

УДК: 669.177.035.045:620.18:621

Э.В.Приходько, Д.Н.Тогобицкая, Л.А.Головко

## КОНЦЕПТУАЛЬНЫЕ ОСНОВЫ ПРИКЛАДНОЙ ТЕОРИИ КОМПЛЕКСНОГО ЛЕГИРОВАНИЯ.

Сформулированы основы методологического подхода к оценке влияния межатомного взаимодействия на свойства металлопродукции с позиций теории физико–химического моделирования.

### **Современное состояние вопроса.**

Цель выполненной в ИЧМ работы «Исследование влияния процессов межатомного взаимодействия в легированных и микролегированных железоуглеродистых расплавах на формирование структуры и свойств сталей после кристаллизации и деформационно–термической обработки и разработка на этой основе методики определения оптимального состава стали для металлопродукции целевого назначения с обусловленным комплексом свойств» затрагивает большое число фундаментальных проблем физического материаловедения, что предопределило оригинальность материаловедческой постановки работы.

### **Методология исследования.**

Решение большого числа фундаментальных проблем физического материаловедения на численном уровне требует концептуально иного, чем сложился к настоящему времени, подхода к трактовке ряда вопросов комплексного легирования и микролегирования. И если ряд его аспектов согласовывается с качественными соображениями других исследователей, то большая часть развивает идеи, вытекающие из положений, сформулированных в работе [1]. Основы методологии оценки влияния межатомного взаимодействия в процессах легирования и микролегирования учитывают:

1. В основе подхода, с позиций которого в рамках прикладной металлохимической теории комплексного легирования рассматриваются вопросы, связанные с оценкой влияния межатомного взаимодействия на различные свойства сталей и сплавов, лежат два положения:

а) об изменчивости зарядового состояния (соответственно и парциальных физико–химических свойств) атомов каждого из компонентов в зависимости от их конкретного кристаллографического окружения (эффективные заряды всех компонентов изменяются не дискретно, а соответственно с характеристиками этого окружения);

б) как гомогенные, так и гетерофазные сплавы и растворы рассматриваются как химически единые системы, изменение состава которых влияет на комплекс их физико–механических свойств через сопутствующее изменение интегральных характеристик межатомного взаимодействия.

2. Конечные свойства металлопродукции являются следствием протекания – последовательно или параллельно – большого числа процессов.

Для выявления причин и механизма этих процессов, формирования их конечных результатов, необходимо воспроизвести стадию «до». Для этого предлагается использовать абстрагированное от условий получения сплава его идеализированное гомогенное состояние, описываемое моделью ОЦК-подобной структуры. Тем самым стадия «до» характеризует базовое химическое состояние системы независимо от реальной структуры вещества.

3. Согласно представлениям современной металлохимии, переход от теоретического анализа возможных результатов межатомного взаимодействия к описанию закономерностей формирования структуры и свойств сплавов в зависимости от их состава и термодинамического состояния должен быть связан с разработкой металлохимических методов расчета и описания:

- а) условий равновесия сил притяжения и отталкивания при образовании кристаллической решетки однородными атомами;
- б) изменения этих условий при растворении инородных атомов;
- в) характеристик электронного строения образующихся соединений и сплавов и выяснения связи этих характеристик с отдельными свойствами (или их комплексами) изучаемого материала.

В разработанной методологии физико-химического моделирования эти методы базируются на единой металлохимической интерпретации элементарного акта межатомного взаимодействия, что обеспечивает их единство и непротиворечивость.

4. Характеристики всех элементарных процессов, сопровождающих формирование состава, структуры и свойств расплавов и продуктов их кристаллизации, могут быть выражены как функция сочетания интегральных и (или) парциальных параметров межатомного взаимодействия.

5. Следствием содержания пунктов 2) и 3) является возможность использования для описания свойств многокомпонентных расплавов и растворов, включая заведомо гетерофазные, сочетания параметров  $Z^Y$ ,  $d$  и  $\text{tg}\alpha$ , характеризующие идеализированное гомогенное состояние системы. Предполагается, что программа структурных превращений при охлаждении расплава закодирована в сочетании характеристик межатомного взаимодействия для данной системы в гомогенном состоянии.

6. Не отрицая важнейшую роль учета и управления структурой при физико-химическом синтезе сплавов, не следует ее абсолютизировать. Выбор оптимального состава сталей и сплавов целевого назначения в качестве составной части должен включать определение параметров конкретной технологии ее термомеханической обработки, которая обеспечит реализацию потенциальных возможностей, заложенных в составе сплава: от него требуется определенные свойства, а не заданная структура.

7. Для расчета параметров межатомного взаимодействия в многокомпонентных сплавах с помощью модели направленной химической связи необходимо описать структуру материала в терминах межатомных рас-

стояний (d). Отсутствие экспериментальной информации о межатомных расстояниях в растворах и расплавах можно скомпенсировать, подобрав модель для расчета  $d$  по составу независимо от того, в жидком или твердом состоянии находится анализируемая система. Обстоятельные расчетно-аналитические исследования показали, что такие функции успешно выполняет модельный параметр  $d$ , трактуемый как структурный фактор.

8. Кодировка в модельных терминах информации о составе растворов и расплавов и сосуществующих в них фазах:

а) позволяет абстрагироваться от учета химической индивидуальности отдельных компонентов;

б) обеспечивает комплексный учет характеристик межатомного взаимодействия между всеми реальными и гипотетическими парами атомов;

в) обеспечивает свертку информации о составе многокомпонентных материалов, позволяет понизить размерность и повысить точность описательных моделей, связывающих их состав и свойства.

В итоге целью оптимизации становится не конкретный уровень потребительских свойств сплава, а обеспечение заданного сочетания модельных параметров для разных подсистем его состава.

9. По сравнению с классическими представлениями теории легирования в современных воззрениях все больше внимания уделяется анализу следствий локализации процессов, результатом которых является формирование структуры и свойств сталей и сплавов. При всем многообразии этих процессов единая схема их описания должна базироваться на выявлении общих признаков межатомного взаимодействия, сформулированных путем определения узких диапазонов сочетания параметров  $Z_i^Y$ ,  $d_i$ ,  $\text{tg}\alpha_i$  для сталей и сплавов целевого назначения. Этим целям служит разделение общего состава сплавов на подсистемы – матричную, легирующую и микролегирующую и примесную.

10. Развитие современной теории легирования идет по пути дифференциации роли отдельных компонентов, факторов и параметров. Иногда эта дифференциация столь глубока, что теряется видение проблемы, ради решения которой она была осуществлена. Этому процессу необходимо противопоставить (чтобы скомпенсировать его последствия) интеграцию влияния отдельных факторов, для чего необходимо решить проблему «свертки» модельных параметров межатомного взаимодействия.

11. Сложность металлохимического и термодинамического анализа эффективности легирования и микролегирования с классических позиций предопределена тем, что в сталях и сплавах взаимодействуют между собой не свободные, а «связанные» с окружением элементы. Это предопределяет приближенный характер оценок результатов такого взаимодействия по теплоте образования соединений в свободном состоянии. По этой причине механизмы совместного влияния примесей, легирующего комплекса и углерода еще не выявлены до конца.

**Выводы.**

Таким образом, методика определения оптимального состава сталей целевого назначения включает:

- а) структуризацию химического состава стали на подсистемы, которая осуществляется на основе физико–химического и (или) факторного анализа;
- б) построение прогнозных моделей для основных свойств ( $\sigma_b$ ,  $\delta$ ,  $KCV$ ) как функции отдельных модельных параметров ( $Z^Y_i$ ,  $d_i$ ,  $\text{tg}\alpha_i$ ,  $N_i$ ) и их сочетаний;
- в) определение ограничений на изменение модельных параметров на основе экспертного анализа фактической информации;
- г) формирование системы этих ограничений на свойства и параметры оптимизации (включая концентрации отдельных компонентов и значения модельных параметров);
- д) определение рекомендуемых диапазонов изменения концентраций компонентов состава на основе метода средней точки многогранника (или других, принятых в теории оптимизации, методов).

Наряду с проведенными расчетно–аналитическими исследованиями много внимания было уделено изучению влияния технологии производства на свойства арматурных сталей нового поколения, сталей повышенной прочности для магистральных газонефтепроводов, изучению влияния температурно–скоростных условий прокатки на структуру и свойства катанки, комплексной оценке влияния ее химсостава и степени деформации при волочении на структурное состояние и комплекс свойств проволоки для металлокорда. Комплекс этих исследований проводился сотрудниками пяти технологических отделов Института и их результаты являются важным дополнением к основному содержанию работы. Они же свидетельствуют о целесообразности и актуальности продолжения таких, как проведенное, комплексных исследований путем включения в число учитываемых при моделировании технологических параметров и выбора оптимальных их значений в зависимости от плавочного состава стали.

1. *Приходько Э.В.* Эффективность комплексного легирования сталей и сплавов. – К.: Наукова думка, 1995. –292с

*Статья рекомендована к печати д.т.н., проф. С.М.Жучковым*