

DOI: 10.20535/kpissn.2022.1-2.270358

УДК 620.22

<sup>1</sup>Копилов В.І., <sup>1</sup>Кузін О.А., <sup>2</sup>, <sup>3</sup>Кузін М.О.<sup>1</sup>Національний технічний університет України «Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського»<sup>2</sup> Національний університет «Львівська політехніка»<sup>3</sup> Львівський науково-дослідний інститут судових експертиз

\*corresponding author: Kuzin N.O. kuzin.nick81@gmail.com

### ЗАСТОСУВАННЯ МОДЕЛЕЙ СТРУКТУРИ ПОВЕРХОНЬ ПОДІЛУ В СТАЛЯХ ПІД ЧАС ОТРИМАННЯ ВИРОБІВ ІЗ ЗАДАНИМ ЖИТТЄВИМ ЦИКЛОМ

**Проблематика.** Розвиток цифрового машинобудування вимагає розробки і використання міждисциплінарних концепцій і моделей поведінки неоднорідних полікристалічних матеріалів у разі дії технологічних і експлуатаційних навантажень. У зв'язку із цим набуває важливого значення розроблення й використання підходів до моделювання та аналізу механічної поведінки граничних зон поділу виробів із врахуванням їх енергії. Розроблення таких підходів дозволяє вирішувати актуальну науково-технічну проблему – оптимізацію режимів технологічних обробок виробів із заданим життєвим циклом.

**Мега дослідження.** Використання системних моделей структури сталей для розроблення обчислювальних схем та методів управління структурно-енергетичним станом поверхонь поділу структурних складових під час отримання виробів з підвищеними параметрами надійності з урахуванням умов їх експлуатації.

**Методика реалізації.** Аналіз структури проводився з використанням концепції інваріантного моделювання, результатів металографічних і фактографічних досліджень, електронної мікроскопії. Виконано оцінювання структурно-енергетичного стану поверхонь поділу зерен після іонно-плазмового травлення зразків, проведено випробовування на зношування і ударний згин, здійснено системне комп'ютерне моделювання властивостей полікристалічних систем за допомогою відкритого пакета скінченно-елементного аналізу FEniCS на мові Python.

**Результати дослідження.** Під час застосування енергетичного опису континуальних нелокальних середовищ встановлено, що залежно від кутів між границями у стиках зерен змінюється структурно-енергетичний стан цієї області та її здатність до утворення мікрodefektів. За величини кутів у межах 140°–180° формуються зони з високою спроможністю до утворення міжзеренних пошкоджень і руйнування під дією навантаження. Показано, що інтенсивність зношування і міжзеренне руйнування в разі удару зростає залежно від кількості потрійних стиків, в яких границі суттєво різняться за рівнем енергії. Сталь 40X (5135 Steel) є більш чутливою до утворення потрійних стиків з високим градієнтом енергії під час термічної обробки, ніж сталі, що містять нікель, молібден і кремній.

**Висновки.** На основі ієрархічного моделювання будови полікристалів запропоновано нові підходи і створено алгоритм для визначення взаємозв'язків між структурою поверхонь поділу сталей і їх експлуатаційною надійністю. Розсіяні пошкодження утворюються на поверхнях поділу між потрійними стиками зерен з високим градієнтом енергії. Зменшення частки потрійних стиків, які суттєво різняться за величиною енергії під час проектування технологічних режимів процесів гартування і відпуску, дозволило на 48–53 % підвищити опір зношуванню покращуваних сталей.

**Ключові слова:** покращувані сталі, термічна обробка, зернограничне конструювання структури, інтеркристалічне руйнування.

**Постановка проблеми у загальному вигляді та її зв'язок з важливими науковими і практичними завданнями.**

Отримання виробів із заданим життєвим циклом вимагає проектування техноло-

гій, що спрямовані на управління механічними властивостями зовнішніх поверхонь і границь поділу структурних складових сплавів. У зв'язку із цим актуальними стають проблеми моделювання, розрахунку та оптимізації процесів створення поверхонь поділу із заданими тер-

**Пропозиція для цитування цієї статті:** Копилов В.І., Кузін О.А., Кузін М.О., «Застосування моделей структури поверхонь поділу в сталях при отриманні виробів із заданим життєвим циклом», *Наукові вісті КПИ*, № 1–2, с. 76–81, 2022. doi: 10.20535/kpissn.2022.1-2.270358

**Offer a citation for this article:** Viacheslav I. Kopylov, Oleg A. Kuzin, Mykola O. Kuzin “Application of models of the structure of separation surfaces in steels when obtaining products with a given life cycle”, *KPI Science News*, no. 1–2, pp. 76–81, 2022. doi: 10.20535/kpissn.2022.1-2.270358

динамічними і фізичними характеристиками [1–3].

У багатьох випадках руйнування конструкцій під дією силових навантажень відбувається внаслідок появи пошкоджень на границях і потрійних стиках зерен. Прогнозування поведінки полікристалів вимагає встановлення взаємозв'язку між структурою, енергетичними параметрами поверхонь поділу зерен, фізичними властивостями і факторами, що визначають опір утворенню міжзеренних пошкоджень.

Моделі, які використовують у наш час, не дозволяють окремо визначити внесок структурно-енергетичного стану границь зерен і їх потрійних стиків на міжзеренне руйнування сплавів. Бракує методології кількісного оцінювання ролі таких елементів структури в утворенні міжзеренних пошкоджень і інтеркристалітному руйнуванні виробів.

Тому виникла потреба розробки, а також і застосування системних методів і моделей, що придатні для вирішення таких складних завдань міждисциплінарного характеру, як керування структурно-енергетичним станом внутрішніх поверхонь поділу з метою підвищення опору до утворення міжзеренних пошкоджень і тріщин виробів. Застосування вже розроблених моделей і підходів дозволяє вирішувати актуальну науково-технічну проблему підвищення міцності та довговічності металічних матеріалів.

#### **Аналіз останніх досліджень і публікацій з розглянутої проблеми**

Створення виробів із заданим життєвим циклом на основі комп'ютеризації всіх етапів їх проектування, виробництва та експлуатації проводиться з використанням методів інженерії границь зерен і зернограничного конструювання структури сплавів [4, 5]. При цьому поверхні поділу зерен виступають одними з визначальних елементів структури сплавів, які обумовлюють їх фізико-механічні та експлуатаційні властивості [6].

Аналіз літературних джерел показав, що недостатня вивченість ролі структурно-енергетичного стану границь і потрійних стиків зерен у поведінці деталей під дією зовнішніх навантажень зменшує можливість розробки та оптимізації технологій підвищення їх життєвого циклу. Теоретико-методологічний інструментарій, що описує кінетику змін матеріалу на поверхнях поділу структурних складових, подають у вигляді феноменологічних залежностей, тому

їх складно використовувати для вибору оптимальних технологічних режимів обробки сплавів. Підвищення опору до утворення розсіяних і локалізованих пошкоджень вимагає кількісної оцінки зміни структури поверхонь поділу під час технологічних процесів отримання виробів.

#### **Формування мети статті**

Фізичне обґрунтування формування внутрішніх поверхонь поділу із заданим структурно-енергетичним станом, який забезпечує підвищення фізико-механічних характеристик конструкційних матеріалів, оцінювання внеску структурно-енергетичного стану границь зерен і їх потрійних стиків на міжзеренне руйнування сплавів.

#### **Методи дослідження**

У роботі використано загальну системну методологію, згідно з якою було розглянуто складну ієрархічну будову досліджуваних сплавів. Аналіз структури проводили на основі концепції інваріантного моделювання [2–4, 7]. Виконано оцінювання структурно-енергетичного стану поверхонь поділу зерен після іонно-плазмового травлення зразків. Визначали мікротвердість, ЛМ-твердість, зносотривкість, проводили механічні випробовування на розтяг та ударний згин за температури від  $-196$  °C до  $+100$  °C. Здійснено системне комп'ютерне моделювання властивостей полікристалічних сплавів з використанням відкритого пакета скінчено-елементного аналізу FEniCS на мові Python [8].

#### **Виклад основного матеріалу дослідження з обґрунтуванням отриманих результатів**

Важливе значення у проектуванні технологій формування структурно-енергетичного стану поверхонь поділу має встановлення зв'язку між результатами цифрового подання структури сплавів і моделями їх поведінки. Моделювання має важливе значення для використання досягнень теоретичного й обчислювального матеріалознавства під час впровадження інноваційних технологій у машинобудуванні.

У роботах [2, 7] подано низку підходів щодо моделювання структури внутрішніх поверхонь поділу під час вибору режимів термічної обробки сталей. Алгоритм використання таких методів моделювання наведено на рис. 1.

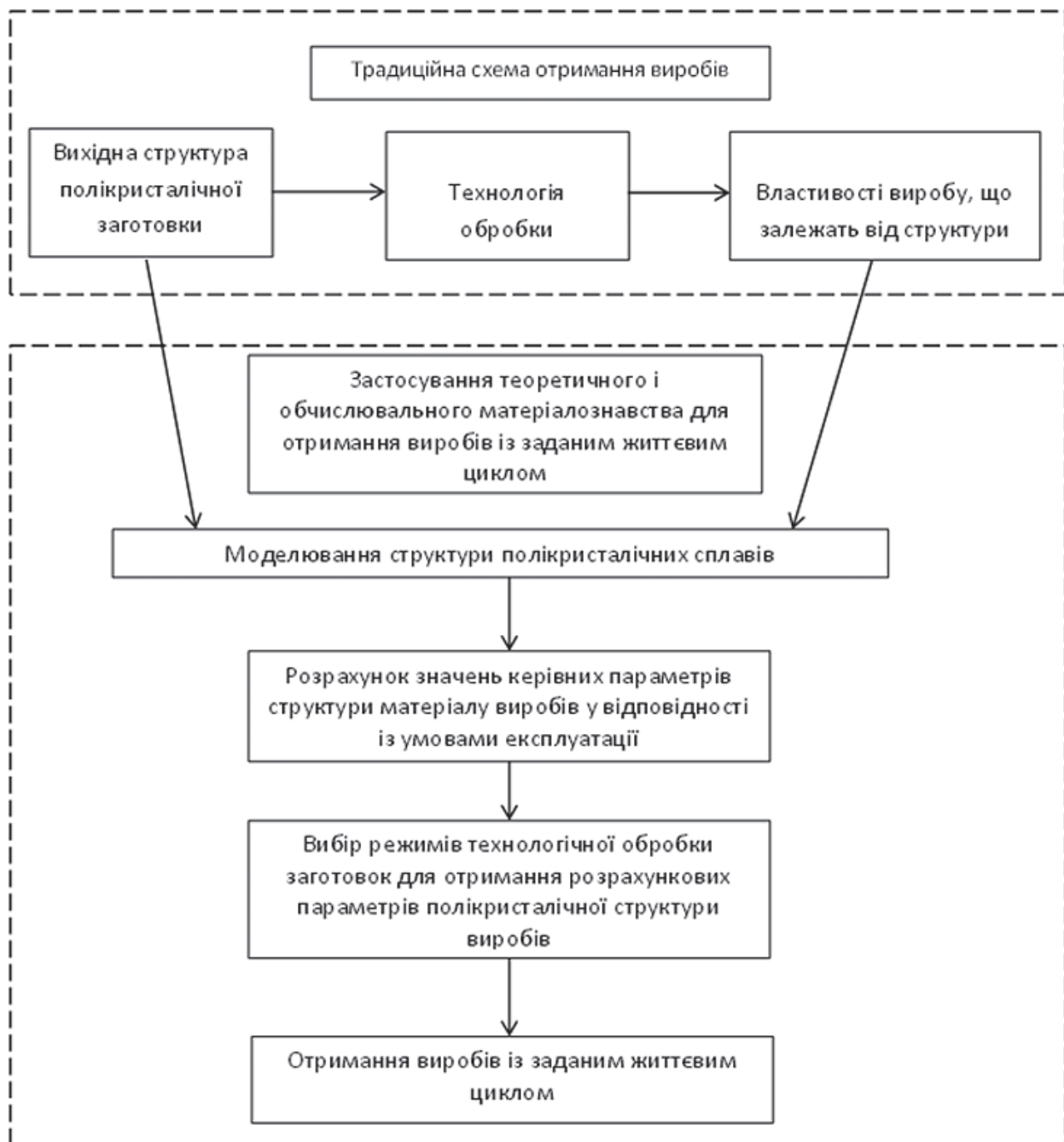


Рис. 1. Використання методів моделювання структури для управління властивостями поверхонь поділу зерен покращуваних сталей

На відміну від традиційної схеми, отримання виробів із заданим життєвим циклом передбачає застосування методів моделювання структури, з використанням яких можна розраховувати значення її керівних параметрів, що відповідають умовам експлуатації, а також вибирати режими технологічної обробки заготовок для отримання розрахункових параметрів.

Більшість сплавів, з яких виготовляють деталі машин, являють собою полікристалічні системи. Моделювання структури вимагає встановлення закономірностей впливу енергії поверхонь поділу структурних складових на їх експлуатаційну надійність.

Особливості моделювання металічних матеріалів пов'язані з їх будовою на різних масштаб-

них рівнях – нано-, мікро-, мезо- та макроскопічному. На нанорівні моделювання проводять з використанням підходів молекулярної динаміки, на макрорівні – методом скінченних елементів. Для аналізу будови зерен та їх взаємодій застосовують ієрархічні методи, які перебувають на початку свого розвитку, що пов'язано зі складністю врахування впливу кількісних параметрів, що оцінюють відгук полікристалів під дією навантаження, у багаторівневих моделях структури сплавів.

Досліджувані сталі 40X, 40НМ, 40ХС характеризуються обмеженою зварюваністю, схильністю до утворення тріщин під час утворення нероз'єднаних з'єднань у виробках та їх експлуатації і широко застосовуються для виготовлення залізничних конструкцій. В умовах технологічної дії і відновлювальних ремонтів деталей за рахунок активації дифузійних процесів можливий перерозподіл легуючих і домішкових елементів між тілом і поверхнями поділу зерен. Водночас їх вплив на структурно-фазовий стан поверхонь поділу зерен вивчений недостатньо. Недослідженими залишаються питання їх ролі в накопиченні пошкоджень та інтеркристалітному руйнуванні під дією навантажень.

З використанням розроблених підходів до моделювання структури внутрішніх поверхонь поділу побудовано модель, що описує вплив енергії поверхонь поділу зерен на здатність до утворення міжзеренних пошкоджень під дією зовнішнього навантаження [2, 7]. Показано використання розробленої моделі для передбачуваної діагностики поведінки покращуваних сталей в умовах контактних і динамічних навантажень. Зміна стану поверхонь поділу структурних складових досягала термічною

обробкою заготовок – гартуванням від температур 860–1050 °С та умовами відпуску.

Дослідженнями встановлено, що у сталях з підвищенням температури гартування до 950 °С формується різнозернистість. Через наявність зерен різних розмірів зростає частка поверхонь поділу в сорбіті з більшим значенням зернограничної енергії, які розміщені в потрібних стиках напроти гострих кутів. Для сталі 40X їх кількість за витримки під час гартування 30 хв становить 3,3 %, а 80 хв – 16,67 % (табл. 1).

Дослідження зносотривкості сталі показали, що з підвищенням температури до 950 °С інтенсивність зношування зростає на 16 %, а після гартування від 1050 °С знижується на 20 % порівняно зі зразками, які загартовані від 860 °С за витримки 30 хв. Збільшення часу витримки під гартування до 80 хв сприяє росту інтенсивності зношування сталі на 46 % після гартування від 950 °С. Підвищення зносотривкості сталі після гартування від 1050 °С значною мірою пов'язане зі зменшенням кількості локальних об'ємів структури з високим градієнтом зернограничної енергії.

Під дією контактних навантажень міжзеренні пошкодження переважно виникають у локальних зонах, енергія яких наближена до поверхневої. Такими зонами є границі, які розміщені між потрібними стиками з підвищеним градієнтом енергії [3, 9, 10]. Тому площу таких границь вводили в цифрове наповнення ієрархічних моделей, які описують вплив полікристалічної структури на контактну довговічність сталі (рис. 2).

Результати визначення матричного параметра структури покращеної сталі 40X, що загартована від різних температур, показали суттєвий вплив розміру зерен і енергетичного стану їх поверхонь поділу на зносотривкість сталі.

Таблиця 1 Частка кутів між границями в потрібних стиках зерен сталі 40X після гартування і відпуску 600 °С

Температура гартування	Час витримки під гартування, хв	Діапазон кутів між границями в потрібних стиках зерен, градуси						
		40°	61°	81°	101°	121°	141°	161°
		...	...	...	...	...	...	...
		60°	80°	100°	120°	140°	160°	180°
Частка в загальній кількості заміряних кутів, %								
860 °С	30	0,00	3,33	16,67	30,00	36,67	13,33	0,00
	80	0,00	0,00	13,33	30,00	53,33	3,33	0,00
900 °С	30	0,00	3,33	10,00	46,67	26,67	13,33	0,00
	80	0,00	6,67	6,67	36,67	40,00	10,00	0,00
950 °С	30	3,33	3,33	10,00	30,00	33,33	16,67	3,33
	80	10,00	3,33	10,00	20,00	20,00	16,67	16,67
1050 °С	30	0,00	3,33	6,67	40,00	43,33	6,67	0,00
	80	0,00	6,67	16,67	20,00	40,00	16,67	0,00

Збільшення інтенсивності зношування відбувається за наявності стиків з високим градієнтом зернограничної енергії, кути між границями в яких перебувають у діапазоні від  $40\text{--}60^\circ$  до  $161\text{--}180^\circ$  (табл. 1).

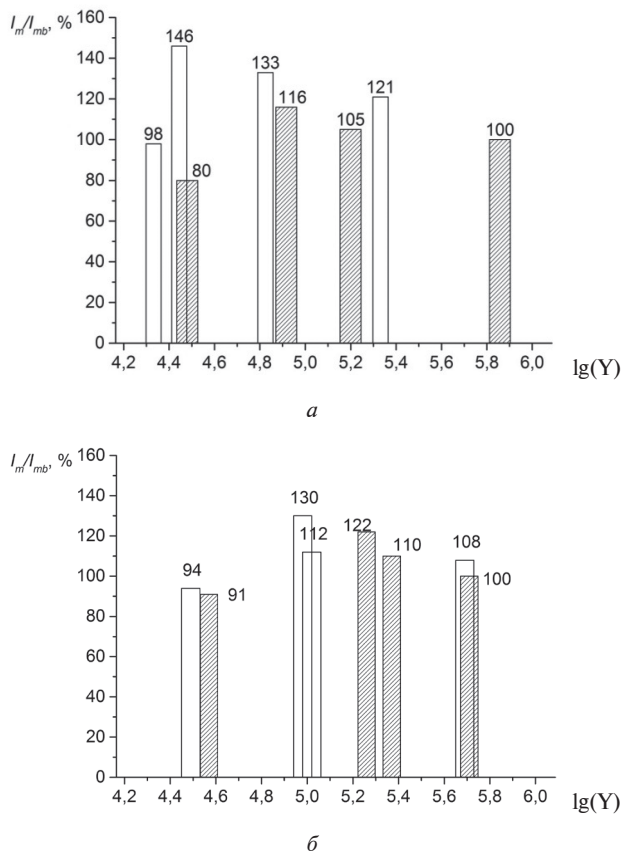


Рис. 2. Залежність відносного зношування ( $I_m/I_{mb}$ ) від матричного параметра структури ( $Y$ ) сталей 40X (а) і 40XNM (б). (За  $I_{mb}$  взято масову інтенсивність зношування після гартування від  $860^\circ\text{C}$  з витримкою 30 хв і відпуском за  $600^\circ\text{C}$ : заштрифоваха область – витримка під час нагрівання під гартування 30 хв; незаштрихована область – витримка під час нагрівання під гартування 80 хв)

Дослідження сталей після випробувань на ударний згин показали, що частка міжзеренного руйнування зростає зі збільшенням кількості потрійних стиків зерен, в яких границі суттєво різняться за рівнем енергії (рис. 3).

### Література

- [1] D.L. McDowell *et al.* *Integrated design of multiscale, multifunctional materials and products*. Oxford: Elsevier, 2009. 392 p.
- [2] V. Kopylov, O. Kuzin, and N. Kuzin, “Improving contact durability of polycrystalline systems by controlling the parameters of large angle grain boundaries”, *Eastern-European Journal of Enterprise Technologies*, No 5/12 (101), pp. 14–22, 2019. doi: 10.15587/1729-4061.2019.181441

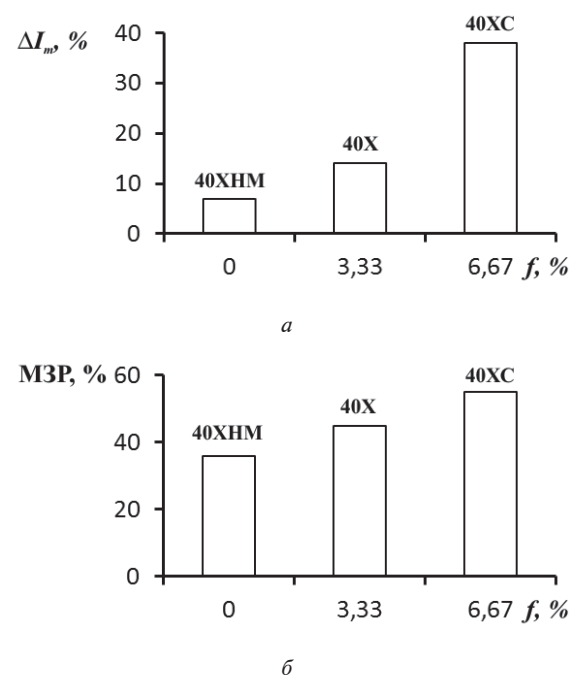


Рис. 3. Залежність приросту інтенсивності зношування (а) і кількості міжзеренного руйнування за температури напівкрихкості (б) після окрихчувальної обробки покращених сталей 40X, 40XNM, 40XC від частки потрійних стиків з високим градієнтом енергії границь зерен (сталі гартували від температури  $860^\circ\text{C}$ )

### Висновки

На основі використання інваріантних моделей проведено кількісне оцінювання впливу розміру зерен, потрійних стиків і зернограничної енергії на опір сталей інтеркристалітному сколюванню. Встановлені параметри мікроструктури покращуваних сталей, за яких зростає їх зносотривкість, зменшується частка міжзеренного злому в умовах крихкого руйнування.

Показано, що важливе значення у процесах утворення міжзеренних пошкоджень і руйнування відіграє структурно-енергетичний стан поверхонь поділу і потрійних стиків зерен. Інтенсивність зношування і міжзеренне руйнування під час удару зростає відповідно до збільшення частки потрійних стиків зерен, в яких границі зерен суттєво різняться за рівнем енергії.

- [3] O. Kuzin, B. Lukiyanets, and N. Kuzin, "Continual description of polycrystalline systems taking into account their structure", *Technological audit and production reserves*, No 1/1 (45), pp. 25–30, 2019. doi: 10.15587/2312-8372.2019.156159
- [4] J. Olofsson, and I.L. Svensson, "Incorporating predicted local mechanical behaviour of cast components into finite element simulations", *Materials and Design*, No 34, pp. 494–500, 2012. doi: 10.1016/j.matdes.2011.08.029
- [5] George Z. Voyiadjis, *Handbook of Nonlocal Continuum Mechanics for Materials and Structures*. Springer, 2019. doi: 10.1007/978-3-319-58729-5
- [6] D.L. McDowell, and G.B. Olson, "Concurrent design of hierarchical materials and structures", *Scientific modeling and simulation*, No 15, pp. 207–240, 2008. doi: 10.1007/978-1-4020-9741-6\_14
- [7] "Multiscale Solid Mechanics", *Strength, Durability, and Dynamics*, Vol. 141, 2021. doi: 10.1007/978-3-030-54928-2
- [8] V. Kopylov, O. Kuzin, and N. Kuzin, "Application of computational mechanics approaches for increasing of tribosystem operational parameters by using plasma hardening method", *Journal of Applied Mathematics and Computational Mechanics*, Vol. 20 (1), pp. 61–70, 2021. doi: 10.17512/jamcm.2021.1.06
- [9] E. Weinan, *Principles of Multiscale Modellnig*, Cambridge University Press, 2011.
- [10] Camargo, P.H.C. David R. Gaskell, and David E. "Laughlin: Introduction to the Thermodynamics of Materials". *J Mater Sci*, No 53, pp. 9363–9367 (2018). doi: 10.1007/s10853-018-2265-9

<sup>1</sup>Viacheslav O. Kopylov, <sup>1</sup>Oleg A. Kuzin, <sup>2,3</sup>Mykola O. Kuzin

#### APPLICATION OF MODELS OF THE STRUCTURE OF SEPARATION SURFACES IN STEELS WHEN OBTAINING PRODUCTS WITH A GIVEN LIFE CYCLE

**Background.** The development of digital mechanical engineering requires the development and use of interdisciplinary concepts and models of the behavior of heterogeneous polycrystalline materials under the influence of technological and operational loads. In this regard, the development and use of approaches to modeling and analysis of the mechanical behavior of the boundary zones of separation of products, taking into account their energy, becomes important. The development of such approaches makes it possible to solve an actual scientific and technical problem – optimization of the modes of technological processing of products with a given life cycle.

**Objective.** The use of system models of the structure of steels for the development of computational schemes and methods of managing the structural-energy state of the separation surfaces of structural components when obtaining products with increased reliability parameters, taking into account the conditions of their operation.

**Methods.** The analysis of the structure was carried out using the concept of invariant modeling, the results of metallographic and factographic studies, electron microscopy. The assessment of the structural and energetic state of grain separation surfaces after ion-plasma etching of the samples was carried out, wear and impact bending tests were carried out, and system computer simulation of the properties of polycrystalline systems was carried out using the FEniCS open finite element analysis package in Python.

**Results.** When applying the energy description of continuous non-local environments, it was established that depending on the angles between the boundaries at the joints of the grains, the structural and energetic state of this region and its ability to form microdefects change. At angles between 140–180°, zones are formed with a high capacity for the formation of intergranular damage and destruction under load. It is shown that the intensity of wear and intergranular fracture upon impact increases depending on the number of triple joints, in which the boundaries differ significantly in terms of energy level. Steel 40X (5135 Steel) is more sensitive to the formation of triple junctions with a high energy gradient during heat treatment than steels containing nickel, molybdenum and silicon.

**Conclusions.** On the basis of hierarchical modeling of the structure of polycrystals, new approaches are proposed and an algorithm is created to determine the relationships between the structure of the separation surfaces of steels and their operational reliability. Diffuse damage is formed on the separation surfaces between the triple junctions of grains with a high energy gradient. Reducing the share of triple joints, which differ significantly in terms of energy when designing the technological regimes of the quenching and tempering processes, made it possible to increase the wear resistance of improved steels by 48–53 %.

**Keywords:** improving steels, heat treatment, grain boundary design of the structure, intercrystalline destruction.

Рекомендована Радою  
Навчально-наукового інституту матеріалознавства  
та зварювання ім. Є.О. Патона  
КПІ ім. Ігоря Сікорського

Надійшла до редакції  
15 грудня 2021 року

Прийнята до публікації  
27 червня 2022 року