}$  – химические потенциалы  $i$ -го элемента на межфазной границе в частице и матрице соответственно;  $\sigma$  – удельная поверхностная энергия межфазной границы выделение/матрица;  $\nu^p$  – объем одной формульной единицы фазы выделения. Кроме того, из-за использования квазистационарного приближения к этим уравнениям необходимо добавить условие сохранения массы, которому должны удовлетворять рассчитанные средние концентрации компонентов в матрице:

$$\sum_f \alpha_f {}^f C_i + (1 - \sum_f \alpha_f) \bar{C}_i = {}^0 C_i, \quad (6)$$

где  $\alpha_f$  – мольная доля фазы выделения состава  $f$ ,  $\bar{C}_i$  – средняя концентрация растворенного компонента в матрице,  ${}^0C_i$  – концентрация растворенного компонента в сплаве. Средние значения концентраций компонентов в матрице выражаются через распределения концентраций в ячейках следующим образом:

$$\bar{C}_i = \frac{\sum_{f=1}^S \sum_{l=1}^{m_f} {}^f H_l \sum_{k=1}^{n_f} \frac{{}^\gamma C_i^{fl}(k_f) + C_i^{fl}(k_f - 1)}{2} ({}^f r_i^3(k_f) - {}^f r_i^3(k_f - 1))}{\sum_{f=1}^S \sum_{l=1}^{m_f} {}^f H_l (({}^f R_l^L)^3 - ({}^f R_l)^3)}, \quad (7)$$

где  $m_f$  – число размерных интервалов для частиц фазы  $f$ ;  $k_f$  – номер узла в ячейке, связанной с выделениями  $f$ -го состава;  $N_f$  – число частиц фазы  $f$  на единицу объема;  $S$  – число избыточных фаз в сплаве;  ${}^f H_l$  доля частиц этой фазы, попадающих в этот размерный интервал среди выделений всех составов. Значение  ${}^f H_l$  рассчитывается как:

$${}^f H_l = {}^f h_l N_f / \sum_{f=1}^S N_f \quad (8)$$

где  $N_f$  число частиц фазы  $f$  в единице объема:

$$N_f = \sum_{l=1}^{m_f} \frac{F_f {}^f h_l}{4/3 \pi ({}^f R_l)^3}. \quad (9)$$

Для описания зарождения использовался подход [1] на основе классической теории зарождения. В [1] показано, что, если зародыши образуются на дислокациях, то скорость зарождения и энергия Гиббса зародыша критического размера могут быть рассчитаны по формулам:

$$J = \rho D_{eff} X / a^3 \exp\left(-\frac{\Delta G_{crit}}{RT}\right) \quad (10)$$

$$\Delta G_{crit} = \frac{16\pi \zeta^3 \sigma_n^3}{3(\Delta G_{chem} + \Delta G_\varepsilon)}, \quad (11)$$

где  $\rho$  – это плотность дислокаций,  $a$  – период решётки матрицы,  $R$  – универсальная газовая постоянная,  $T$  – температура, К.  $\Delta G_{crit}$  – изменение энергии системы при образовании одного моля зародышей новой фазы критического радиуса.  $D_{eff}^M$  и  $X$  – эффективный коэффициент диффузии и концентрация элемента, контролирующего процесс зарождения. В рассматриваемом случае это концентрации карбонитридообразующих элементов в матрице на границе с карбонитридными выделениями и эффективные коэффициенты диффузии этих элементов в аустените.  $\sigma_n$  – удельная поверхностная энергия межфазной границы зародыш/матрица.  $\zeta$  – поправочный множитель к поверхностной энергии межфазной границы, связанный с присутствием дислокаций, который имеет значение между нулем и единицей,  $\Delta G_{chem}$  и  $\Delta G_\varepsilon$  – изменения химической свободной энергии и свободной энергии напряжений при образовании единицы объема новой фазы.

### Методика численных расчетов

Порядок расчетов эволюции выделений нескольких избыточных фаз сложного состава был следующим:

1. Расчет размеров полевых ячеек, связанных с частицами всех избыточных фаз и разных размерных интервалов, по формуле (1).
2. Построение пространственных сеток в полевых ячейках для всех фаз и всех размерных интервалов.
3. Расчет концентраций элементов на границах ячеек  $C_i^L$ , соответствующих условию сохранения массы (6).
4. Расчет распределений концентраций компонентов в ячейках и скоростей движения межфазных границ для частиц всех избыточных фаз всех размерных интервалов по ур. (3)-(5).
5. Расчет скоростей зарождения выделений для всех избыточных фаз по ур. (10)-(11).
6. Расчет распределений частиц по размерам и объемных долей для всех избыточных фаз на новом временном слое без учета образования новых зародышевых центров.
7. Расчет распределений частиц по размерам и объемных долей для всех избыточных фаз на новом временном слое с учетом процессов зарождения.

Уравнения (3) – (6) решались численно методом Ньютона-Рафсона с использованием метода конечных разностей для расчета распределений концентраций компонентов в ячейках. Найденные значения объемных долей избыточных фаз и распределений их частиц по размерам использовались как исходные для расчетов на новом временном шаге и т.д. Эта процедура повторялась, пока не достигалось необходимое время.

#### **Результаты моделирования**

Учет образования новых зародышевых центров для карбонитридных выделений сложного состава был продемонстрирован на примере стали со следующим составом: 0.1%С, 0.008%N, 0.02%Nb и 0.015%Ti. Расчеты были проведены для температурного интервала 900÷1000°С.

Согласно данным программы GenieY [2], в данном температурном диапазоне в равновесии с аустенитом находятся два карбонитрида составов  $Nb(C_{0.77}N_{0.23})_{0.97}$  и  $(Ti_{0.85}Nb_{0.15})(C_{0.01}N_{0.99})$ . Для удобства их можно обозначить как Nb(C,N) и (Ti,Nb)N. При моделировании предполагалось, что в исходном состоянии избыточные фазы отсутствуют, и при дальнейшей изотермической выдержке происходит их зарождение, рост и коагуляция. На рисунке 3 приведены зависимости объемной доли и среднего радиуса выделений от времени для температур 900, 950 и 1000 °С для случая полного отсутствия избыточных фаз в исходном состоянии. По результатам расчётов видно, что Объемная доля Nb(C,N) увеличивается с температурой достаточно медленно, по сравнению с (Ti,Nb)N. Для достижения объёмной доли этой фазы, близкой к равновесной, при температуре 900 °С требуется порядка 40 тысяч секунд. При дальнейшем отжиге объемная доля этих выделений уже не меняется, и наступает стадия коагуляции, в процессе которой радиусы частиц увеличиваются значительно медленнее, чем на стадии роста. С ростом температуры уменьшается как время достижения равновесного значения объемной доли, так и сама равновесная объемная доля Nb(C,N).

Равновесная объемная доля второй карбонитридной фазы – (Ti,Nb)N – в температурном интервале 900÷1000°С практически не зависит от температуры выдержки. Но время достижения равновесной объемной доли этой фазой и, соответственно, время наступления стадии коагуляции, естественно, уменьшается с повышением температуры. При самой высокой температуре расчетов для (Ti,Nb)N она начинается после 300 секунд.

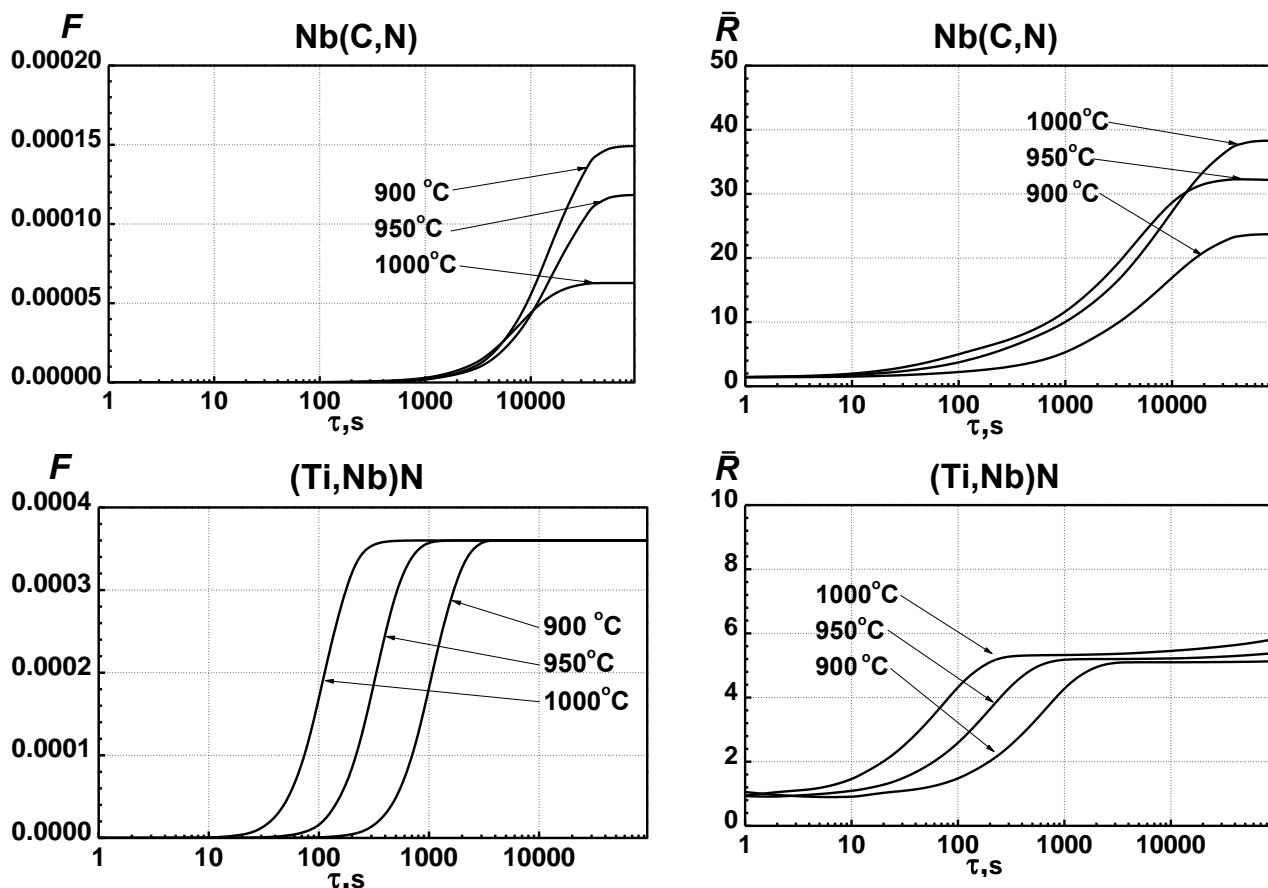


Рисунок 3 – Изменение объёмной доли и среднего радиуса частиц в процессе изотермической выдержки при различных температурах для стали с составом 0.1%С, 0.008%N, 0.02%Nb и 0.015%Ti.

**В четвертой главе** даётся оценка возможностей прогнозирования размера аустенитных зёрен на основе моделирования эволюции карбонитридных частиц методом, описанным в предыдущей главе, совместно с выражениями Зинеровского типа для расчёта максимального размера аустенитного зерна, который может быть достигнут в стали после рекристаллизации с учётом сдерживающего эффекта выделений вторых фаз.

Оценка возможностей прогнозирования размера аустенитного зерна при аустенитизации на основе результатов расчетов эволюции ансамбля выделений была выполнена на примере малоуглеродистой низколегированной стали с Nb и Ti, размер зерна которой для различных температур аустенитизации определялся в работе [3]. Образцы в работе [3] были получены горячей прокаткой в аустенитной области с последующим охлаждением до 550-650°C. Химический состав (мас. %) стали был следующим: 0.06%С, 0.005%N, 0.034%Nb, 0.012%Ti и 1.65%Mn.

Термодинамический расчет показывает, что в данной стали титан практически полностью связывается в фазу, близкую по составу к нитриду титана, уже при температуре 1200°C, что приблизительно соответствует температуре нагрева под прокатку. Исходя из этого, начальное количество (0.0155 мас.%) фазы на основе TiN для моделирования было оценено из расчёта, что в нее связывается практически весь присутствующий в стали Ti. На основании этого значения с учетом плотностей TiN и  $\gamma$ -Fe была рассчитана объёмная доля TiN и получены значения от 0.0224 до 0.0227% (для температур от 950 до 1250°C соответственно). На основании анализа результатов работ [4-5] было принято, что средний радиус дисперсных нитридов титана в исходном состоянии составляет ~ 20 нм, а распределение частиц по размерам является нормальным.

Карбонитриды ниобия выделяются при более низких температурах, чем нитриды титана. Как показано в [3], при температурах выше 1050°C карбонитриды ниобия полностью растворяются. При температурах 950-1050°C равновесный состав карбонитридов ниобия соответствует формуле  $Nb(C_{0.86}N_{0.14})_{0.96}$ . При расчетах предполагалось, что карбонитриды ниобия имеют такой состав.

В работах [6-8] было показано, что в горячекатанных сталях с ниобием карбонитриды частично выделяются в аустените, а частично в феррите. Согласно [7] средний радиус карбонитридов, выделившихся из аустенита, составляет ~ 7.5 нм, а из феррита – ~2.5 нм. Объемная доля карбонитридов ниобия, выделившихся из аустенита, согласно [6], для данной стали составляет 0.000087. Объемная доля карбонитридов, выделившихся в феррите, была оценена на основании данных работы [8]. Было получено значение 0.000201. Исходное распределение карбонитридов ниобия задавалось в виде суммы двух нормальных распределений с центрами 2.5 и 7.5 нм, соответственно.

Первым этапом расчётов было моделирование поведения карбонитридных выделений при изотермическом отжиге. Результаты моделирования представлены на рисунке 4, где показано изменение объемных долей и средних радиусов частиц  $Nb(C,N)$  и  $TiN$  для различных температур.

Видно, что в процессе изотермической выдержки частицы  $Nb(C,N)$  частично или полностью растворяются. При температурах 1150 и 1250°C имеет место полное растворение частиц  $Nb(C,N)$ . При этом средний радиус выделений сначала возрастает вследствие того, что в первую очередь растворяются наиболее дисперсные частицы, а затем уменьшается вплоть до полного растворения выделений этой фазы. Такой характер изменения среднего радиуса частиц карбонитрида ниобия является следствием исходного бимодального распределения частиц  $Nb(C,N)$  по размерам. При температуре 1050°C выделения  $Nb(C,N)$  в значительной степени растворяются – их объёмная доля после выдержки в течение 20 минут снижается в 8 раз по сравнению с исходной. Средний радиус выделений при этой температуре, как и при более высоких температурах, сначала возрастает вследствие интенсивного растворения наиболее мелких частиц, а потом уменьшается. И наконец, после достижения объёмной доли  $Nb(C,N)$  значения, близкого к равновесному, происходит увеличение среднего радиуса этих частиц вследствие наступления стадии коагуляции. В процессе коагуляции происходит небольшое увеличение объёмной доли  $Nb(C,N)$  из-за уменьшения растворимости этой фазы вследствие увеличения размера частиц.

При температуре 950°C имеет место лишь незначительное растворение частиц  $Nb(C,N)$ , которое затем сменяется стадией коагуляции. Вследствие протекания этих процессов средний радиус частиц  $Nb(C,N)$  увеличивается в процессе изотермической выдержки, но это увеличение невелико. Средний радиус выделений  $Nb(C,N)$  увеличивается приблизительно в 1.5 раза за 20 минут.

По результатам моделирования можно сделать вывод, что частицы  $Nb(C,N)$  играют заметную роль в сдерживании роста аустенитного зерна только при 950°C. При 1050°C их вклад становится уже не такой значительный, а при более высоких температурах они и вовсе не оказывают влияния на размер аустенитного зерна.

Заметные изменения объёмной доли и размеров частиц карбонитридной фазы на основе нитрида титана происходят только при самой высокой температуре выдержки – 1250°C. При более низких температурах выдержки изменения объёмной доли и размеров частиц  $TiN$  незначительны.

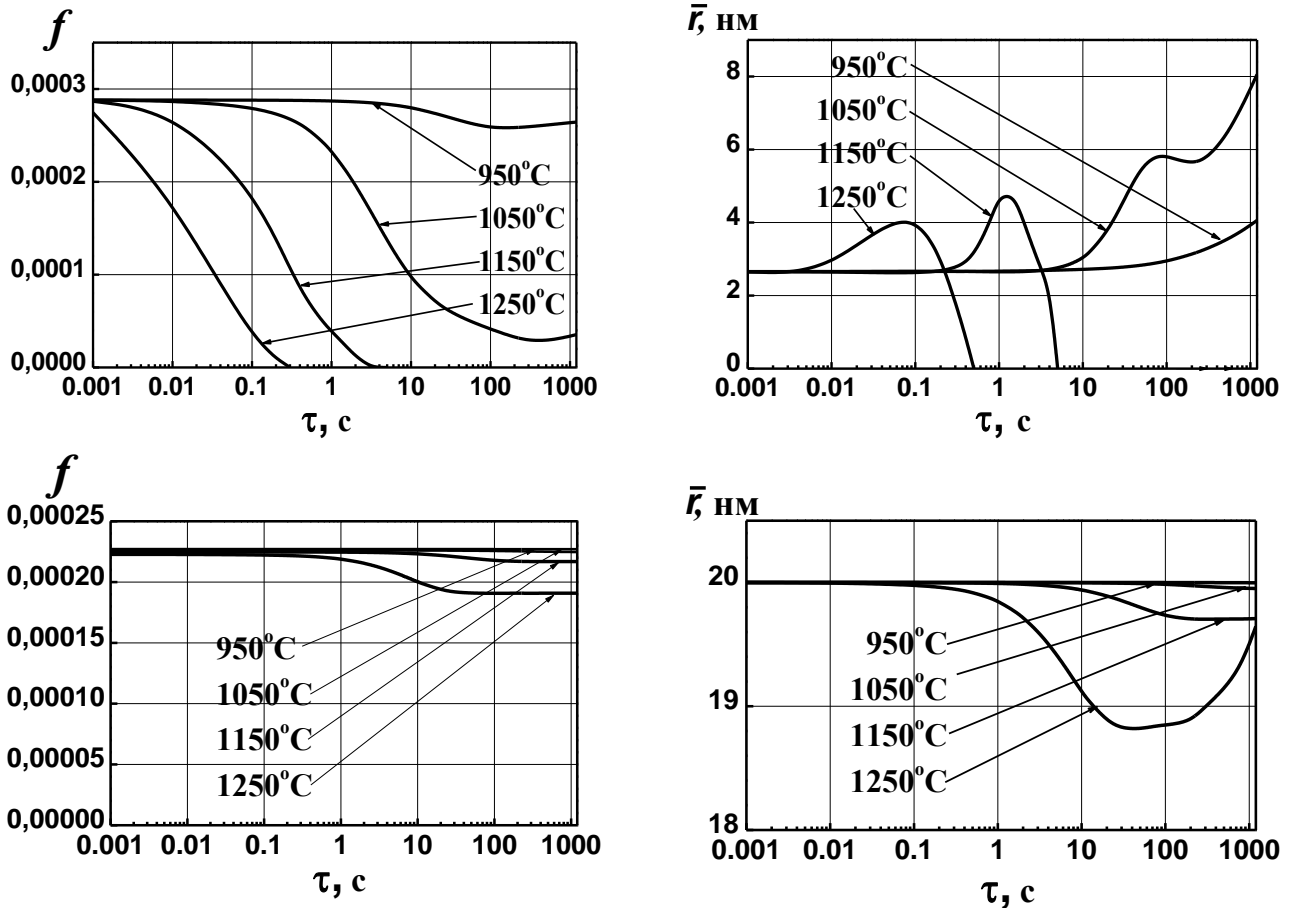


Рисунок 4 – Изменение объёмной доли  $f$  и среднего радиуса  $\bar{r}$  частиц TiN и Nb(C,N) в процессе изотермической выдержки при различных температурах

Было проведено сравнение экспериментальных значений среднего размера аустенитного зерна после 20-ти минутной выдержки при различных температурах с результатами оценки на основании формул из таблицы 2 и данных о состоянии ансамбля выделений (объемная доля и распределение частиц по размерам). При расчетах в соответствующие уравнения вместо отношения  $r/f^m$  подставлялась величина  $\left[ \sum_i (f_i^m / r_i) \right]^{-1}$ .

Удовлетворительное согласие с экспериментом дают выражения, полученные Гладманом для  $Z=2$  [9], Риосом [10] и Хиллертом [11], соответственно. Сравнение результатов расчетов размера аустенитного зерна с использованием этих выражений с экспериментальными данными для 20-ти минутных отжигов при различных температурах приведено в таблице 2.

Таблица 2 – Сравнение результатов расчётов размеров аустенитного зерна с использованием различных моделей с экспериментальными данными

T, °C	D <sub>calc.</sub> , мкм			D <sub>exp.</sub> , мкм
	$D_{cr} = \left[ 2\pi \left( \frac{1}{4} - \frac{1}{3}Z \right) \right] \frac{r}{f}, (Z=2)$ [9]	$D_{cr} = \frac{r}{3f}$ [10]	$D_{cr} = \frac{4r}{9f^{0.93}}$ [11]	
950	8.6	5.6	6.5	7.5
1050	37	24	26.8	23
1150	53.5	34.8	40.3	48
1250	61.7	40.1	46	60

Из таблицы 2 видно, что все три модели дают удовлетворительное согласие с экспериментом. Отдельно следует отметить, что, хотя для высокотемпературной области (1150÷1250°C) наилучшее согласие дает формула Гладмана для ( $Z=2$ ), нельзя сделать вывод о том, что именно она является самой подходящей для использования во всех случаях, поскольку она содержит подгоночный параметр  $Z$ . Сам Гладман указывал, что  $Z$  может меняться от  $\sqrt{2}$  до 2, а некоторые другие авторы считали, что он может быть равен и 3, и даже 5. Очевидно, что с такими значениями согласие с экспериментом было бы значительно хуже.

**В пятой главе** предложена модель для прогнозирования фазового состава и размера аустенитного зерна низколегированной стали, подвергаемой горячей деформации в температурном диапазоне стабильного аустенита. В модели учитывается взаимное влияние изменения таких процессов как изменение плотности дислокаций и размеров аустенитного зерна, а также эволюции выделений вторых фаз. Модель также учитывает полидисперсность ансамблей выделений. В основе метода лежит совместное использование деформационной модели на основе так называемого метода «внутренней переменной» и представленной в третьей главе кинетической модели для описания эволюции вторых фаз в многофазных многокомпонентных системах.

Для описания эволюции плотности дислокаций в материале рассчитывается изменение средней плотности дислокаций в сплаве  $\bar{\rho}$ , которая связана с плотностью дислокаций в деформированных,  $\rho_{Def}$ , и рекристаллизованных зёрнах,  $\rho_0$ , соотношением:

$$\bar{\rho} = (1 - X)\rho_{Def} + X\rho_0, \quad (12)$$

где  $X$  – доля материала, претерпевшего рекристаллизацию.

При этом использовалось модельное допущение о том, что  $\rho_{Def}$  одинакова во всех деформированных зёрнах, а  $\rho_0$  полагалась постоянной величиной. Таким образом, изменение средней плотности дислокаций в материале можно записать как:

$$\frac{d\bar{\rho}}{dt} = (\rho_0 - \rho_{Def}) \frac{dX}{dt} + (1 - X) \frac{d\rho_{Def}}{dt}. \quad (13)$$

Здесь  $t$  – время, а  $dX/dt$  – скорость рекристаллизации.

Для вычисления плотности дислокаций в деформированных зернах, использован подход, предложенный в работе [12]. При этом было сделано допущение, что статические и динамические процессы возврата и рекристаллизации описываются одинаковыми выражениями. Выражение для изменения плотности дислокаций в деформированном материале имеет вид:

$$\frac{d\rho_{Def}}{dt} = \frac{\dot{\epsilon}}{bd} - k\dot{\epsilon}\rho_{Def}, \quad (14)$$

где  $\dot{\epsilon}$  – скорость деформации,  $b$  – вектор Бюргерса,  $d$  – длина свободного пробега дислокации,  $k$  – коэффициент динамического возврата,  $t$  – время.

Согласно [13] доля материала, претерпевшего рекристаллизацию, как функция скорости миграции границ зерен  $v_b$  и скорости образования зародышей рекристаллизации  $\dot{N}$ , может быть представлена в виде:

$$X = 1 - \exp\left(-\frac{\pi}{3}\dot{N}v_b^3t^4\right). \quad (15)$$

Чтобы учесть влияние выделений вторых фаз при описании скорости миграции границы зерна, рассматривается суперпозиция сил, действующих на границу зерна аустенита. В этом случае скорость миграции границы описывается выражением:

$$v_b = m(P_d - P_z), \quad (16)$$



где  $m$  – подвижность границ зерен,  $P_d$  – движущая сила роста зерна, которая задается как давление на единицу площади границы зерна;  $P_Z$  – тормозящая сила, препятствующая миграции и действующая со стороны частиц.

Скорость зарождения  $\dot{N}$  новых зёрен для динамической рекристаллизации рассчитывалась по формуле [13]:

$$\dot{N} = A \exp\left(-\frac{Q_n}{RT}\right), \quad (17)$$

где  $A$  – константа, зависящая от температуры,  $Q_n$  – энергия активации образования зародышей,  $T$  – абсолютная температура,  $R$  – универсальная газовая постоянная.

Выражение (17) описывает скорость зарождения только при динамической рекристаллизации. Образованием новых зародышей при статической рекристаллизации в данной работе мы пренебрегали. Это допущение не должно вносить существенной погрешности, если уже прошла динамическая рекристаллизация.

Подвижность высокоугловых границ зерен  $m$  зависит от температуры и может быть описана аррениусовской зависимостью:

$$m = m_0 \exp\left(-\frac{Q}{RT}\right), \quad (18)$$

где  $m_0$  – предэкспоненциальный множитель;  $Q$  – энергия активации движения границы.

Рост рекристаллизованных зерен зависит от разности плотностей дислокаций в рекристаллизованных,  $\rho_{Rex}$ , и деформированных зернах,  $\rho_{Def}$ , таким образом, движущая сила может быть определена как:

$$P_d = \tau(\rho_{Def} - \rho_{Rex}) + \frac{4\sigma_g}{D}, \quad (19)$$

где  $\sigma_g$  – удельная энергия границы зерна, а  $\tau = Gb^2/2$  – энергия дислокации, приходящаяся на единицу ее длины.

Плотность дислокаций в рекристаллизованных зернах предполагалась равной плотности дислокаций для заданной температуры, которая рассчитывалась как [1]:

$$\rho_0 = \left[1.68 \cdot 10^9 \cdot \exp\left(\frac{5020}{RT}\right)\right]. \quad (20)$$

Дисперсные частицы тормозят движение границы зерна. Тормозящая сила  $P_Z$ , действующая со стороны сферических частиц распределенных случайным образом в матрице, выражается как:

$$P_Z = \frac{3\gamma}{2} \sum_i (F_i/R_i), \quad (21)$$

где  $F_i$  – объемная доля, приходящаяся на частицы со средним радиусом  $R_i$  из  $i$ -го размерного интервала. Критическая плотность дислокаций, необходимая для начала рекристаллизации, согласно работе [14], определяется как:

$$\rho_{cr} = \frac{8\sigma_g}{\tau l}. \quad (22)$$

Для расчета скорости рекристаллизации необходимы данные о характеристиках ансамбля выделений вторых фаз – их объемных долях и распределении по размерам. Эту информацию обеспечивает “кинетическая” часть модели, описанная в третьей главе. Входными данными для неё являются составы сплава и карбонитридных фаз, а также объемные доли выделений и распределения частиц по размерам в текущий момент времени для каждой фазы. Кроме того, в качестве входного параметра здесь используется средняя плотность дислокаций в образце,  $\bar{\rho}$ , которая необходима для расчёта скорости зарождения новых выделений. На основании этих параметров прогнозируется последующее изменение объёмных долей и распределение по размерам карбонитридных частиц.

## **Моделирование эволюции карбонитридных частиц сложного состава при горячей деформации.**

Для тестирования возможностей прогнозирования эволюции ансамбля карбонитридных выделений в сталях, подвергаемых горячей деформации, с помощью предложенного алгоритма было выполнено сравнение результатов расчетов с данными экспериментальных исследований. За основу для сравнения были взяты экспериментальные данные, полученные в [15]. В этой работе изучали эволюцию частиц вторых фаз при различных термических и термомеханических обработках микролегированной стали. С помощью методики просвечивающей электронной микроскопии углеродных реплик получали информацию о составе и морфологии частиц и их распределении по размерам для каждого состава частиц и вида обработки. Исследования были выполнены на малоуглеродистой низколегированной стали с Ti и Nb, химический состав которой (в мас. %) был следующим: 0.05%С, 0.0043%N, 0.002%V, 0.094%Nb, 0.015%Ti и 1.66%Mn.

Образцы в работе [15], вырезанные из промышленной заготовки, сначала подвергались выдержке при 1250°C в течение 900 секунд, затем часть образцов закаливали и изучали фазовый состав и состояние ансамбля карбонитридных частиц. Остальные образцы быстро охлаждали до 900°C. Половина из них подвергалась горячей деформации сжатием со скоростью  $3 \text{ с}^{-1}$  до достижения степени деформации 0.4, после чего шла изотермическая выдержка при температуре деформации длительностью 180 секунд и закалка, после которой исследовался фазовый состав и состояние ансамбля карбонитридных частиц. Другая половина образцов просто выдерживалась при температуре 900°C без деформации в течение 180 секунд, затем закалялась, после чего также изучалось состояние ансамбля карбонитридных частиц.

Исходной точкой для моделирования является момент времени, когда выдержка при 1250°C закончена, и образцы охладили до 900°C. Предполагалось, что в этот момент в стали присутствуют только частицы карбонитридной фазы состава  $(\text{Ti}_{0.97}, \text{Nb}_{0.03})(\text{C}_{0.035}, \text{N}_{0.965})_{0.98}$  (на рисунках он обозначен как TiN) со средним размером частиц 118 нм и объемной долей 0.02446% (соответствует массовой доле 0.01559%). Исходное распределение частиц по размерам для этой фазы было взято из работы [15]. Объемные доли выделений в [15] не измерялись. По этой причине они были оценены с помощью программы GenieY [2].

Что касается второго карбонитрида – на основе карбида ниобия, – то предполагалось, что после быстрого охлаждения образца до 900°C он ещё не успел выделиться в заметном количестве, а будет зарождаться и расти в процессе дальнейшей обработки (деформации и изотермической выдержки). Состав этой фазы был взят на основе термодинамических расчетов –  $\text{Nb}(\text{C}_{0.98}, \text{N}_{0.02})_{0.96}$  (на рисунках эта фаза обозначена как NbC).

### **Результаты расчетов и их сравнение с экспериментальными данными.**

При моделировании производились расчеты для двух обработок, использовавшихся в работе [15]: первая представляла собой деформацию со скоростью  $3 \text{ с}^{-1}$  до достижения степени деформации 0.4 при температуре 900°C с дальнейшей выдержкой 180 секунд, а вторая – только изотермическую выдержку при 900 °C. На рисунке 5 представлено сравнение экспериментальных и расчётных распределений частиц по размерам для карбонитрида ниобия после двух обработок. Видно, что при отсутствии предварительной деформации наблюдается несколько лучшее качественное и количественное согласие экспериментальных и теоретических результатов. В этом случае средний размер частиц, полученный в экспериментальной работе, составил 15 нм, в то время как в расчётном распределении он получился равным 11 нм.

Однако когда отжигу предшествовала деформация, согласие оказалось несколько хуже. И, хотя экспериментальные и расчётные гистограммы для этого случая, приведённые на рисунке 5, качественно похожи, расчётный купол распределения гистограммы смещен в сторону меньших

размеров. Средний размер выделений, полученный в экспериментальной работе, составил 11 нм, а расчётный оказался равным 7 нм.

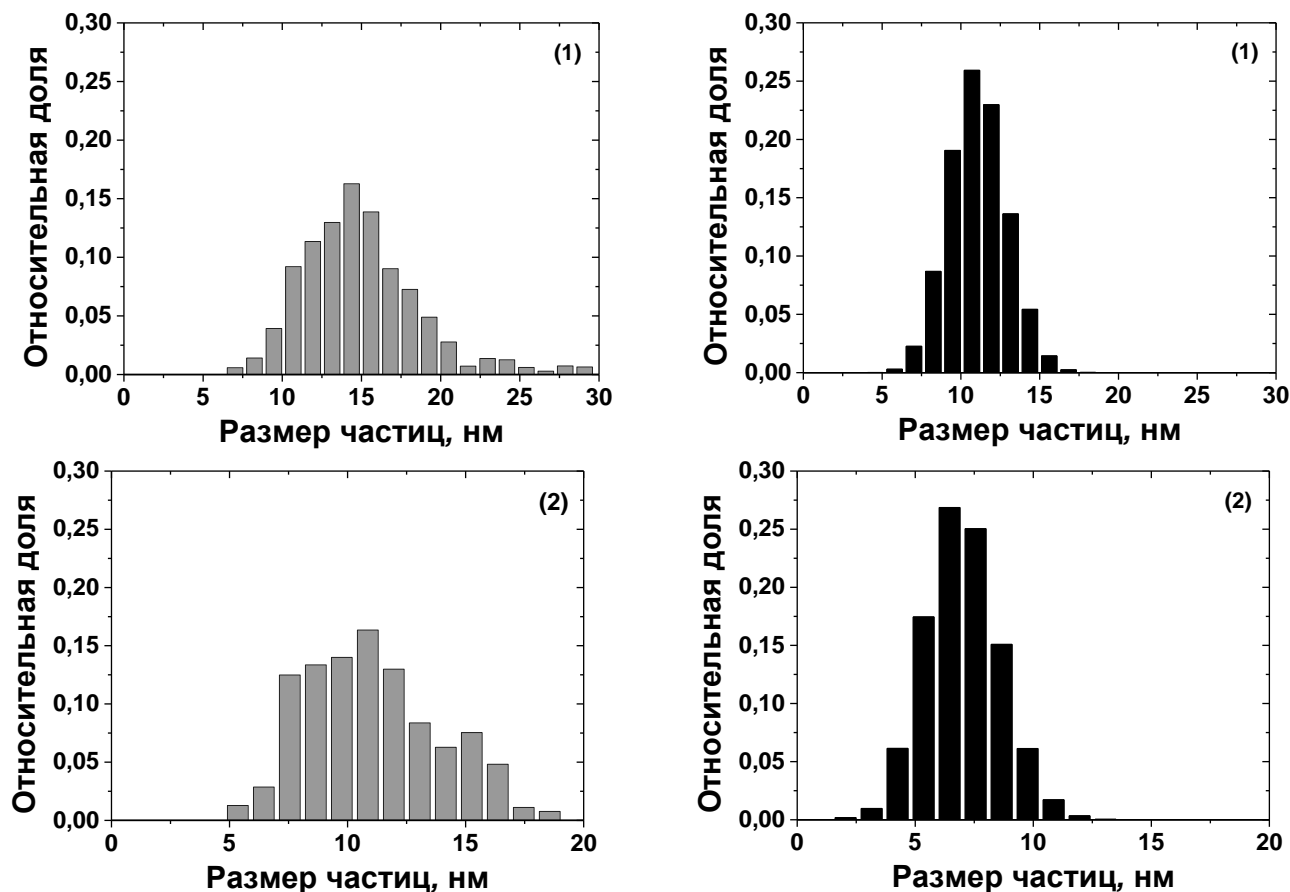


Рисунок 5 – Гистограммы распределения частиц карбонитрида ниобия по размерам. Серым цветом обозначены экспериментальные данные, черным цветом результаты моделирования. (1) обозначает обработку с изотермической выдержкой. (2) – обработку с деформацией и последующей изотермической выдержкой.

Можно предположить ряд причин получившегося расхождения экспериментальных данных и результатов расчетов. Так, в представленном алгоритме учитывается только объемная диффузия, поэтому при обработке, включающей деформацию (где может значительно возрастет роль других механизмов диффузии), расхождение результатов расчетов и экспериментов наиболее сильное. Кроме того, модель учитывает зарождение только на дислокациях, хотя, вероятно, оно может происходить и на других дефектах структуры, таких как границы зерен. Вероятно также, что экспериментальные методики, примененные в работе [15], тоже могут вносить некоторые погрешности. Например, метод углеродных реплик может не обнаруживать частицы меньше 3-4 нм, что в свою очередь сдвигает экспериментально полученное распределение в область более крупных размеров. Результаты для TiN в автореферате не приводятся, поскольку эта фаза не чувствительна к предварительной деформации и средний размер частиц практически не изменяется для двух обработок.

### **Моделирование влияния горячей деформации на размер аустенитного зерна низколегированных сталей с карбонитридным упрочнением.**

Для тестирования возможностей прогнозирования изменения размера аустенитного зерна при высокотемпературной деформации с помощью предложенного алгоритма также было выполнено сравнение результатов расчетов с данными экспериментальных исследований. За

основу были взяты экспериментальные данные, полученные в работе [16]. В этой работе с помощью лазерно-ультразвукового метода было проиллюстрировано влияние различных условий деформации, таких как скорость деформации, степень деформации и температуры, на эволюцию размера зерна аустенита. Исследования были выполнены на малоуглеродистой низколегированной стали с Nb, химический состав которой (в мас. %) был следующим: 0.05%С, 0.004%N, 0.05%Al, 0.048%Nb, 0.04%Si и 1.88%Mn.

В работе [16] образцы подвергались одноосному сжатию при различных температурах и скоростях деформации. Перед испытаниями образцы нагревали до температуры 1250°C, выдерживали при этой температуре в течение 120 секунд, затем охлаждали со скоростью 10°C в секунду до температуры деформации и после выдержки в течение 5 секунд для устранения температурного градиента, подвергали сжатию с разными степенями и скоростями деформации.

После окончания деформации образцы выдерживались при температуре деформации в течение 10 минут и, затем закаливались. Размер зерна определялся с помощью ультразвуковых волн, пропускаемых через образцы, и измерения велись с начала деформации вплоть до закалки.

Поскольку исходное состояние выделений карбонитридных фаз в стали в работе [16] не исследовалось, оно было оценено на основе термодинамического моделирования и результатов других исследований. Термодинамические расчеты проводились с помощью программы GenieY [2] с использованием термодинамического описания, построенного в Главе 2.

Согласно термодинамическим расчетам, при температуре 1250 °С карбонитриды в стали данного состава не могут образовываться. Даже в том случае, если карбонитриды выделялись при предшествующей обработке, кинетическое моделирование с помощью алгоритма, представленного в Главе 3, показало, что в случае типичного для подобных сталей размера частиц карбонитридов –  $5 \div 15$  нм ([16]) – 2-х минутной выдержки при 1250 °С достаточно для их полного растворения.

С учетом вышесказанного предполагалось, что в начальный момент времени карбонитридные выделения в стали отсутствовали. Моделирование было проведено для температур деформации 1000-1050 °С. Термодинамический анализ показал, что для этих температур равновесный состав карбонитридной фазы в исследуемой стали соответствует формуле  $Nb(C_{0.64}, N_{0.36})_{0.97}$ . Поэтому предполагалось, что карбонитриды, образующиеся при деформации и последующей выдержке, имеют такой состав.

#### **Результаты расчетов и их сравнение с экспериментальными данными.**

Аналогично тому, как это делалось в экспериментальной работе [16], при моделировании поочередно варьировались основные параметры деформации. Менялась температура деформации, скорость и степень деформации. Результаты расчетов и их сравнение с экспериментальными данными, полученными в [16], приведены на рисунке 6 в виде графиков изменения размера аустенитного зерна со временем.

На всех приведённых зависимостях можно выделить две ярко выраженные стадии: уменьшение среднего размера зёрен, а затем – увеличение. Первая стадия связана с первичной рекристаллизацией. На ней происходит образование новых зерен, что приводит к снижению среднего размера зерна. На второй стадии, когда процесс образования новых зёрен заканчивается, и начинается собирательная рекристаллизация, средний размер зерна при дальнейшей изотермической выдержке начинает монотонно возрастать.

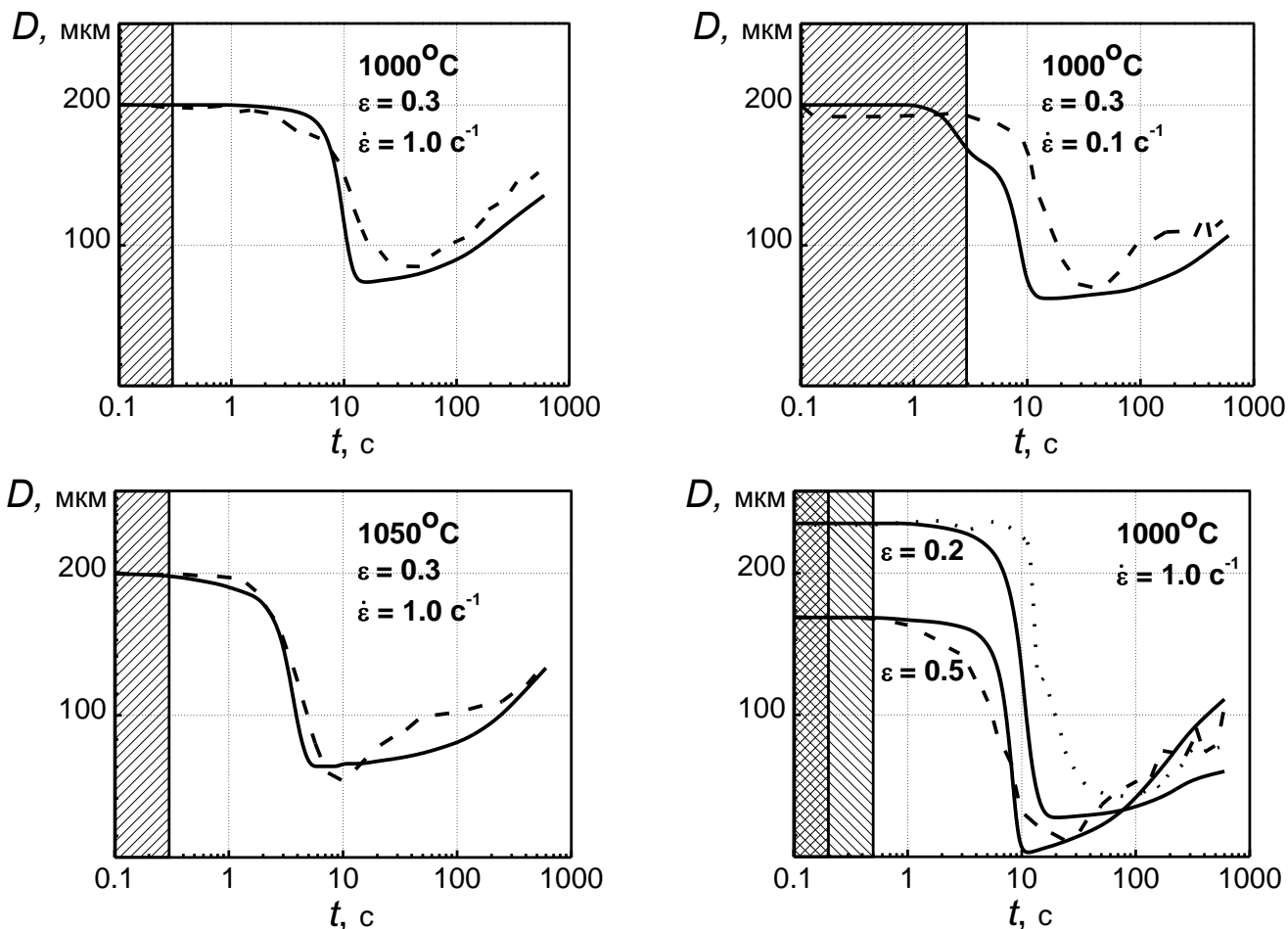


Рисунок 6 – Изменение среднего размера зерна аустенита в зависимости от температуры, степени и скорости деформации. Сплошной линией указаны результаты расчетов, пунктиром обозначены экспериментальные результаты из работы [16].

Графики, приведённые на рисунке 6, показывают, что результаты расчетов, в целом, удовлетворительно согласуются с экспериментальными данными. Наибольшее расхождение результатов расчетов и эксперимента наблюдается при самой низкой скорости деформации ( $0.1 \text{ c}^{-1}$ ) и наименьшей степени деформации (0.2). В таких деформационных условиях, согласно расчётам, уменьшение размера зерна на первой стадии до того же самого значения происходит на несколько секунд раньше, чем в эксперименте. Надо, однако, заметить, что сами авторы работы [16] указывают точность лазерно-ультразвукового метода порядка  $5 \div 20 \%$ . С учётом этого полученное расхождение расчета и эксперимента для малых скоростей и степеней деформации выглядит некритично.

Для второй стадии расчётная скорость роста аустенитного зерна, наоборот, оказывается несколько меньше той, что наблюдается в эксперименте – для всех деформационных условий теоретические кривые лежат несколько ниже экспериментальных. Самое большое различие в результатах также наблюдается для самой низкой скорости деформации ( $0.1 \text{ c}^{-1}$ ) и наименьшей степени деформации (0.2).

### ОСНОВНЫЕ ВЫВОДЫ

Разработанные в диссертационной работе модели направлены на решение задачи прогнозирования фазового состава и структуры многокомпонентных многофазных систем, в том числе и во время горячей деформации. Эти методы были применены к сталям, содержащим сильные карбонитридообразующие элементы.

1. На основе CALPHAD метода построено термодинамическое описание системы Fe–V–Nb–Ti–C–N–Al–Cr–Mn–Ni–Si для расчета равновесного фазового состава сталей с карбонитридным упрочнением в температурной области существования аустенита. Это термодинамическое описание учитывает фазы, которые потенциально могут образовываться при аустенитизации малоуглеродистых микролегированных сталей. Набор термодинамических параметров получен на основе критического анализа термодинамической информации по системам, включающим эти элементы. Построенное термодинамическое описание для аустенитной области максимально близко к составу реальной стали. Разработана программа, предназначенная для проведения расчетов в этой системе.

2. С использованием построенного термодинамического описания была выполнена серия расчетов для составов, характерных для малоуглеродистых низколегированных сталей, где оценивалось влияние часто присутствующих в сталях легирующих элементов – Al, Cr, Mn, Ni и Si – на растворимость кубических карбонитридов на основе микролегирующих элементов. Анализ результатов расчетов показал, что из числа рассмотренных легирующих элементов (Al, Cr, Mn, Ni и Si) наибольшее влияние на растворимость карбонитридов оказывают Si и Al (последний – только в том случае, если, кроме кубических карбонитридов, образуется нитрид алюминия AlN). Остальные элементы в диапазоне составов, характерном для низколегированных сталей, на растворимость карбонитридов влияют незначительно.

3. Разработана модель, которая описывает эволюцию нескольких ансамблей выделений сложного состава в многокомпонентных системах в процессе изотермической выдержки на всех стадиях процесса: зарождения, роста, растворения и коагуляции частиц. При этом в модели учитывается конечность объёмной доли выделений, полидисперсность ансамбля выделений и диффузионное взаимодействие элементов в матрице. С помощью этой модели были проведены расчёты, которые показали, что исходное распределение выделений одной карбонитридной фазы может оказывать заметное влияние на кинетику эволюции выделений другой карбонитридной фазы. Сравнение кооперативной и независимой эволюции показало, что ход эволюции одного ансамбля частиц может оказывать заметное влияние на ход эволюции другого ансамбля. И поэтому для повышения точности расчётов необходимо моделировать именно кооперативную эволюцию выделений всех фаз.

4. Предложен метод для прогнозирования размера зерна аустенита микролегированных сталей для случая, когда частицы вторых фаз являются единственным лимитирующим фактором роста зерна (такое состояние может достигаться при нагреве стали под прокатку). В основе предложенного метода лежит использование моделей для описания эволюции ансамбля карбонитридных выделений и моделей, связывающих размер аустенитного зерна с состоянием ансамбля этих выделений. Сравнение результатов расчетов с экспериментальными данными показало их удовлетворительное согласие.

5. Построена модель для описания эволюции структуры аустенита, в которой учитывается влияние эволюции вторых фаз на процессы структурообразования. Предложенная модель представляет собой синтез хорошо зарекомендовавших себя моделей для описания эволюции структуры при деформации с моделью, предназначенной для описания эволюции выделений нескольких вторых фаз, которая была предложена в этой работе. Предложенная модель реализована в программе DeformEvoPCE (зарегистрировано в Едином реестре российских программ для ЭВМ). С помощью этой программы были проведены расчеты, которые показали хорошее качественное и количественное согласие результатов расчетов с экспериментальными данными.

## СПИСОК ЦИТИРУЕМОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

1. Liu, W.J. Nucleation kinetics of Ti carbonitride in microalloyed austenite / W.J. Liu, J.J. Jonas // *Metallurgical and Materials Transactions A*. – 1989. – V. 20A, №4. – P. 689– 697.
2. Пасынков А.Ю., Горбачев И.И., Попов В.В. GenieY // Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ 24.06.2016. № 2016619541.
3. Maalekian, M. In situ measurement and modelling of austenite grain growth in a Ti/Nb microalloyed steel / M. Maalekian // *Acta Materialia*. – 2012. – V. 60. – P. 1015 –1026.
4. Гольдштейн, М.И. Влияние карбонитридов титана на структуру и свойства малоуглеродистых сталей / М.И. Гольдштейн, Л.П. Житова, В.В. Попов // *Физика металлов и металловедение*. – 1981. – Т. 51, № 6. – С. 1245 – 1252.
5. Zhang, L.P. Effect of TiN Particles and Microstructure on Fracture Toughness in Simulated Heat-Affected Zones of a Structural Steel / L.P. Zhang, C.L. Davis, M. Strangwood. // *Metallurgical and materials transactions A*. – 1999. – V. 30A. – P. 2089 – 2096.
6. Nonisothermal Austenite Grain Growth Kinetics in a Microalloyed X80 Linepipe Steel / K. Banerjee, M. Militzer, M. Perez, H. Wang // *Metallurgical and Materials Transactions*. – 2010. – V. 41A, №12. – P. 3161 – 3173.
7. Irvin, J. Effect of rolling deformation on niobium carbide particle size distribution in low-carbon steel / J. Irvin, T.N. Baker // *Metal Sci*. – 1979. – V. 13. – P. 228 – 237.
8. Carbide Precipitation and High-Temperature Strength of Hot-rolled High-Strength, Low-Alloy Steels Containing Nb and Mo / W.-B. Lee, S.-G. Hong, C.-G. Park, S.H. Park // *Metallurgical and Materials Transactions A*. – 2002. – V. 33A, No 6. – P. 1689 – 1698.
9. Gladman, T. On the Theory of the Effect of Precipitate Particles on Grain Growth in Metals / T. Gladman // *Proc. R. Soc. Lond. A*. – 1966. – V. 294. – P. 298 – 309.
10. Rios, P.R. Overview no. 62: A theory for grain boundary pinning by particles / P.R. Rios // *Acta Metall*. –1987. – V. 35. – P. 2805 – 2814.
11. Hillert, M. Inhibition of grain growth by second-phase particles / M. Hillert // *Acta metall*. – 1988. – V. 36, № 12. – P. 3177 – 3181.
12. Sandstrom, R. A Model for Hot Working Occurring by Recrystallization / R. Sandstrom, R.Lagneborg // *Acta Metall*. – 1975. – V. 23. – P. 387– 398.
13. Modelling the dynamic recrystallization in C–Mn micro-alloyed steel during thermomechanical treatment using cellular automata / A. Timoshenkov, P. Warczok, M. Albu, J. Klarner, E. Kozeschnik, R. Bureau, C. Sommitsch // *Comput. Mater. Sci*. – 2014.
14. Lenard, J.G. Mathematical and Physical Simulation of the Properties of Hot Rolled Products / J.G. Lenard, M. Pietrzyk, L. Cser // *Amsterdam-Lausanne-New York-Oxford-Shannon-Singapore-Tokyo. Elsevier*. – 1999. – P. 364.
15. Pavlina, E. J. Effects of combined silicon and molybdenum alloying on the size and evolution of microalloy precipitates in HSLA steels containing niobium and titanium / E. J. Pavlina, C.J. Van Tyne, J.G. Speer // *Materials Characterization*. – 2015. – V. 105 – P. 35 – 46.
16. Evolution of austenite recrystallization and grain growth using laser ultrasonics / S. Sarkar, A. Moreau, M. Militzer, W.J. Poole // *Metall and Mat Trans A*. – 2008. – V.39. – P. 897 – 907

## СПИСОК РАБОТ, ОПУБЛИКОВАННЫХ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

- 1 А. Моделирование эволюции ансамбля выделений в сталях с V и Nb / Горбачёв И.И., Попов В.В., Пасынков А.Ю. // Физика металлов и металловедение. — 2015. — Т. 116. — С. 377—387.
  - 2 А. Прогнозирование размера аустенитного зерна микролегированных сталей на основе моделирования эволюции карбонитридных выделений / Горбачёв И.И., Пасынков А.Ю., Попов В.В. // Физика металлов и металловедение. — 2015. — Т. 116. — С. 1184—1192.
  - 3 А. Расчеты влияния легирующих добавок (Al, Cr, Mn, Ni, Si) на растворимость карбонитридов в малоуглеродистых низколегированных сталях / Горбачёв И.И., Попов В.В., Пасынков А.Ю. // Физика металлов и металловедение. — 2016. — Т. 117. — С. 1277—1287.
  - 4 А. Simulation of precipitates evolution in multiphase multicomponent systems with consideration of nucleation / V. V. Popov, I. I. Gorbachev, A. Yu. Pasyнков // Philosophical Magazine. — 2016. — V. 96. — P. 3632—3653.
  - 5 А. Моделирование влияния горячей деформации на размер аустенитного зерна низколегированных сталей с карбонитридным упрочнением / И.И. Горбачев, А.Ю. Пасынков, В.В. Попов // Физика металлов и металловедение. — 2018. — Т. 119. — С. 582—590.
  - 6 А. Моделирование эволюции карбонитридных частиц сложного состава при горячей деформации низколегированной стали / И.И. Горбачев, А.Ю. Пасынков, В.В. Попов // Физика металлов и металловедение. — 2018. — Т. 119. — С. 817—826.
  - 7 А. Попов В.В., Горбачев И.И., Пасынков А.Ю. EvoPCE // Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ 10.06.2014. № 2014616057.
  - 8 А. Горбачев И.И., Попов В.В., Пасынков А.Ю. EvoPCE+ // Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ 16.12.2015 /№ 2015663347 .
  - 9 А. Попов В.В., Пасынков А.Ю., Горбачев И.И. GenieY // Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ 23.08.2016. № 2016619541
  - 10 А. Пасынков А.Ю., Горбачев И.И., Попов В.В. DeformEvoPCE // Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ 12.02.2018. №2018612101.
- 

Отпечатано на Ризографе ИФМ УрО РАН тир. 100 зак. № 7

Объем 1 печ. л. Формат 60x84 1/16

620108, г. Екатеринбург, ул. С. Ковалевской, 18