

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования «Тульский государственный университет»

На правах рукописи

Релмасира Капреси Джолан

Влияние процесса эволюции пор и трещин при фрикционном нагреве
на ресурсную долговечность теплостойких сталей с покрытием

05.16.09 – Материаловедение (металлургия)

Диссертация на соискание ученой степени кандидата технических наук

Научный руководитель кандидат технических наук, доцент Маленко П.И.

Москва – 2021

Оглавление

Введение.....	4
Глава 1 Состояние вопроса (литературный обзор).....	8
1.1 Характерные особенности состояния поверхностных слоев при трении.....	9
1.2 Процесс структурообразования никотрированных покрытий на теплостойких сталях.....	11
1.2.1 Технология и структурообразование никотрированных покрытий.....	11
1.2.2 Взаимосвязь между структурными параметрами и физико-механическими свойствами никотрированных покрытий.....	13
1.3 Морфология поверхности трения и методы ее оценки.....	13
1.3.1 Методы оценки топографии поверхности трения.....	14
1.3.2 Методы измерения шероховатости трения.....	15
1.4 Анализ особенностей тепловой задачи трения и методов ее решения.....	16
1.4.1 Термодинамический анализ ряда положений тепловой задачи трения.....	17
1.4.2 Непрерывные и прерывные системы в ТНП.....	17
1.4.3 Скомпенсированные и некомпенсированные процессы в ТНП.....	19
1.5 Особенности механизмов пластической деформации поверхностных слоев материалов при трении.....	21
1.6 Исследование процессов структурно-фазовых превращений.....	22
1.7 Выводы и постановка цели и задач работы.....	25
Глава 2 Исследование процессов структурно-фазовых превращений при фрикционном нагреве поверхностной зоны никотрированных сталей в континуальном приближении.....	27
2.1 Обоснование выбора марки теплостойкой стали.....	27
2.1.1 Анализ физико-механических свойств теплостойких сталей	28
2.2 Выбор метода упрочнения поверхностной зоны.....	31
2.2.1 Термодинамический анализ процесса никотрирования сталей.....	32
2.2.2 Исследование процесса трещинообразования в поверхностной зоне никотрированных сталей.....	33
2.3 Оптимизация параметров процесса никотрирования.....	34
2.3.1 Толщина покрытия.....	34
2.4 Исследование исходного структурно-фазового состава никотрированной зоны.....	36
2.4.1 Анализ пористости поверхностной зоны.....	36
2.4.2 Закономерности формирования дислокационных структур в диффузионной зоне.....	38
2.4.3 Исследование фазового состава исходных структур в поверхностном слое.....	39
2.5 Исследование процессов структурно-фазовых превращений в результате фрикционного нагрева.....	40
2.5.1 Установка для измерения параметров процесса трения	40
2.5.2 Анализ поро-и трещинообразования в процессе трения.....	42
2.5.3 Исследование фазового состава вторичных структур.....	44
2.6 Экспериментальные и аналитические исследования температурных процессов в поверхностной зоне.....	50
2.6.1 Исследование температур на субшероховатых поверхностях $T_{\text{суб}}$	50
2.6.2 Постановка тепловой задачи трения.....	51
2.7 Модельные представления термического удара.....	57
2.7.1 Континуальное приближение.....	57
2.7.2 Дискретный подход.....	59
2.8 Анализ причин возникновения восходящей диффузии.....	61
Глава 3 Использование метода молекулярной динамики (ММД) применительно к задачам трибологии.....	66

3.1 Формализм метода молекулярной динамики.....	66
3.2 Анализ типов кристаллических решеток исходных фаз в никотрированном слое и переходной зоне.....	68
3.3 Разработка потенциалов межатомного взаимодействия (ПМВ).....	71
3.3.1 Потенциалы для фаз α -Fe, γ -Fe и ϵ -Fe.....	72
3.3.2 Тестирование ПМВ.....	77
3.4 Задание начальных условий.....	78
3.4.1 Задание начальной температуры.....	78
3.4.2 Задание начальной скорости колебаний атомов.....	78
3.4.3 Задание оптимального времени шага интегрирования Δt	79
3.5 Задание граничных условий.....	79
3.6 Моделирование дефектов в кристаллах.....	80
3.6.1 Нарушение термодинамического равновесия (ТДР) в металлах при трении.....	80
3.6.2 Моделирование точечных и линейных дефектов.....	81
3.6.3 Моделирование межзеренных границ.....	90
3.7 Визуализация дефектов.....	91
Глава 4 Моделирование процесса эволюции трещин и пор и критерии оценки ресурсной долговечности	92
4.1 Моделирование процесса залечивания технологических пор и трещин.....	93
4.2 Моделирование процесса дислокационного упрочнения поверхностной зоны.....	96
4.2.1 Моделирование процесса формирования краевых дислокаций.....	96
4.2.2 Исследование процесса перемещения краевых дислокаций под действием ударного дислокационного напряжения $\sigma_{\text{дисл}}$	97
4.2.3 Исследование процесса дислокационного упрочнения.....	102
4.3 Моделирование процессов зарождения и роста трещин и пор во вторичных структурах поверхностной зоны.....	103
4.4 Моделирование процессов усталостного разрушения и износа поверхностной зоны...	108
4.4.1 Дилатонный механизм разрушения при порообразовании.....	110
4.4.2 Механизмы разрушения при трещинообразовании.....	112
Заключение.....	116
Список литературы.....	118
Приложения.....	129
Приложение А.....	130
ПА.1 Блок-схема программы моделирования $T_{\text{всп}}$	130
Приложение Б.....	131
ПБ.1 Кристаллическая решетка и ПМВ для фазы γ -Fe.....	131
Приложение В.....	134
ПВ.1 Кристаллическая решетка и ПМВ для фазы ϵ -Fe.....	134
Список литературы.....	138
Приложение Г.....	139
ПГ.1 Акты о внедрении результатов научно-исследовательской работы.....	139

Введение

Актуальность темы. В Тульском государственном университете в течение ряда лет ведутся исследования, связанные с обеспечением ресурсной долговечности технологических машин специального назначения (ТМСН). Проведенные исследования относились к изделиям, в которых фрикционный нагрев, имеющий место при эксплуатации, не играет доминирующей роли. В качестве объекта исследований использовались теплостойкие стали, а для повышения ресурсной долговечности поверхностной зоны применялся процесс низкотемпературной нитроцементации (процесс никотрирования). Были определены оптимальные с точки зрения обеспечения заданного ресурса изделий режимы никотрирования, исследованы механизмы износа никотрированного поверхностного слоя и диффузионной зоны.

Вместе с тем, номенклатура изделий, в которых фрикционный нагрев является определяющим, более обширна, что и предопределяет актуальность темы диссертационной работы.

Степень разработанности темы. В работах П.И. Маленко исследовано влияние фрикционного нагрева на структурно-фазовое состояние поверхностной зоны. В результате установлено, что в поверхностной зоне образуются вторичные структуры (ВС), фазовый состав которых, во-первых, отличен от фазового состава исходных структур, во-вторых изменяется по температурным зонам. При этом измерения температур производились экспериментальным путем фиксирования объемных температур $T_{об}$. В результате изменяются технологические свойства поверхностной зоны, в частности, адгезия, что приводит к уменьшению ресурсной долговечности, а, следовательно, ресурса узлов. Вместе с тем, измеренные объемные температуры $T_{об}$ лишь опосредованно подчеркивают роль температурного фактора в образовании ВС, так как доминирующую роль играют процессы, возникающие на микроконтактах поверхности трения, связанные с фрикционным нагревом. Экспериментальное определение температур на микроконтактах представляется сложной задачей, и даже ее реализация не гарантирует получение корректных результатов. В этой связи решающую роль играют методы моделирования, как температурных процессов, так и структурных превращений в поверхностной зоне.

Цель и задачи. Для реализации цели работы: установление влияния эволюции пор и трещин при фрикционном нагреве на ресурсную долговечность теплостойких сталей с покрытием поставлены следующие задачи, основанные на анализе причинно-следственных связей между физическими процессами, сопутствующими эволюции пор и трещин в поверхностной зоне трения и критериями ресурсной долговечности.

1. Осуществить выбор марки теплостойкой стали и методов ее поверхностного упрочнения для заданных условий эксплуатации.

2. Исследовать процессы структурно-фазовых превращений в поверхностной области по температурным зонам.

3. Исследовать дислокационное упрочнение, включая процессы эволюции пор и трещин.

4. Установить механизмы разрушения поверхностной зоны в результате эволюции пор и трещин.

5. Провести моделирование температурных процессов с учетом топографии поверхности трения на основе решения корректно поставленной тепловой задачи трения (ТЗТ).

6. Рассмотреть модельные представления термического удара (ТУ) как конечной стадии решения задачи фрикционного нагрева, исследовать процессы трансформации ТУ в поверхностной зоне в восходящую диффузию и дислокационное упрочнение.

7. Определить ресурсную долговечность поверхностной области по температурным зонам с выдачей практических рекомендаций.

Научная новизна диссертационной работы.

1. Показано, что процессы залечивания пор и трещин на начальном этапе эксплуатации ТМСН происходят под действием диффузионных процессов.

2. С учетом влияния температурного фактора произведена оценка динамики дислокационного упрочнения в поверхностной зоне трущихся деталей.

3. Определено влияние температурного фактора на процесс эволюции пор и трещин.

4. С использованием ММД изучены параметры и механизмы разрушения поверхностной зоны теплостойких сталей с покрытием и на этой основе определен ресурс узлов ТМСН по температурным зонам.

5. Установлено, что формирование температурного фронта при трении в отдельных локальных точках контакта шероховатых поверхностей является кратковременным, имеет волновую природу, вызывающую возникновение термоциклических напряжений, которые способствуют появлению и развитию структурно-фазовых изменений и формированию структурных дефектов, приводящих к развитию дилатонного и усталостного механизмов разрушения.

6. Разработана единая методика расчета фрикционных температур с учетом топографии поверхности на основе корректно поставленной ТЗТ и определения параметров ТУ как следствия термоциклирования на субшероховатостях поверхности трения.

7. На основе результатов определения параметров ТУ получены характеристики изменения напряжений по глубине поверхностной зоны, приводящих к появлению восходящей диффузии, дислокационному упрочнению и развитию пор и трещин.

Теоретическая и практическая значимость и реализация результатов работы в производстве.

Теоретическая значимость работы состоит:

- в корректной постановке и решении ТЗТ, конечным итогом которого служат параметры ТУ по температурным зонам;

- в установлении процессов трансформации ТУ по глубине поверхностной зоны, в результате чего определены напряжения $\sigma_{диф}$, вызывающие появление восходящей диффузии и напряжения $\sigma_{дисл}$, приводящие к дислокационному упрочнению;

- в рассмотрении на основе полученных результатов с использованием компьютерного моделирования процесса эволюции пор и трещин в результате фрикционного нагрева и определении циклической долговечности теплостойких сталей с покрытием по температурным зонам.

Полученные результаты по оценке ресурсной долговечности теплостойких сталей с покрытием в виде “Методика оценки процессов эволюции пор и трещин теплостойких сталей с покрытием при трении скольжения с ресурсным смазыванием” поэтапно внедрены в ООО “Эксперт СВ” для экспертной оценки состояния узлов и агрегатов сосудов под давлением, оборудования черной металлургии и подъемно-транспортных механизмов, в виде “Методика оценки ресурсной долговечности теплостойких сталей с покрытием при фрикционном нагреве в условиях трения скольжения с ресурсным смазыванием” поэтапно внедрены в АО “Тулаточмаш” с целью совершенствования методик проведения стендовых испытаний изделий и выдаче рекомендаций по эффективной диагностике ресурсной долговечности изделий в условиях фрикционного нагрева, а также внедрены и используются в учебном процессе кафедры ФММ в виде методики моделирования структурообразования на основе метода молекулярной динамики “Влияние импульсных температурных процессов на структурообразование в теплостойких сталях с покрытием” по дисциплине “Математическое моделирование в металлургии” для магистров, обучающихся по

направлению 22.04.02 “Металлургия”, профиль “Металловедение и термическая обработка металлов и сплавов”.

Методология и методы исследований. Экспериментальные исследования морфологии поверхности трения производились с помощью профилографа-профилометра Калибр-201 и атомно-силового микроскопа (АСМ) большого разрешения. Металлографический анализ вторичных структур осуществляли на оптическом Neophot-21 и электронном микроскопе УМВ-100В; напряженное состояние, характеристики субструктуры и фазовый состав вторичных структур исследовали рентгеноструктурным методом на дифрактометре ДРОН-6; для определения геометрических характеристик и объемной доли вторичных фаз в поверхностной зоне использовали послойный метод количественной металлографии. Экспериментальные результаты подвергались статистической обработке с использованием регрессионного анализа методами, рекомендованными стандартом РД 50-449-84 с применением ЭВМ и графопостроителей. Аналитические методы исследований базировались на основе решения дифференциальных уравнений теплопроводности и теплопередачи параболического (стационарный режим трения) и гиперболического (переходный режим трения) типов. Определение параметров восходящей диффузии в зависимости от трансформации давления ТУ на основе количественных методов теории диффузии. Исследования на атомном уровне производились на основе ММД. Для этих целей была произведена корректировка программы моделирования XMD с разработкой пакетов прикладных программ. Метод феррографии использовался для определения поверхностных характеристик частиц износа.

Положения, выносимые на защиту, включают:

- моделирование с помощью ММД: диффузионных процессов в поверхностной зоне, краевой дислокации и динамики ее перемещения, дислокационного упрочнения, процессов эволюции пор и трещин;
- экспериментальные исследования процесса образования ВС в поверхностной зоне;
- корректную постановку ТЗТ;
- определение параметров фрикционного нагрева на суб- и микрошероховатостях поверхности трения;
- модельные представления ТУ в континуальном и дискретном приближениях;
- трансформацию ТУ в поверхностной зоне в восходящую диффузию и дислокационное упрочнение;
- установление на основе энергетического подхода механизмов разрушения – дилатонного механизма для пор и усталостного механизма для коротких и длинных трещин;
- определение ресурсной долговечности в диапазоне температур $T=450 \dots 900$ К с выдачей практических рекомендаций.

Степень достоверности и апробация результатов. Достоверность результатов подтверждается экспериментальными исследованиями, применением современных технических средств при анализе, приемлемой сходимостью теоретических и эмпирических результатов исследований, а также реализацией результатов исследований в промышленности и в учебном процессе.

Основные положения и наиболее важные научные и практические результаты диссертационной работы докладывались и обсуждались на международных, всероссийских научно-технических конференциях, региональных научно-технических конференциях: «Инновации в материаловедении» (г. Москва, 2013 и 2015 г.г.); «Механические свойства современных конструкционных материалов» (г. Москва, 2014 г.); «Фундаментальные исследования и инновационные технологии в машиностроении» (г. Москва, 2015 г.); «Трибология – машиностроению» (г. Москва, 2016 и 2018 г.г.); «Евразийский Союз Ученых» (г. Москва, 2014 г.); «Новые материалы и технологии в

машиностроении» (г. Брянск, 2013 и 2015-2019 г.г.); «Фундаментальные и прикладные аспекты новых высокоэффективных материалов» (г. Казань, 2014 г.); «Новые материалы» (г. Сочи, 2016 г.); «Многомасштабное моделирование структур, строение вещества, наноматериалы и нанотехнологии» (г. Тула, 2013 и 2017 г.г.); «Релаксационные явления в твердых телах» (г. Воронеж, 2015 г.); «Механика и трибология транспортных систем» (г. Ростов-на-Дону, 2016 г.); «Инженерия поверхности и реновация изделий» (Украина, г. Киев, 2015-2019 г.г.); «Полимерные композиты и трибология» (Беларусь, г. Гомель, 2015, 2017 и 2019 г.г.).

Публикации. Всего опубликовано 45 научных работ, из них по теме диссертации опубликовано 35 научных работ, 4 публикации в ведущих периодических изданиях, определенных Высшей аттестационной комиссией, 6 публикаций в изданиях, включенных в международные реферативные базы (Web of Science, Scopus). Из работ, опубликованных в соавторстве, соискателем в диссертации использованы только те положения, которые разработаны им лично.

Объем и структура диссертационной работы. Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения и списка литературы, изложенных на 141 странице машинописного текста, включая 74 рисунка, 28 таблиц, приложения. Список литературы включает 190 источников.

Глава 1

Состояние вопроса (литературный обзор)

В современных машинах и механизмах широко используются узлы с ресурсным смазыванием, то есть смазыванием на определенный цикл работы. Типичный пример – подшипники скольжения. Мониторинг состояния поверхности трения, как правило, производится по количеству продуктов износа в смазке. Вместе с тем известны узлы трения, в которых вследствие особенностей их эксплуатации смазывание (после предварительной чистки) производится периодически. Согласно ГОСТ 27674-88 “Трение, изнашивание и смазка. Термины и определения” такое смазывание называется ресурсным. В этой связи ресурсное смазывание следует рассматривать как обычное смазывание без появления в смазке продуктов износа. Наличие малых зазоров в соединениях ($h=(0,5 \dots 4) \cdot 10^{-5}$ м) позволяет утверждать, что речь можно вести о полужидкостном и граничном трении. Типичным примером служат узлы автоматики, к примеру, узлы автоматики ТМСН. В подобных узлах контроль состояния поверхности трения периодически производится визуально. Вместе с тем, практика показывает, что вследствие жестких условий эксплуатации (больших нагрузок, высоких скоростей и темпа стрельбы) в поверхностных слоях трущихся поверхностей происходят необратимые структурно-фазовые изменения, приводящие к износу, схватыванию, а иногда и заеданию, то есть отказам, предотвратить возможность появления которых визуально не представляется возможным.

В науке о трении – трибологии детально исследуются подобные процессы, устанавливаются причины их появления, определяется их связь с изменением состояния поверхностных слоев. Для оценки ресурса ответственных узлов Ю.Н. Дроздовым осуществлено физическое и математическое моделирование трибопроцессов с помощью специально разработанных инвариантов (критериев) [1]. Вместе с тем инварианты учитывают исходное и конечное (после испытаний на изнашивание) состояние поверхности трения, не рассматривая промежуточных структурно-фазовых изменений. Таким образом, исключается возможность управления процессом изнашивания.

Некоторое исключение составляют исследования Л.М.Рыбаковой, приведенные в работе [2]. В данной работе в качестве критерия, отражающего химическую модификацию трибоповерхности методом скользящего пучка рентгеновских лучей, установлен критерий структурно-напряженного модифицирования поверхности трения

$$k_{\beta} = \frac{\beta_h}{\beta_0}, \quad (1.1)$$

где β_h – значение физической ширины рентгеновских лучей, где эта величина не подвергалась изменению в результате трибопроцесса; β_0 – значение физической ширины рентгеновских линий на минимальной исследованной глубине.

Предполагается, что предложенный интегральный метод градиентной рентгеноскопии применим как для идентификации структурных и субструктурных изменений, локализуемых в очень тонких поверхностных слоях до нескольких микрон, так и для более детального анализа различных структурно-чувствительных параметров в пределах одной кристаллографической модификации. Для практического использования трибомоделирования в прогнозировании износов и ресурса реальных узлов в работе [1] параметр k_{β} введен в качестве инварианта. Данный метод использован Р.Г. Ялышевым в работе [3], в которой исследовалась структура поверхностных слоев нитроцементованной стали 45. Показано, что в процессе трения происходит распад аустенита и выделение фазы α -Fe, причем с увеличением глубины количество феррита увеличивается. Практически фиксируется полиморфное превращение γ -Fe $\rightarrow$ α -Fe.

Учитывая перспективность предложенного метода, в работе [4], предлагается новое научное направление развития металловедения, названное “динамическим металловедением”. Данное направление получило свое развитие в последующих работах [5, 6]. Вопросы повышения ресурса изделий типа “труба” посредством нанесения защитных покрытий подробно анализировались К.Н. Войновым [7]. Вместе с тем следует отметить, что подобные исследования не учитывают особенностей эксплуатации теплостойких сталей с покрытием. Требуются более фундаментальные исследования, касающиеся механических, физико-химических процессов, приводящих к образованию вторичных структур в поверхностных слоях.

Время образования вторичных структур гораздо меньше ресурса узлов трения. Вследствие этого большая часть ресурса определяется трением вторичных структур. Следовательно, необходимы аналитические, экспериментальные исследования и модельные представления, касающиеся, во-первых, непосредственно процессов образования вторичных структур, исследования их физико-механических и трибологических свойств, во-вторых, определения на этой основе критериев ресурсной долговечности.

1.1 Характерные особенности состояния поверхностных слоев при трении

При трении в общем случае структурное состояние поверхностных слоев зависит от несколько факторов: приложенных нагрузок (давления на контакте σ_k и скорости трения $V_{тр}$); морфологии контактирующих поверхностей; наличия смазочного материала, который определяет режим трения и возможных трансформаций режимов трения при уменьшении толщины h смазочного слоя; исходного структурно-фазового состояния поверхностного слоя, включая и износостойкие покрытия.

В зависимости от приложенных нагрузок пары трения можно условно разделить на нагруженные, средне- и тяжело-нагруженные. В диссертационной работе исследуемые узлы автоматики ТМСН следует отнести к средненагруженным – скорости трения изменяются в пределах $V_{тр}=1 \dots 10$ м/с, давление $\sigma_k=1 \dots 10$ МПа. Определяющее внимание все исследователи обращают на пульсирующий характер приложенных скоростей $V_{тр}$ и давлений σ_k . Однако причины пульсаций не рассматриваются и не исследуются. По нашему мнению, подобный подход можно объяснить тем, что данная область исследований скорее относится к сфере внимания трибологов. И действительно, с точки зрения трибологии большое влияние оказывает морфология поверхности трения в виде суб- и микрошероховатостей, так как контакт трущихся поверхностей происходит по их вершинам и носит дискретный характер даже при наличии смазочного материала, именно данное обстоятельство является причиной пульсации, но о критической толщине смазочного слоя $h_{сл}$, при которой влияние морфологии заметно, сведений не приводится.

В трибологии обобщенным параметром, который учитывает влияние $V_{тр}$ и σ_k , является температурный фактор, рассматривающийся в рамках ТЗТ. Для решения ТЗТ температуру трения разделяют на температуры на микроконтакте – температуру вспышки $T_{всп}$, поверхностную температуру $T_{пов}$, объемную – $T_{об}$ и температуру окружающей среды T_c . Максимальная температура на контакте приравнивается сумме указанных частных температур [8]

$$T_{\max} = \sum_{i=1}^i T_i . \quad (1.2)$$

Приведения зависимость основана на пионерской работе Блока [9]. Однако данный подобный подход следует считать ошибочным, так как он противоречит второму закону термодинамики. На самом деле имеет место трансформация температур [10]

$$T_{max}=T_{см} \rightarrow T_{суб} \rightarrow T_{всп} \rightarrow T_{нов} \rightarrow T_{об} \rightarrow T_{ср}, \quad (1.3)$$

где $T_{см}$, $T_{суб}$, $T_{всп}$, $T_{нов}$, $T_{об}$, $T_{ср}$ – соответственно температуры смазки, на суб- и микрошероховатости, поверхности, в объеме и средняя температура.

Добавление температуры на субшероховатостях $T_{суб}$ в формуле (1.3) вызвано особенностями ТЗТ, выявленными при работе над диссертацией. Таким образом, из проанализированных источников литературы можно сделать вывод о некорректности постановки ТЗТ. Анализ зависимости (1.3) показывает, что механизмы пульсации температур определяется температурами $T_{суб}$ и $T_{всп}$. Данный факт был установлен Боуденом и Тейбором экспериментально еще в 1935 г. [11], однако в дальнейшем ему не уделяли должного внимания.

В результате контактирования на суб- и микрошероховатой поверхности возникают высокочастотные температурные колебания, то есть процесс термоциклирования, носящий нестационарный характер, со скоростями цикла “нагревание-охлаждение” $K_t > 10^6$ град/с. Процесс термоциклирования распространяется на тепловые колебания атомов в кристаллической решетке и влияет на диффузионные и дислокационные процессы. В целом процесс термоциклирования относится к целому классу пульсирующих процессов, используемых в технике.

Необходимо отметить, что соответствующее описание морфологии поверхности трения в виде суб- и микрошероховатостей для аналитического описания колебательного температурного процесса при трении отсутствует. Использование ГОСТ 2789-73 “Шероховатость поверхности, параметры, характеристики и обозначения” дает возможность характеризовать только так называемые единичные контакты, например, посредством определения параметров R_a и R_z . Множество единичных контактов, определяемых как совокупности контактов, можно характеризовать как множества случайных величин, то есть посредством теории вероятностей. Предложенные в литературе методы, включая и методы теории вероятностей, приводят к ошибкам при описании совокупности контакта. Вместе с тем, аналитическое описание совокупности контакта для $T_{суб}$ и $T_{всп}$ приводит к корректной постановке и решению ТЗТ.

Существование смазочного материала влияет на состояние поверхностного слоя. В соответствии с режимом трения, толщина смазки изменяется. При работе узлов автоматики ТМСН в режиме ресурсного смазывания имеет место трансформация режимов трения от полужидкостного до граничного. При этом происходит изменение фактического контактного давления от $\sigma_{факт} \approx \sigma_k$ (номинальная площадь контакта $S_{ном}$) до $\sigma_{факт} \approx 20\sigma_k$ за

счет уменьшения площади фактического контакта $S_{факт}$ ($S_{факт} \approx \frac{1}{20} S_{ном}$). Так как для

запорных агрегатов $\sigma_k \leq 10$ МПа, то контакт будет упругим при полужидкостном трении, в тоже время при граничном трении контакт будет вязкоупругопластическим [12] (рис. 1.1). В зонах контакта S_i и S_{i+1} деформация может носить пластический характер при больших значениях σ_k , в зонах с наличием смазки – упругий. Из-за соударения микровыступов при их взаимном перемещении в поверхностных слоях имеют место высокие скорости деформации [13].

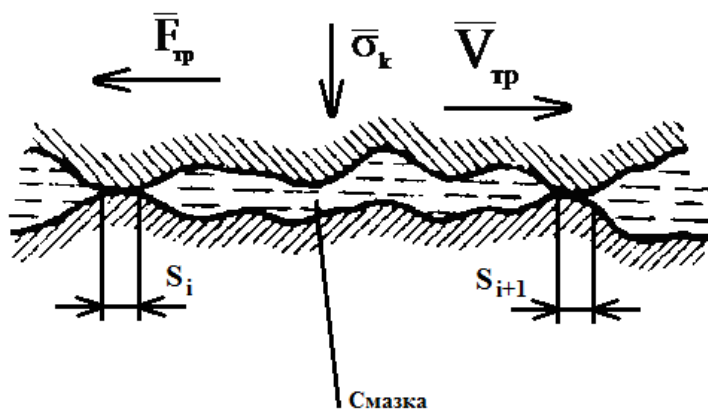


Рисунок 1.1. – Схема граничного трения металла по металлу

Трансформация режимов трения является источником, вызывающим изменения физических, механических и химических процессов на контакте, что и предопределяет различные механизмы изнашивания. В условиях пластического деформирования микронеровностей и поверхностных слоев предпочтительным является дислокационный механизм изнашивания. В условиях же вязкоупругого состояния, сопровождающегося диффузионными процессами и соответствующими структурно-фазовыми изменениями и схватыванием, превалирует усталостный износ.

1.2 Процесс структурообразования нитрированных покрытий на теплостойких сталях

В Тульском государственном университете в течение последних 30-ти лет проводятся работы, касающиеся разработки технологии нанесения карбонитридных (нитрированных) покрытий на теплостойкие стали, исследования процессов структурообразования и методов оценки их ресурсной долговечности. По результатам исследований в АК “Туламашзавод” было организовано опытное производство и произведены полигонные испытания нитрированных деталей, показавшие положительные результаты [14]. Ниже приводится анализ проведенных исследований.

1.2.1 Технология и структурообразование нитрированных покрытий

Под нитрованием обычно подразумевается процесс низкотемпературной нитроцементации, управляемыми параметрами которого являются процентное содержание аммиака и эндогаза в смеси, температурный интервал ΔT и время насыщения τ . Содержание аммиака в смеси определяет ее азотный потенциал. Процентное соотношение газов обычно берется фиксированным: 30/70, 50/50 и 70/30. Нитрование осуществляется в температурном диапазоне 540 ... 600 °С. В качестве перспективных рассматривались теплостойкие стали [14, 15].

Многочисленные экспериментальные исследования показали, что нитрированное покрытие представляет собой многослойную структуру, состоящую из карбонитридной зоны в виде “белой” нетравящейся полосы и диффузионного подслоя. Толщина “белого”

слоя составляет $h_{cl}=10 \dots 20$ мкм и состоит из γ' -однофазных и $(\varepsilon+\gamma')$ -двухфазных (Fe_4N , Fe_3N , Fe_2N , Fe_3C , $Fe_3(C,N)$) подслоев, строение которых является сложным с позиций соотношения нитридных, карбидных и карбонитридных фаз [14]. В то же время в работе [15] “белый” слой представляется более структурированным. Показано, что нитридные фазы располагаются на поверхности в следующей последовательности: Fe_3N и Fe_4N . В результате анализа экспериментальных данных в работе [14] делается вывод, что из семи марок сталей оптимальной с точки зрения эксплуатационных свойств является сталь 25Х3МЗНБЦА. В работе [16] на основании экспериментальных исследований делается, вообще говоря, спорный вывод о том, что “белый” слой оказывает превалирующее влияние на ресурсную долговечность никотрированного покрытия в целом.

В работе [14] исследуются процессы структурообразования в диффузионной зоне $h_{dz} \leq 100$ мкм и ее эксплуатационные свойства. Показано, что структура зон определяется нитридными (Fe_4N , Fe_3N , и Fe_2N), карбонитридными ($Fe_3(C,N)$) и карбидными (Fe_3C) фазами, объемная доля которых уменьшается по глубине зоны. Указывается также на наличие карбидных фаз типа Me_mC_n .

Основное внимание в работе уделялось определению характеристик субструктуры диффузионной зоны (плотности дислокаций ρ и размеров блоков D), характеризующих гетерогенность зоны и трещинообразование. Из проведенного сравнительного анализа ресурсных испытаний изделий (труб) делаются выводы о преимуществе процесса никотрирования над применяющимся на предприятии процессом хромирования и о превалирующем влиянии диффузионной зоны на ресурс изделия (таблица 1.1).

В работе [17] исследовалось влияние предварительного холодного деформирования заготовки на качество формирования покрытия. Установлено, что 20 %-ное пластическое деформирование активирует фазообразование в покрытии и приводит к росту его толщины. Более высокие степени ротационного обжата от 25 % до 50 % снижают скорость нарастания карбонитридного слоя, особенно при больших временах никотрирования до 10 ч. В то же время увеличение доли аммиака в газовой смеси приводит к монотонному увеличению глубины диффузионной зоны.

Таблица 1.1 – Расчетные и экспериментальные данные по ресурсу (сталь 25Х3МЗНБЦА)

Вид покрытия на трубе	Показатели ресурса, циклы			
	для покрытия	для диффузионной зоны	общий ресурс	ресурсные испытания ($h_{dz} \sim 100$ мкм)
Никотрированное	~1100	~7100	8200	~8000
Хромированное	~330	~5000	5030	~6000

В работе [18] в определенной степени учтены отрицательные явления, свойственные технологическим операциям получения деталей из теплостойких сталей с никотрированным покрытием. Для этих целей определены оптимизированные режимы технологических операций. В частности, в технологическую схему введена дополнительная операция низкотемпературного отпуска с рациональными с точки зрения структурообразования режимами, устраняющими деформацию заготовок изделий, полученных холодным ротационным обжатием. Сопутствующее данной операции коробление устраняется финишным шлифованием. Произведено уточнение значений дополнительного параметра процесса никотрирования – уровня азотного потенциала (8 %) и степени диссоциации аммиака, способствующее формированию наиболее коррозионностойкой структуры покрытия.

Помимо этого, вводится дополнительная финишная операция оксимолибденирования, позволяющая получить на поверхности антикоррозионную фазу Fe_3O_4 и износостойкую фазу Mo_2O_3 . Удорожание процесса никотрирования в связи с введением дополнительных операций компенсируется улучшением качества покрытия,

что подтверждено расчетами по специально разработанному критерию работоспособности.

1.2.2 Взаимосвязь между структурными параметрами и физико-механическими свойствами никотрированных покрытий

В проанализированных работах [14, 16, 17, 18] установлена модельная взаимосвязь между структурными параметрами никотрированного слоя и его физико-механическими и технологическими параметрами. Анализ изменения микротвердости на поверхности слоя и по его глубине показал соответствие микротвердости H_0 “белого” слоя и химического состава по легирующим элементам сталей в различных комбинациях. Карбидообразующие легирующие элементы (Mo, Ni, Zn) резко повышают H_0 ε -карбонитридного слоя. Определена зависимость объемов фаз от микротвердости. В частности, для сталей типа “БЦА” эти зависимости разнонаправленные, для “БЦ” – коррелятивные. Также показано, что по мере нарастания H_0 возрастает размер пор D и расстояние между ними d . На основе экспериментальных данных смоделирован средний размер пор. При этом показано, что подобные диффузионные модели могут быть использованы для анализа структурных технологических параметров. Установлено, что уровень остаточных технологических макронапряжений также коррелирует с микротвердостью H_0 .

Определены с целью моделирования эксплуатационных свойств покрытий графическое соотношение между H_0 и субструктурными характеристиками (плотностью дислокаций ρ , микронапряжениями $\sigma_{ост}$ и размерами физических блоков), а также основными параметрами механических свойств сталей (пределами прочности, текучести и усталости). В дальнейшем полученные результаты были использованы для установления структурно-энергетических критериев оценки трибоповреждаемости теплостойких сталей с покрытием.

Аналогичный подход используется в работе [14] для определения структурно-энергетических критериев диффузионной зоны. В работе выдвинута гипотеза о том, что гетерогенность диффузионной зоны можно определить через микротвердость и использовать этот подход для моделирования долговечности и определения оптимальных режимов никотрирования. На основании данной гипотезы предложена методика перехода от H_0 к характеристикам гетерогенности через фазовый состав в численной интерпретации и в рамках принятых значений эмпирических коэффициентов. Используя разработанную методику, теоретически обоснован энергетический критерий R_w для оценки усталостной долговечности диффузионной зоны.

1.3 Морфология поверхности трения и методы ее оценки

Морфология поверхности трения в современном понимании определяется совокупностью характеристики формы, текстуры и цвета поверхностей трения, областей их разрушения и частиц износа [19]. Форма представляет собой изрезанность границ объекта, в локальном – общую форму объекта (изогнутость, овальность и другие). Текстура показывает особенности строения рельефа, обусловленные двухуровневым

характером пространственных отношений высот неровностей. Цвет – это психофизическая реакция зрительной системы человека на электромагнитное излучение в диапазоне длин волн от 380 до 700 нм, которая, вообще говоря, не отражает абсолютные свойства материальных объектов [20].

Особенности морфологических признаков независимы от масштаба, то есть эти признаки не являются физической размерностью. В этой связи микрогеометрия поверхности трения и их морфология имеют взаимодополняющие понятия: микрогеометрия формирует высотно-шаговые и размерные характеристики шероховатого слоя, а морфология определяется их безразмерными, масштабно-инвариантными свойствами.

Если отталкиваться от размерных характеристик шероховатого слоя, то к ним применим масштабный фактор. Экспериментальное исследование и аппаратное обеспечение показывают, что неровности возможно разделить соответственно на четыре размерных уровня: волнистость, отклонения формы, микрошероховатость и субшероховатость [21].

1.3.1 Методы оценки топографии поверхности трения

Действительная поверхность имеет достаточно большой набор топографических элементов и его можно разделить на две группы с четырьмя уровнями отклонений формы [21]: макрогеометрию (макроотклонение и волнистость) и микрогеометрию (шероховатость и субшероховатость).

Если взглянуть на задачи, решаемые в диссертационной работе, интерес представляет микрогеометрия поверхности: шероховатость (микрошероховатость) и субшероховатость. В трибологии сложились четыре подхода для описания микрогеометрии: фрактальный, детерминистический, параметрический и вероятностный. Остановимся на параметрических и вероятностных подходах, как наиболее часто применяемых на практике.

Параметрический подход основывается на описании шероховатости совместностью некоторых характеристик, которые, обычно, находятся путем обработки профилограмм и рассматриваются в ГОСТе 25142-82 “Шероховатость поверхности. Термины и определения”. Как правило, снимается пять профилограмм с исследуемой поверхности, из которых выбирается одна с наиболее характерным микропрофилем. Возможность использования одной профилограммы для оценки параметров микрошероховатости основывается на свойстве эргодичности случайных неизменных процессов [22]. Неизменный случайный процесс имеет вид однородных, непрерывных, случайных колебаний вокруг определенного среднего значения.

Вероятностный подход основывается на теории вероятности и теории случайных процессов и отличается более полной информативностью. Он позволяет рассматривать профилограмму как некоторую статистическую подборку ординат (или вершин неровностей) или как определенную реализацию случайного процесса.

В первом случае значение ординат определяется функцией распределения $F(z)$. Нередко в качестве такой функции аппроксимируется кривая Гаусса, наиболее подходящая для технических приложений благодаря простоте ее математического описания. Наряду с этим, нужно заметить, что инженерные поверхности очень часто далеки от гауссовского распределения.

Более подходящим, с математической точки зрения, является подход, базирующийся на теории случайных полей, когда шероховатость определяется как

реализация некоторого случайного процесса. Идея использования такого способа принадлежит Линнику и Хусу [23], хотя в зарубежной литературе считается, что этот подход принадлежит Найаку. В основном, метод случайных полей разработан для гауссовских (изотропных и анизотропных) поверхностей. Его превосходство становится заметно для трехмерного (3D) образа реальной поверхности.

Одновременно, необходимо отметить, что в трибологии для анализа важны не ординаты профиля, а площадки контакта при трении, перпендикулярные к ординатам. В связи с этим предпочтительнее использование вероятностного распределения площадок контакта, которое определяется по профилограммам с помощью величины сближения двух контактирующих поверхностей под действием приложенной нагрузки. В этом случае, как показывает наш опыт, закон распределения длин контактов целесообразно выбирать из определенных физических соображений.

В работах [24, 25] используется марковская модель механического взаимодействия шероховатых поверхностей в процессе трения. В результате проведенных в них исследований показано, что в модели величины сближений двух тел и длины образующихся контактов при трении, учитываются автоматически. Вместе с тем в моделях принят ряд важных допущений, которые требуют доказательств о возможности их применения. Использование марковского процесса требует, чтобы поток контактов на микровыступах был ординарным и пуассоновским и время контактирования микровыступов подчинялось показательному закону распределения. Для доказательства этого требуется целый ряд вычислительных действий [22].

В этой связи в диссертационной работе в качестве математического аппарата целесообразно использовать или спектральное разложение длин контактов [26] или вейвлет-преобразование [27].

1.3.2 Методы измерения шероховатости трения

Наиболее распространенными методами измерений шероховатости трения являются шуповые. Например, для измерения микрошероховатости наиболее часто используется профилограф “Калибр-201”. С измерением субшероховатостей дело обстоит сложнее, это связано с разрешающей способностью измерительных приборов. Анализируя современные тенденции, видно, что интересы науки и техники в настоящее время сместились в сторону очень гладких поверхностей, к которым можно отнести и субшероховатости, то есть элементов шероховатости в микро- и нанометровом масштабе с последующим воссозданием образа реальной поверхности с использованием принципов туннельной микроскопии. Но наиболее актуальными остаются шуповые методы, в которых в качестве шупа используют иглу, скользящую по поверхности. Вертикальные направления движения иглы преобразуются, усиливаются и записываются в виде профилограммы и далее оцифровываются для обработки компьютером. Профилометры в настоящее время в состоянии выдавать широкий спектр параметров шероховатости с высокой точностью. Стоит также отметить атомно-силовые микроскопы (АСМ) большого и малого поля и наиболее точные сканирующие туннельные микроскопы (СТМ).

1.4 Анализ особенностей ТЗТ и методов ее решения

Температура трения, являющаяся ключевым фактором, влияющим на разнообразные процессы как на поверхности трения, так и в поверхностных слоях, должна определяться посредством корректной постановки ТЗТ и использования соответствующих математических методов ее решения.

Принципиальным моментом в ТЗТ является вопрос: что является исходным параметром в данной задаче – собственно температура или теплота трения. С точки зрения термодинамики необратимых процессов (ТНП) исходными параметрами в теплофизических процессах служат температура T , объем V , давление P и энтропия S . Теплота Q является производным параметром. В теории теплопроводности и теплопередачи при решении тепловых задач теплота может вводиться в дифференциальное уравнение в виде некоторого постоянного источника тепла. По мнению А.В. Лыкова [28] только в излучательных процессах, подчиняющихся закону Стефана-Больцмана, теплота является переменным параметром в дифференциальных уравнениях теплопроводности (граничные условия второго рода).

Приходится, к сожалению, констатировать практическое отсутствие в литературе математического описания источников теплоты для трения без смазки (“сухого” трения). Для трения со смазкой в теории теплопроводности, опираясь на физические процессы в смазке, принимающей за источник теплоты при трении, используется аналитическое описание источника. Далее, как показали наши исследования, важно разделить температурные процессы на стационарные и нестационарные. Подобное разделение производится в теории теплопроводности. Однако в трибологии основное внимание уделяют стационарным процессам. Источник тепла описывается через известные параметры процесса трения, а именно [29]

$$q = \sigma_k V_{mp} f_{mp}, \quad (1.4)$$

где q – плотность потока тепловой энергии от источника; σ_k , V_{mp} , f_{mp} – соответственно контактное давление, скорость и коэффициент трения.

Предполагается, что тепловой поток делится между контактирующими телами пропорционально их теплофизическим характеристикам на две части $q = q_1 + q_2$ [30] и вводится коэффициент разделения тепловых потоков

$$K_{1,2} = \frac{q_{1,2}}{q}. \quad (1.5)$$

Далее, используя имеющиеся в теории теплопроводности методы, отдельно решаются тепловые задачи двух контактирующих тел.

Процесс трансформации теплоты трения в температуру описывается отдельно для двух тел посредством дифференциальных уравнений с соответствующими граничными условиями, используемыми в теории теплопроводности. Решение подобно поставленной задачи описывает процесс распространения температур в контактирующих телах.

Другой подход рассматривается в работе [31]. В ней предлагается зависимость, с помощью которой находится температура трения. Не вдаваясь подробно в анализ предложенной зависимости, который будет рассмотрен далее, отметим ее принципиальный недостаток. При стыковке температур на поверхностях контактирующих тел имеет место их несоответствие, то есть скачок, который не наблюдается в реальном процессе. Для определения максимальной температуры на контакте предлагается уже упоминавшаяся ранее зависимость в усеченном виде.

Между тем нестационарные процессы являются источниками ряда явлений, из которых, прежде всего, следует выделить пульсацию температур трения. Без учета

нестационарности и пульсации температуры для описания процесса распространения температур применяется закон Фурье и далее используется математическая модель параболического типа. Данная модель не учитывает релаксационные явления, имеющие место в нестационарном температурном процессе. Релаксационные процессы описываются уравнениями математической физики гиперболического типа. В результате из внимания исследователей выпадает так называемый термический удар, характерный для импульсных процессов. В свою очередь термический удар влияет на быстротекущие диффузионные процессы, на структурно-фазовые превращения и дислокационное упрочнение в поверхностном слое.

1.4.1 Термодинамический анализ ряда положений ТЗТ

В связи с тем, что физические процессы, используемые при постановке ТЗТ, иногда радикально отличаются, при анализе целесообразно опираться на определенные фундаментальные основы, разработанные, например, в ТНП. Для трения со смазочным материалом Г. Гребер использовал уравнение Навье-Стокса [32]. К примеру, для нахождения температуры трения T используется уравнение переноса энергии вида

$$\rho c_p \frac{dT}{d\tau} = \lambda \nabla^2 T + \frac{dP}{d\tau} + \eta \text{DissFkt}(V), \quad (1.6)$$

где ρ , c_p , λ и η – соответственно плотность, теплоемкость, коэффициент теплопроводности и коэффициент динамической вязкости смазки; $\nabla^2 T$ – операторное представление температур трения; $\frac{dP}{d\tau}$ – перепад давления смазки; $\text{DissFkt}(V)$ – диссипация энергии, отражающая теплоту трения.

Анализ уравнения (1.6) позволяет сделать важный вывод: в физическом отношении температура трения, источником которой является смазка, определяется через коэффициент вязкости $\eta_i(\text{DissFkt}(V))$ и изменения поля скоростей V смазки. Приведенный в работе [10] анализ показал, что уравнение (1.6) не противоречит требованиям ТНП.

Процессы структурообразования никотрированного слоя и образования вторичных структур также можно проанализировать с помощью методов ТНП [33] с использованием, в том числе, программного комплекса АСТРА [34], в который в качестве расчетных вводятся данные из справочника [35].

Далее приводятся некоторые сведения из ТНП, которые будут использованы для анализа особенностей ТЗТ.

1.4.2 Непрерывные и прерывные системы в ТНП

Понятие о непрерывных и прерывных системах в ТНП вводится с целью установления различий в переносах различных параметров между телами [36]. Процессу трения сопутствуют такие явления как перенос тепла и температуры, диффузия (массоперенос), образование вторичных структур – твердых растворов на базе фазовых

превращений и химических превращений на базе химических реакций. Так как процесс трения неизотермический и сопровождается ростом температуры, то основным подходом для его описания является энтропийный, базирующийся на основном соотношении ТНП

$$dS \geq \frac{dq}{T}, \quad (1.7)$$

где dS – изменение энтропии; dq – изменение количества тепла, подведенного к системе.

Соотношение (1.7) подчеркивает тот факт, что при трении имеет место рост энтропии как меры рассеяния различных видов энергии, в том числе и диссипации тепла. Рассмотрим изменение энтропии для непрерывных и прерывных систем.

Основным уравнением в данном случае является уравнение сохранения энтропии [28]

$$\rho \frac{dS}{d\tau} = \text{div} J_S + \sigma_S, \quad (1.8)$$

где ρ – плотность материала трибосистемы; $\text{div} J_S$ – дивергенция (расхождение) вектора потока энтропии J_S ; σ_S – локальное производство энтропии на единицу объема и времени.

В явном виде поток J_S и производство σ_S энтропии имеют следующий вид [37]:

для непрерывных систем

$$J_S = \frac{J_Q}{T} - \sum_{k=1}^n \mu_k J_k \leq 0, \quad (1.9)$$

$$\sigma_S = -\frac{J_Q \cdot \nabla T}{T^2} - \sum_{k=1}^n J_k \nabla \left(\frac{\mu_k}{T} \right) - \sum_{i=1}^l A_i d_i \varepsilon_i \geq 0; \quad (1.10)$$

для прерывных систем

$$I_S = \sum_{\alpha=1}^2 \frac{1}{T^{(\alpha)}} d_i Q_a^{(\alpha)} \leq 0. \quad (1.11)$$

$$\sigma'_S = - \left[d_i U_a^{(1)} - \sum_{k=1}^n \varphi_k d_i m_k^{(1)} \left(\frac{1}{T^{(1)}} - \frac{1}{T^{(2)}} \right) - \sum_{k=1}^n d_i m_k^{(1)} \left(\frac{\mu_k^{(1)} + \varphi_k^{(1)}}{T^{(1)}} - \frac{\mu_k^{(2)} + \varphi_k^{(2)}}{T^{(2)}} \right) - \sum_{i=1}^l \left(\frac{A_i^{(1)} \omega_i^{(1)} V^{(1)}}{T^{(1)}} \right) - \left(\frac{A_i^{(2)} \omega_i^{(2)} V^{(2)}}{T^{(2)}} \right) \right] \geq 0. \quad (1.12)$$

В уравнениях (1.7)-(1.12) J_S и I_S – локальный и полный потоки энтропии; σ_S и σ'_S – локальное и полное производство энтропии; J_Q и I_k – потоки тепла и диффузии; μ_k и φ_k – химический и относительный химический потенциалы k -го компонента; ∇T и $\nabla \left(\frac{\mu_k}{T} \right)$ – градиенты температур и относительного химического потенциала; A_i – сродство i -й химической реакции; $d_i \varepsilon_i$, $d_i Q_a^{(\alpha)}$, $d_i U_a^{(\alpha)}$, $dm_k^{(\alpha)}$ – степень завершенности химической реакции, внешний поток тепла, поток внутренней энергии, скорость изменения k -го компонента в α -подсистеме; ω_i и $V^{(\alpha)}$ – скорость i -й химической реакции и объем α -подсистемы.

Сравнительный анализ уравнений переноса энтропии для непрерывных (1.9) и прерывных (1.11) систем показывает, что их решение приведет к различным результатам. Рассмотрим, к примеру, расчет энтропии, полученный только от переноса тепла, не учитывая диффузионные потоки и химические реакции. Результаты расчетов приводят к следующим результатам [36, 37]:

для непрерывных систем

$$S_H = J_Q \frac{\nabla T}{T};$$

для прерывных систем

$$S_{II} = J_Q \frac{\nabla T}{T^2}.$$

Энтропия непрерывной системы $S_H = TS_{II}$, следовательно, и температуры непрерывных систем будут выше, чем прерывных систем. Другими словами, расчеты температур с использованием метода разделения тепловых потоков дают заниженные результаты.

Применительно к ТЗТ полученный результат следует интерпретировать следующим образом. Решение ТЗТ с использованием идеи разделения тепловых потоков между контактирующими телами и раздельного определения на этой основе температуры автоматически относит полученное решение к прерывным системам и дает неправильный результат.

Для приведения ТЗТ к непрерывным системам следует использовать контактный метод с граничными условиями 4-го рода [38]. В этом случае в граничных условиях приравниваются температуры $T_1 = T_2$ и тепловые потоки $q_1 = q_2$ на контакте. Хотя для решения ТЗТ используется весьма сложный аппарат теории потенциалов [38], метод получил развитие и нашел многочисленных последователей теории. Отметим основные недостатки предложенной теории. Во-первых, контакт между телами остается неподвижным и по этой причине неприменим к трению со смазочным материалом. Между тем смазка, являясь источником теплоты, перемещается в зазоре с переменной скоростью V . Во-вторых, граничное условие $q_1 = q_2$ не выполняется, так как тепловые потоки q_i в граничных условиях отнесены не только к контакту, но и к телам в целом.

Многочисленные последователи предлагали различные сочетания контактных температур и тепловых потоков в решениях так называемых “отраслевых” задач, сочетающих идеи разделения тепловых потоков и контактных задач. Подробный критический обзор данных исследований приведен в работе [10].

1.4.3 Скомпенсированные и некомпенсированные процессы в ТНП

Исторически сложилось так, что температура трения определялась как совокупность температур, образующихся на шероховатостях поверхности (температура на субшероховатостях $T_{суб}$, микронеровностях – температура вспышки $T_{всп}$, температура поверхности $T_{пов}$ и объемная температура $T_{об}$, определяемых раздельно). Оставались не выясненными до конца вопросы о максимальной температуре трения T_{max} и о трансформации температур в связи с отсутствием единой методологии их определения. В предыдущем параграфе изложена идея о том, что трансформации температур, например, $T_{суб} \rightarrow T_{всп}$, идет за счет волновых процессов, то есть излучения и при решении задачи о трансформации температур следует брать граничные условия 2-го рода. Также высказывалось логичное предположение о том, что $T_{max} = T_{суб}$. Анализ флуктуации термодинамических параметров в определенной степени позволяет решить поставленные задачи.

Вначале отметим, что флуктуации температур присущи всем размерным элементам системы: суб- и микрошероховатости, поверхностному слою и объему. Как показали наши исследования, для суб- и микрошероховатостей вследствие дискретного контактирования имеют место флуктуации в виде импульсов различной

продолжительности в течение всего процесса трения. Для поверхностного слоя и объема температурные флуктуации имеют место только для нестационарного процесса. Время рассасывания флуктуации – это время релаксации. Для объема характерное время релаксации $\tau_{рел} \approx 10^{-4}$ с, для поверхностного слоя $\tau_{рел} \approx 10^{-5}$ с, для суб- и микрошероховатостей соответственно $\tau_{рел} \approx 10^{-7}$ с и $\tau_{рел} \approx 10^{-6}$ с [10].

Появившиеся в последние годы исследования позволили определить размеры локальных температурных объемов до конкретных значений [39]. В данной работе с термодинамических позиций были определены диапазоны существования малых объемов – кластеров, нано- и микрочастиц. Для кластеров и наночастиц характерно проявление квантово-механических эффектов, к которым неприменима равновесная термодинамика Гиббса. Оценочное значение размеров наночастиц $r_{кр} < 10^{-8}$ м. Выше лежит область существования микрочастиц. Для их описания Хилл [40] ввел ряд значений термодинамических функций: внутреннюю энергию U , свободную энергию F , термодинамический потенциал G . Однако эти характеристики Хилла отличаются от аналогичных характеристик Гиббса тем, что в них учтены дополнительные параметры – площади поверхности частиц и поверхностное натяжение. В этой связи, строго говоря, к данным частицам нельзя применять уравнение Гиббса. Таким образом, область существования локального равновесия располагается выше значений $r \leq 10^{-8}$ м.

Согласно работе [41] в указанной области располагается субшероховатость с $r \approx 10^{-7}$ м. Из этого следует, что температура трения T_{max} располагается примерно на субшероховатостях и не формируется на более мелких частицах износа. По отношению к температуре вспышки $T_{всп}$ температура $T_{суб}$ является крупнозернистой флуктуацией (их времена релаксации отличаются меньше чем на порядок). Следовательно, трансформация $T_{суб} \rightarrow T_{всп}$ происходит по законам термодинамики и осуществляется, как указывалось ранее, за счет излучения. В то же время по отношению к поверхностной и объемной температурам $T_{суб}$ является мелкозернистой флуктуацией (времена их релаксации различаются больше чем на два порядка), участвует только в формировании диссипативных процессов. Поэтому в расчетах $T_{нов}$ и $T_{об}$ температура $T_{всп}$ не учитывается.

Рассуждая аналогичным образом, можно резюмировать, что $T_{всп}$ – это крупнозернистая флуктуация по отношению к $T_{нов}$ и мелкозернистая по отношению к $T_{об}$. В свою очередь $T_{нов}$ является крупнозернистой флуктуацией по отношению к $T_{об}$. В физическом смысле вначале формируется $T_{нов}$, затем по мере ее увеличения в течение определенного момента времени формируется излучительный тепловой поток, направленный на образование $T_{об}$

$$q = -\lambda \frac{(T_{нов} - T_{об})}{x}, \quad (1.13)$$

где λ – коэффициент температуропроводности; x – расстояние от поверхности.

Приведенный материал устанавливает порядок определения температур от T_{max} до $T_{об}$ по единой методике.

Проведенный анализ методов решения ТЗТ, во-первых, на основе положений ТНП позволил установить ошибочные предпосылки, использованные в проанализированных литературных источниках, и, во-вторых, наметить основы единой методологии для решения ТЗТ – это трансформация температур $T_{суб} \rightarrow T_{всп} \rightarrow T_{нов} \rightarrow T_{об}$.

1.5 Особенности механизмов пластической деформации поверхностных слоев материалов при трении

Процесс трения является сложной совокупностью взаимодействия многих факторов, при этом существенная роль принадлежит процессу пластической деформации. При деформации происходит последовательная трансформация структуры, которая характеризуется несколькими этапами: увеличением плотности дислокаций, образованием их скоплений, формированием ячеистой и затем фрагментированной структуры с наличием критических стыков между фрагментами, разориентированными на несколько градусов [42].

Авторами цикла работ [43-46] в рамках представленной макроскопической модели трения учитывается влияние факторов деформационного упрочнения при трении и фрикционного нагрева.

В работах [47, 48] с использованием методов вычислительной декорреляции спеклов [49] и мультифрактальной параметризации структуры на основе РЭМ изображений [50] исследованы особенности наноструктурирования поверхности образцов при трении в условиях сдвиговой неустойчивости подповерхностных слоев материала в результате сильной локализации деформации. Показано, что существуют три стадии локализации деформации в подповерхностных слоях: локализация деформации в полосах скольжения, накопление дефектов, текстурирование и формирование полос локализованной деформации; формирование нанокристаллической структуры в полосах локализованной деформации, активизация механизма зернограницного проскальзывания и деформации в местах пересечения полос с поверхностью и друг с другом; формирование поверхностных полос локализованного сдвига в соответствующем масштабном уровне. Это полностью изменяет характер деформирования с переходом от нормального к адгезионному типу изнашивания.

Комплексное исследование кинетики развития дислокационной структуры в поверхностных слоях ГЦК- и ОЦК-металлов при фрикционном взаимодействии, изучение связанных с дислокационным механизмом процессов упрочнения и разрушения микрообъемов, а также установление некоторых закономерностей микропластической деформации и изнашивания твердых тел представлено авторами работы [51].

Анализируя причины влияния переменных температур на структурные изменения в металлах, нельзя не отметить и роли температурных градиентов, создающихся при термоциклировании, и возникающего вследствие этого напряженного состояния. В результате в термоциклируемом металле появляются диффузионные токи, а при интенсивных теплосменах становится возможным и массоперенос, обусловленный перемещением дислокаций (так называемая “механическая” диффузия). Механизм влияния перемещения дислокаций на массоперенос очень сложен и может быть связан со сдвигами в кристаллах, вынужденным перемещением атмосфер примесных атомов с дислокациями, с изменением дефектности кристаллической решетки и другими факторами. Эффектом “механической” диффузии в значительной степени обусловлены и фазовые превращения. В последние годы показано, что термоциклирование, сопровождающееся фазовыми превращениями, особенно если они происходят по сдвиговому механизму, ускоряет гомогенизацию в 2 ... 3 раза, а иногда и на целый порядок. Имеющиеся данные свидетельствуют о том, что при объяснении влияния фазовых переходов на массоперенос нужно учитывать не только повышение концентрации точечных дефектов, но и массоперенос, возникающий вследствие перемещения дислокаций [51].

Оценивая в целом проанализированный материал, следует отметить, что он носит фрагментарный и качественный характер, в связи с чем представляется затруднительным

выделить определяющие факторы, влияющие на диффузионные процессы и тем более дать им количественную оценку посредством аналитических зависимостей либо осуществить их моделирование.

1.6 Исследование процессов структурно-фазовых превращений

Необходимость перехода исследования проблем трибологии, в частности, исследования процессов структурообразования в процессе трения от континуального приближения (сплошная среда) к ММД (атомный уровень) вызвана целым рядом причин. Первая из них связана с тем обстоятельством, что методы континуального приближения в определенной степени оказались исчерпанными. В этой связи следует согласиться с положениями, изложенными в работе [52]. В данной работе отмечается, что быстрое развитие наблюдается в тех областях науки, где "... систематически применяется и пропагандируется определенный метод научных исследований – метод индивидуальных включений или метод строгих выводов". В противном случае во многих областях применяются привычные методы исследований, которые могут продолжаться до бесконечности. В результате исследователи начинают больше думать о методе, чем о проблеме. Применение метода альтернативных гипотез и исключений позволяет получать новые сведения по рассматриваемым проблемам: ММД относится к подобным фундаментальным подходам.

Вторая причина связана с проблемой масштабного фактора. Современные методы исследования структурно-фазовых превращений в металлах и сплавах как экспериментальные, так и теоретические разработаны для массивных образцов и не всегда могут быть использованы для объектов гораздо меньшего масштаба. К примеру, процессы на субшероховатых поверхностях происходят при времени $\tau=10^{-7} \dots 10^{-10}$ с и размеров порядка $l=10^{-7} \dots 10^{-8}$ м. В развивающихся в настоящее время перспективных направлениях трибологии – нанотрибологии [53-55] и атомистической теории трибопроцессов [1] – оперируют еще меньшими размерами $l=10^{-9} \dots 10^{-10}$ м. Экспериментальная оценка происходящих на таких масштабах процессов затруднительна, а в некоторых случаях и невозможна. Теоретические результаты, полученные различными авторами, иногда различаются в разы.

При трении структурные и фазовые превращения происходят в тонких слоях поверхностного слоя и описываются электрон-фононными взаимодействиями с явлениями диссипации. Одним из способов описания процессов на нано- и атомном уровнях является использование ММД. Как показывает практика, данный метод позволяет существенно расширить границы применимости экспериментальных методов за счет расчета термодинамических величин с использованием какой-либо модели твердых растворов, соответствующей фазам поверхностной зоны трения. В результате реализации ММД возникает возможность изучить процессы, протекающие на атомном уровне, с использованием различных визуализаторов структуры и структурно-фазовых превращений.

Быстро прогрессирующее машиностроение ставит перед трибологией ряд новых задач, масштаб которых соответствует динамическому контакту атомарно-гладких поверхностей [56]. И наконец, ММД при реализации требует меньших финансовых затрат.

В этой связи следует признать своевременным вывод, приведенный в работе [1]. Вопросы адгезионно-усталостного трения, являющиеся наиболее сложными и наименее изученными, требуют применения атомистических моделей химической связи, электрон-

фононных процессов, явлений диссипации энергии, то есть построения атомистической теории трибопроцессов.

ММД – один из методов исследования, который позволяет решить эти задачи. Главный смысл ММД состоит в том, чтобы генерировать совокупность конфигураций атомов, то есть статистический ансамбль. В ММД численно решается система дифференциальных уравнений движения Ньютона [57-62].

С помощью ММД рассчитывают динамические траектории частиц в $6N$ -мерном фазовом пространстве ($3N$ -координаты и $3N$ -импульсы) [61]. Но траектории сами по себе интереса почти не представляют. Главный смысл метода состоит в том, чтобы генерировать совокупность конфигураций атомов.

Статистическая физика – это связующее звено между микроскопическим поведением атомов и термодинамикой. При моделировании $\tau < \infty$ и поэтому необходим анализ, достигнуто ли статистическое равновесие или нет. Если равновесие достигнуто, то по данным моделирования строятся фазовые диаграммы состояния материалов, если не достигнуто, то изучаются неравновесные процессы, например, диффузионные. В диссертационной работе исследуются неравновесные процессы.

В ММД используется аппарат классической ньютоновской динамики. Это справедливо, когда в квантово-механическом понимании, выполняется неравенство

$$\lambda_{\phi-B} \ll a, \quad (1.14)$$

где a – параметр кристаллической решетки фазы.

Рассмотрим выполнение неравенства (1.14) на примере фазы α -Fe, составляющей основу фазового состава никотрированного слоя и диффузионной зоны.

Используем формулу для $\lambda_{\phi-B}$

$$\lambda_{\phi-B} = \frac{2\pi\hbar}{m\nu}, \quad (1.15)$$

где $\hbar = 6,62 \cdot 10^{-34}$ Дж·с – постоянная Планка; $m = 0,927 \cdot 10^{-25}$ Н·с²/м – масса атома α -Fe;

$$\nu = \sqrt{\frac{3kT}{m}}, \quad (1.16)$$

где ν – скорость звука в фазе; $k = 1,38 \cdot 10^{-23}$ Дж/К – постоянная Больцмана.

Для $T = 600 \dots 1000$ К $\nu = (0,48 \dots 0,68) \cdot 10^4$ м/с $\lambda_{\phi-B} = (0,96 \dots 0,66) \cdot 10^{-12}$ м $\ll a = 0,287 \cdot 10^{-9}$ м [63].

На практике для обоснования возможности использования классических методов динамики удобнее пользоваться приближенным уравнением, описанным в работе [67] и связывающим температуры трения и Дебая.

Реализация ММД связана с программным обеспечением решения дифференциальных уравнений и создания потенциалов межатомного взаимодействия (ПМВ) ϕ , описывающих физико-механические свойства реальных прототипов. Обычно рассматривается система из сотен, тысяч и десятков тысяч атомов N с заданным ПМВ ϕ .

Основная сложность в практической реализации ММД состоит в корректной разработке потенциала ϕ . В последние годы потенциалы ϕ рассчитываются на основе ЕАМ. ЕАМ представляет из себя полуэмпирические ЕАМ потенциалы, которые являются функциями энергии и регулируют взаимодействие между соседними атомами. Потенциал, предложенный M.S. Daw и M.I. Baskes [64, 65] был разработан на основе квантово-механической теории функционала плотности. Они объединили теоретические соображения с присоединением ряда параметров, чтобы соответствовать основным свойствам объемного кристалла.

В настоящее время использование метода ЕАМ находит все более широкое применение, что подтверждается резким увеличением количества зарубежных публикаций. Уже созданы целые школы в США (M.I. Baskes с сотрудниками на базе лаборатории в Лос-Аламосе), в Великобритании (G.J. Ackland с сотрудниками на базе

Эдинбургского университета). Помимо этого, отмечается резкое увеличение публикаций в Китае и Индии.

В России применение ММД, прежде всего, связано с Физико-техническим институтом Уральского отделения РАН (г. Ижевск), Новосибирским, Воронежским университетами и с рядом других научных и учебных учреждений. Вместе с тем, следует отметить, что по количеству публикаций Россия явно отстает от зарубежных стран. Применительно к трибологии в целом в мире количество исследований с использованием ММД невелико. В основном преобладают исследования стандартного набора характеристик: функции радиального распределения атомов, фононных спектров, мгновенной конфигурации атомов. Этого явно недостаточно для понимания механизмов явлений, имеющих место при трении.

Из проанализированных работ, прежде всего, следует отметить монографию [66]. В ней изложены практические основы для компьютерного моделирования физических переходов первого и второго рода в однородных и неупорядоченных магнитных системах. В принципе, разработанные методы могут быть использованы и для бинарных сплавов.

Представляет интерес работа [67], где исследуется кооперативный механизм диффузии. В данной работе, критикуя существующие аналитические исследования различных механизмов диффузии, автор подтверждает объективность ММД.

В определенном смысле пионерской является работа [68]. В данной работе с помощью ММД проанализированы несколько монослоев в граничном смазочном слое и рассчитаны параметры самоорганизации смазочного слоя в зависимости от типа смазки и условий сдвига.

В последние годы интенсивно развиваются исследования по использованию ММД при анализе процессов структурообразования в сплавах под действием внешних сил. К подобным исследованиям следует отнести дислокационное упрочнение материалов. Основополагающие исследования по данной проблеме приведены в работе [69]. В данной работе промоделирован процесс “атомного образа” зарождения дислокации. Дислокации и дефекты в процессе моделирования локализуются и имеют центр симметрии.

Используя результаты работы [69], в работе [70] проведено моделирование динамики краевой дислокации ММД. Установлено, что на механизм динамики в основном влияет скорость деформации $\dot{\epsilon}$. Дальнейшие результаты исследований представлены в работе [71], в которой на атомном уровне проведено исследование движения дислокаций с использованием ММД, а на континуальном уровне макроскопическое движение вещества исследуется методами динамики сплошных сред. В принципе, подобный подход позволяет решить проблему масштаба: переноса результатов, полученных ММД, на макроуровень. В этом отношении исследования, представленные в работе [72], носят более фундаментальный характер. Используя ММД, исследовались пределы текучести и упрочнения для кристаллитов из 100 атомов до 10^8 атомов при $\dot{\epsilon} = 10^7 \dots 10^{12}$ 1/с. Путем сравнения представленных модельных результатов с экспериментальными данными, полученными на атомно-силовом микроскопе и наноиндентирования установлено, что атомистическое моделирование дислокаций кристаллизации на свободной поверхности позволяет получать результаты, пригодные для применения как на микро-, так и на макроуровнях. Это доказательство основано на исследовании пластичности как отражении глобального усреднения напряженно-деформированного поведения металлов. Для отражения данного усреднения предложены четыре шкалы с различным количеством атомов в модельном кристаллите: от 10^4 до 10^8 атомов. Известно, что дислокационное упрочнение приводит к трещинообразованию, то есть к усталостному износу. Существует большое количество моделей трещинообразования. Однако, моделирование данного процесса связано с определенными трудностями. Можно отметить следующие работы по данному направлению.

В работе [73] процесс образования нанотрещины не рассматривается, а ее образование моделируется путем удаления части атомов из соседних плоскостей. Далее

анализируется изменение конфигурации трещины при одноосном растяжении с различными степенями деформации. Установлено, что на начальном этапе имеет место релаксация за счет образования дислокаций с различными векторами Бюргерса. После 30 % деформации происходит диффузионная перестройка структуры с пластической деформацией в устье трещины, то есть реализуется случай вязкого разрушения.

В работе [74] промоделирован процесс зарождения нанотрещины. Первоначально, исходя из анизотропной теории упругости, были рассчитаны условия плоской деформации, при которых происходит образование трещины. Установлено, что это образование соответствует теории хрупкого разрушения Гриффитса. При дальнейшем увеличении нагрузки моделирование показало, что дальнейшее распространение трещины может быть чисто хрупким (упругим), вязким или вязкоупругим. Вязкое разрушение происходит за счет эмиссии дислокаций. В работе [75] полученные результаты были уточнены для случая переменной температуры T . Сравнение модельных результатов с теорией разрушения Райса [76] показало хорошую корреляцию.

В связи с тем, что сам процесс разработки программного обеспечения требует больших затрат времени, целесообразно использовать разработанное и апробированное программное обеспечение. В настоящее время в ММД широко используются две программы моделирования: XMD – для однопроцессорных компьютеров, LAMMPS – для параллельных кластеров. В диссертационной работе использовалась программа Д.Рифкина XMD в версии 2.5.38 [77]. В данной программе учтены накопленные ошибки, свойственные как непосредственно методу ММД, так и ошибки вычислительного характера. Процесс реализации программы XMD носит пошаговый характер, включающий в себя формирование модельного кристаллита из заданного количества атомов (кристаллических решеток) различного фазового состава, адаптацию программы XMD к используемому программному обеспечению и собственно исследования механизмов структурно-фазовых превращений в модельных кристаллитах под действием пульсирующих температур на суб- и микрошероховатостях в виде термических ударов. Программа рассчитана на $N \leq 10^5$ атомов.

1.7 Выводы и постановка цели и задач работы

В этой связи в укрупненном виде предметом исследований в диссертационной работе является установление влияния эволюции пор и трещин при фрикционном нагреве на ресурсную долговечность теплостойких сталей с покрытием. Отсюда, естественно, вытекает необходимость в исследовании факторов, определяющих процесс эволюции пор и трещин. К ним следует отнести:

- 1) исследование процессов образования ВС в процессе трения;
- 2) анализ морфологии поверхности трения и оценка ее значимых параметров;
- 3) постановку и решение ТЗТ;
- 4) анализ и оценка явлений, связанных с повреждаемостью поверхности трения (адгезия, схватывание);
- 5) исследование процесса залечивания пор и трещин в поверхностной зоне;
- 6) исследование процесса образования и развития новых пор в поверхностной зоне;
- 7) исследование процесса дислокационного упрочнения поверхностной зоны;
- 8) исследование процесса трещинообразования в поверхностной зоне.

Цель работы – установление влияния эволюции пор и трещин при фрикционном нагреве на ресурсную долговечность теплостойких сталей с покрытием.

Задачи работы.

1. Осуществить выбор марки теплостойкой стали и методов ее поверхностного упрочнения для заданных условий эксплуатации.
2. Исследовать процессы структурно-фазовых превращений в поверхностной области по температурным зонам.
3. Исследовать дислокационное упрочнение, включая процессы эволюции пор и трещин.
4. Установить механизмы разрушения поверхностной зоны в результате эволюции пор и трещин.
5. Провести моделирование температурных процессов с учетом топографии поверхности трения на основе решения корректно поставленной тепловой задачи трения (ТЗТ).
6. Рассмотреть модельные представления термического удара (ТУ) как конечной стадии решения задачи фрикционного нагрева, исследовать процессы трансформации ТУ в поверхностной зоне в восходящую диффузию и дислокационное упрочнение.
7. Определить ресурсную долговечность поверхностной области по температурным зонам с выдачей практических рекомендаций.

Глава 2

Исследование процессов структурно-фазовых превращений при фрикционном нагреве поверхностной зоны никотрированных сталей в континуальном приближении

В приведенном в главе 1 анализе литературных источников, касающихся процесса упрочнения теплостойких сталей посредством никотрирования, проводятся данные по оптимальному с точки зрения ресурсной долговечности структурно-фазовому составу исходных фаз в поверхностной зоне. Далее данный состав исследовали с точки зрения достижения требуемого ресурса и определялись соответствующие критерии. Вместе с тем процесс фрикционного нагрева оставался вне зоны исследования и его влияние на ресурсную долговечность не анализировалась. Однако, ряд исследователей, в частности И.М. Любарский и Л.С. Палатник [78], отмечали, что в поверхностной зоне в процессе трения происходят структурно-фазовые изменения под действием диффузионных процессов. При этом отмечалось, что диффузионные процессы направлены из глубины к поверхности трения, то есть имело место восходящая диффузия. Однако, причины, вызывающие восходящую диффузию, не анализировались. Но нашему мнению, такой причиной служит фрикционный нагрев поверхностной зоны под действием приложенных внешних нагрузок – давления σ_k , скорости трения $V_{тр}$ и силы трения $F_{тр}$. Следовательно, следует рассмотреть два задачи:

- изменения исходного структурно-фазового состава поверхностной зоны экспериментальными и аналитическими методами;
- решить так называемую тепловую задачу трения (фрикционный нагрев).

В данной главе решения указанных задач приводятся в континуальном приближении, когда исследуемая среда предполагается сплошной. Следовательно, используются традиционные методы анализа.

2.1 Обоснование выбора марки теплостойкой стали

Условия работы узлов автоматики ТМСН отличаются рядом факторов: импульсным характером нагревания, реверсивностью перемещения, кратковременностью остановок. В этой связи ресурс их работы будет определяться как механическими характеристиками материала всего сечения детали (конструктивная долговечность), так и структурой и свойствами их поверхностного слоя (ресурсная долговечность). Помимо этих требований следует учитывать возможность нанесения на детали фрикционных (защитных) покрытий.

В количественном виде условия работы можно определить следующим образом:

- 1) массив детали разогревается до температуры $T=400 \dots 500$ °С, поверхностный слой ($h \leq 1$ мм) – до температуры $T=600 \dots 700$ °С;
- 2) одновременное действие на сталь циклических изменений температуры и давления приводит к наложению силовых и термических напряжений и остаточных технологических напряжений, в результате чего в материале создается сложное напряженное состояние;
- 3) высокие удельные давления при этом могут превосходить предел текучести при заданных температурах эксплуатации.

Исходя из вышеизложенного, при разработке теплостойкой конструкционной стали необходимо обеспечить следующий комплекс ее свойств:

1) максимальную конструктивную объемную прочность, высокий предел текучести, низкую температуру вязко-хрупкого перехода, минимальную скорость теплового разупрочнения, достаточную степень деформационного упрочнения;

2) необходимую объемную пластичность после окончательной термической обработки (высокую вязкость разрушения);

3) высокие триботехнические (антифрикционные и износостойкие) свойства поверхностного слоя.

Эти требования могут быть обеспечены в результате рационального легирования стали и правильного назначения режимов термохимической обработки. Анализ литературных источников показал [3, 4], что для этих целей экономически целесообразно использовать среднеуглеродистую сталь (0,25 ... 0,40 %) С с карбонитридным поверхностным упрочнением.

Для твердорастворного упрочнения в качестве легирующего элемента целесообразно использовать никель, обеспечивающий достаточную стойкость и высокую температуру плавления. При гетерогенном механизме упрочнения дисперсионными частицами в качестве последних целесообразно использовать карбиды, нитриды и карбонитриды ванадия и ниобия, а также карбиды хрома $Me_{25}C_6$ и Me_7C_3 . Эти карбиды могут растаорять важные в себе важные для процесса структурообразования элементы (молибден, марганец, вольфрам).

Таким образом, структура и физико-механические свойства легированных теплостойких конструкционных сталей будут определяться типом карбидо- и некарбидообразующих легирующих элементов, их концентрационными соотношениями и степенью их влияния на соответствующие характеристики структуры.

2.1.1 Анализ физико-механических свойств теплостойких сталей

На основании проведенных исследований установлено, что наиболее перспективными являются стали с легирующими элементами Mo-Ni-W-V-Nb-Zr с содержанием Cr≈3 %. Для выбора наиболее оптимальной марки стали были исследованы семь марок с различной комбинацией элементов, причем в качестве базовой была выбрана сталь 25Х3МЗНБЦА, имеющая следующий химический состав (табл. 2.1).

Таблица 2.1 – Химический состав стали 25Х3МЗНБЦА

	Содержание элементов										
	Fe	C	Cr	Mo	Ni	Si	Mn	Nb	Zr	S	P
% масс.	92,71	0,26	3,0	3,0	0,6	0,12	0,17	0,1	0,02	> 0,01	> 0,01

Качество заготовок приведенных выше марок сталей в состоянии поставки должно соответствовать ТУ 3-1551-88 “Заготовки из стали марки 25Х3МЗНБЦА”. Анализ качества заготовок проводили на темплетах размером 150x120 мм, вырезанных из заготовок. Механические свойства сталей приведены в таблице 2.2.

Механические свойства заготовок сталей следует анализировать в следующих направлениях:

1) обеспечения конструктивной прочности;

2) фазового состава и структуры, обеспечивающих ресурсную долговечность по глубине поверхностной зоны;

3) механической обрабатываемости сталей.

По отношению к обеспечению конструктивной прочности наилучшие свойства обеспечивают образцы, имеющие максимальное значение ударной вязкости (стали №№

1,6, табл. 2.2). Изломы на образцах, подвергшихся ударному воздействию, соответствуют первому баллу шкалы согласно ТУ 1-92-156-90 “Штамповки и поковки из углеродистой и легированной конструкционной стали”. Микротравлением установлена плотная, однородная структура во всех образцах.

Таблица 2.2 – Механические свойства сталей

Номер марки стали	Марка стали	$\sigma_{н.ц.}$, МПа	$\sigma_{0,2}$, МПа	σ_b , МПа	δ , %	ψ , %	KCU, МДж/м ²	H ₀ , МПа
1	25X3M3HБЦА	920	1060	1200	15	55	4,9	4800
2	25X3M3H5БЦА	960	1040	1200	13,5	42	2,9	3500
3	25X3M3H5ВБЦА	940	1030	1220	11	50	3,1	4300
4	25X3M3HЦА	850	930	970	-	-	3,1	4300
5	25X3M3HФЦА	1100	1180	1330	10,5	48	2,4	3200
6	25X3M3HВЦА	880	960	1120	10	48	4,8	3300
7	25X3MНЦА	880	970	1110	12	48	3,3	4400

Микроисследованием установлена структура высокоотпущенной нормализованной теплостойкой марки стали – сорбит (рис. 2.1).

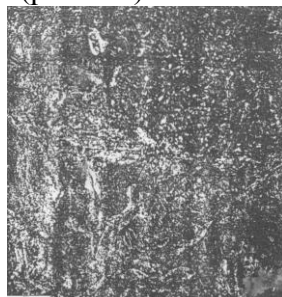


Рисунок 2.1. – Микроструктура теплостойкой стали

Механическая обрабатываемость конструкционных теплостойких сталей в общем случае предопределяется их химическим составом, микроструктурой, а также физическими (теплопроводность) и механическими (твёрдость, вязкость) свойствами. С целью улучшения механической обрабатываемости сталей заготовки подвергались термической обработке по следующим режимам (табл. 2.3).

Таблица 2.3 – Режимы термической обработки сталей

№ п/п	Вид термической обработки	Время нагрева, ч	Температура нагрева, °C	Время выдержки, ч	Охлаждающая среда	H ₀ , МПа
1	Нормализация	2,0	900	1,0	воздух	1970
2	Высокий отпуск	2,0-2,5	680	2,0	воздух	3860
3	Закалка	2,5-3,0	1040	0,5	вода	3860
4	Предварительный отпуск	2,0-2,5	600±20	2,0	воздух	2350
5	Промежуточный отпуск	2,0-2,5	620-640	4,0	вода	1970
6	Окончательный отпуск	2,0-2,5	620-640	8,0	вода	1970

Совместный металлографический и рентгенофазовый анализ показали следующие результаты (для стали 25X3M3HБЦА). После пеоовой операции термической обработки – нормализации отмечается диспергирование структуры и дробление пластинчатых фаз

структуры (рис. 2.2 а). Митротвердость при этом сохраняется на уровне ~ 1970 МПа. Проведение посленормализационного отпуска при температуре 680°C не приводит к видимым изменениям в структуре заготовки (рис. 2.2 б), однако при этом митротвердость возрастает почти в два раза и достигает значения 3860 МПа. При этом следует отметить, что митротвердость имеет обратную корреляционную связь с ударной вязкостью, следовательно, ударная вязкость падает. Последующая закалка от температуры 1040°C обуславливает формирование частично мартенситной структуры (рис. 2.2 в) с митротвердостью 3860 МПа, находящейся на уровне митротвердости после нормализации и высокого (670°C) отпуска. Предварительный при температуре 600°C отпуск закаленной заготовки обуславливает формирование дисперсной зернистой структуры перлитного класса (рис. 2.2 г) с одновременным снижением митротвердости до значения 2350 МПа. Последующий промежуточный отпуск при 620°C по данным металлографии (рис. 2.2 д) приводит к заметному огрублению структуры, причем митротвердость снижается до исходного после нормализации уровня 1970 МПа. Повторный отпуск при той же температуре $\sim 620^{\circ}\text{C}$ еще более заметно изменяет микроструктуру в сторону ее укрупнения и более выраженной пластинчатости (рис. 2.2 е). Однако, митротвердость при этом сохраняется на уровне ~ 1970 МПа. Образующаяся при этом структура – троостит. Механическая обрабатываемость сталей основана на величине периода стойкости инструмента и величине крутящего момента $M_{кр}$. Отметим, что $M_{кр}$ после термической обработки падает на 70% , а период стойкости возрастает в два раза.

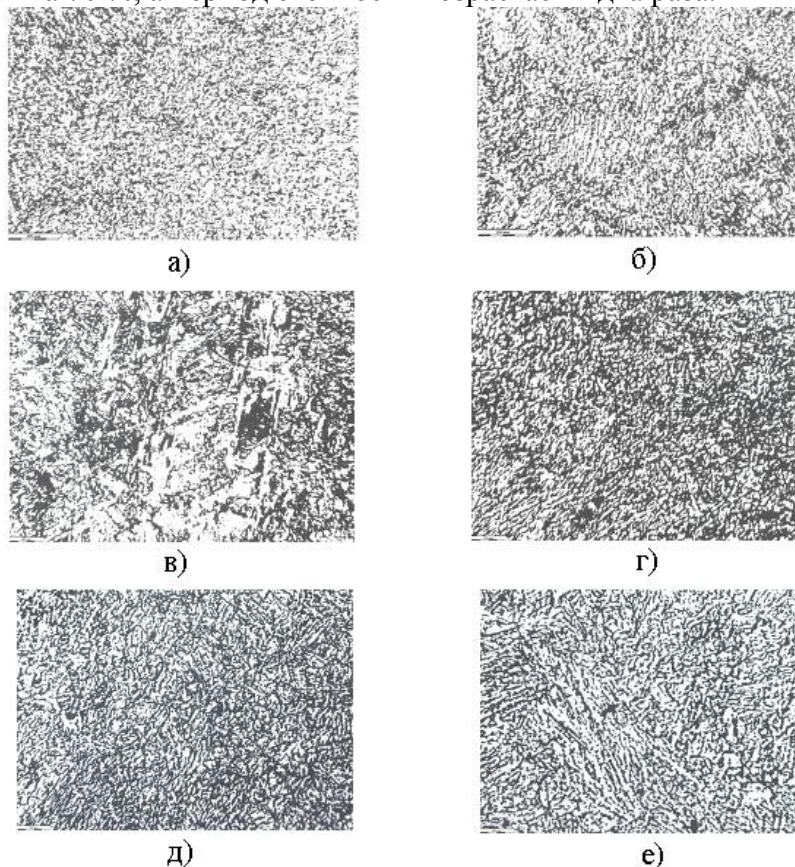


Рисунок 2.2. – Микроструктуры теплостойкой конструкционной стали 25X3M3NBЦA

Таким образом, в результате экспериментов установлено, что конкурирующими сталями является стали №№ 1 и 6. Окончательный выбор стали будет определен после нанесения защитного покрытия. При этом основными факторами для выбора служат толщина образующегося покрытия и склонность к трещинообразованию.

2.2 Выбор метода упрочнения поверхностной зоны

Анализ литературных источников по технологиям создания функциональных защитных покрытий для повышения ресурсной долговечности ТМЧН показал, что весьма перспективным для теплостойких сталей является процесс низкотемпературной нитроцементации (процесс нитротрирования). При выборе метода упрочнения учитывались и экологические проблемы, отраженные в работах К.Н. Войнова [79, 80].

Процесс нитротрирования осуществлялся в газовой среде (аммиак/эндогаз), температуре $T \leq 600^\circ\text{C}$, рациональном соотношении газов C/N и при постоянном давлении [81]. В нитротрированном слое присутствуют фазы Fe_3N , Fe_4N , Fe_3C и $\text{Fe}_3(\text{CN})$. В переходной зоне имеет место постепенное (а для фазы Fe_3C резкое) уменьшение данных фаз с одновременным появлением фаз карбидов легирующих элементов Mo_2C и Cr_7C_3 и примесей FeS_2 , FeSi и Fe_2P [82].

Преимущественно, процессы карбонитрирования исследовались [83-86], в основном, для чистого железа и нелегированных сталей. Как мы видим из диаграммы состояния (рис. 2.3 [85]), в зависимости от условий карбонитрирования, состав слоев, даже на чистом железе, может существенно различаться. Важной научной и практической задачей является изучение и прогнозирование состава покрытий сложнолегированных сталей, реализация которой требует применения экспериментальных подходов в сочетании с методами термодинамики [33], которые используются для анализа многокомпонентных систем. В связи с этим, в диссертационной работе проводится термодинамическое моделирование, экспериментальные исследования режимов нанесения фазового состава нитротрированных покрытий на сложнолегированной теплостойкой конструкционной стали.

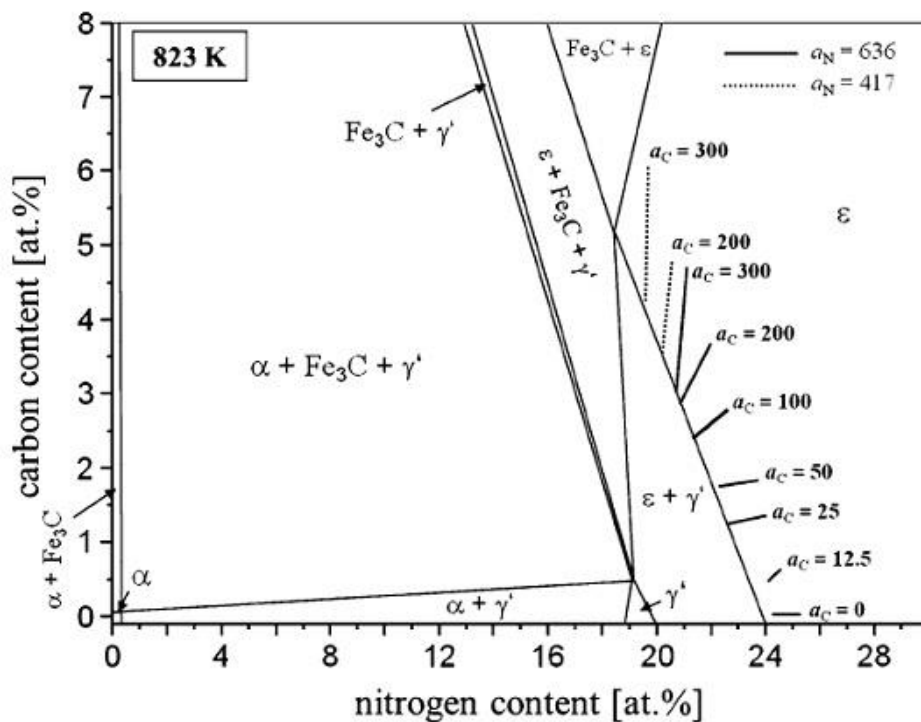


Рисунок 2.3. – Изотермическая фазовая диаграмма системы Fe-N-C при 823 К [85].
Указаны активности углерода – a_C и азота a_N на поверхности

2.2.1 Термодинамический анализ процесса нитротрирования сталей

Термодинамическое моделирование процессов карбонитрирования сталей 25Х3М3НБЦА и 25Х3М3НВЦА проводилось для условий, близких к оптимальным экспериментальным данным, при которых получается максимальная толщина слоя h_{cl} и глубина диффузионной зоны h_{d3} .

Термодинамический анализ показал, что особое внимание следует уделять соотношению $R=C/N$. Это связано с тем, что скорости разложения эндогаза и диффузионных процессов C и N в матрице различны. «При соотношении $C/N=1/1$ на поверхности образца образуется пленка углерода, под которой формируется слой карбида железа с примесями карбидов хрома, ниобия и марганца. Одновременно с карбидами, в том же слое наблюдаются и нитридные выделения на основе CrN с нитридами кремния, ниобия, цинка и железа, а также некоторое количество $FeSi$ и MnS . Уменьшение доли углерода и увеличение доли азота до $C/N=1/3$ будет приводить к тому, что основной фазой в поверхностных слоях будет железо, содержание которого монотонно растет от поверхности вглубь. Формирующиеся соединения будут равномерно распределяться по глубине. В основном это твердые растворы нитридов хрома, железа, кремния, ниобия и цинка. Несколько меньше доля карбидных фаз: карбидов железа, хрома, ниобия и марганца. Очевидно, что некоторая часть карбидов и нитридов будут находиться в виде твердого раствора карбонитридов (рис. 2.4 а-в).

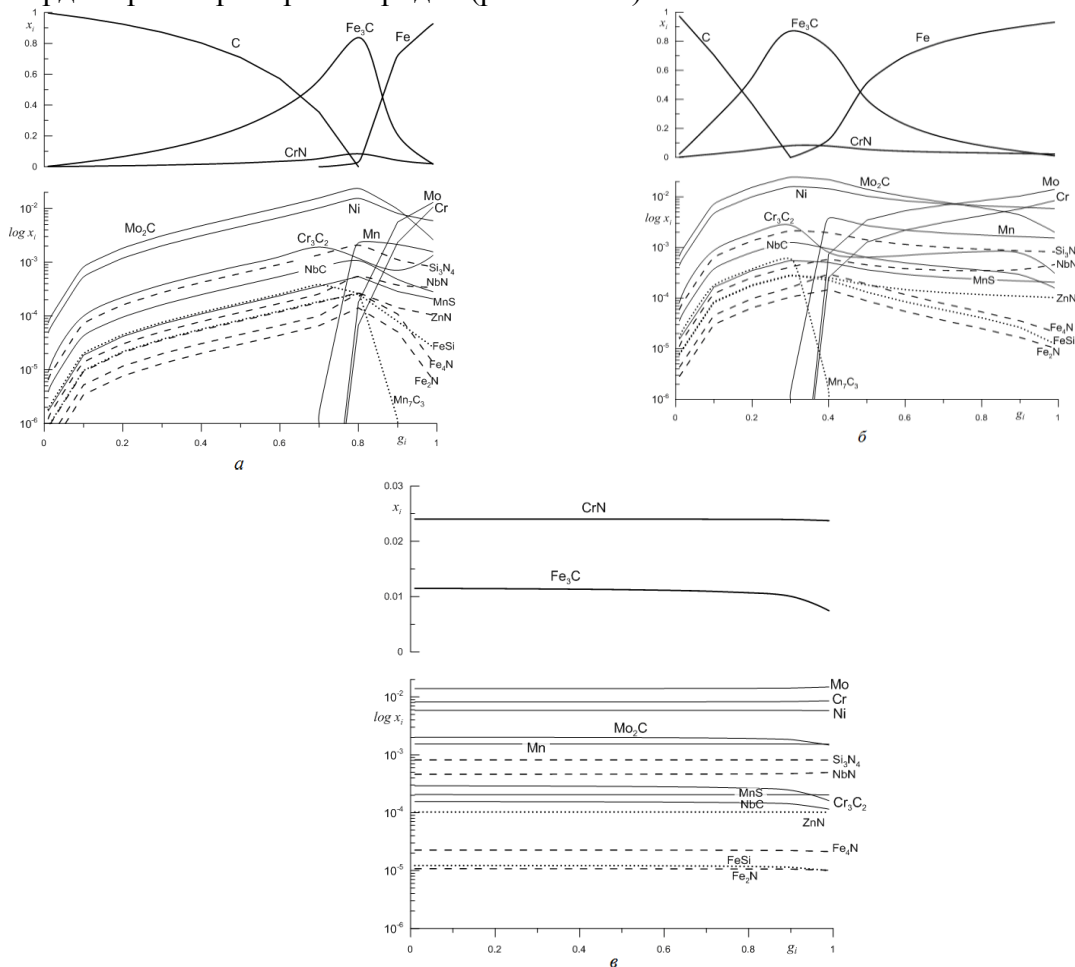


Рисунок 2.4. – Зависимость содержания компонентов в поверхностных слоях стали от массовой доли компонентов газовой фазы при соотношении C/N : а – 1/1; б – 1/2; в – 1/3» [188, 189].

Из термодинамического анализа следует, что при карбонитровании сталей 25Х3М3НБЦА и 25Х3М3НВЦА состав образующихся покрытий в зависимости от соотношения С/Н в газовой фазе может формироваться на основе карбидных или нитридных твердых растворов. Соотношение С/Н на поверхности отличается от соотношения компонентов элементов в смеси аммиак/эндогаз, что является одной из причин расхождения экспериментальных и расчетных данных по составу компонентов. Следует отметить также, что с помощью рентгенофазового анализа сложно оценить наличие компонентов, содержание которых невелико. К тому же, такие соединения (например, CrN) могут формироваться не сразу в виде кристаллов, а через стадию образования мелкодисперсных рентгеноаморфных частиц.

2.2.2 Исследование процесса трещинообразования в поверхностной зоне никотрированных сталей

Для исследования процесса трещинообразования после никотрирования поверхностной зоны сталей 25Х3М3НБЦА и 25Х3М3НВЦА был проведен металлографический анализ образцов размером 40х30 мм. Результаты исследований показали, что процессы трещинообразования в сталях не идентичны. У стали 25Х3М3НВЦА выявлено наличие магистральных трещин, пересекающих никотрированный ("белый") слой, диффузионную зону и основу (рис. 2.5 а,б). При наличии магистральных трещин деталь отбраковывается, так как стендовые испытания, проведенные на детали типа "труба" показали, что наличие магистральных трещин приводит к разрушению внутренней поверхности "трубы" (ее снятию типа "чулка" из отверстия).

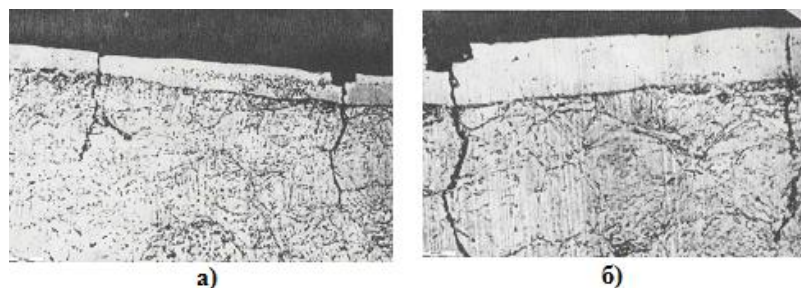


Рисунок 2.5. – Структура поверхностной зоны стали 25Х3М3НВЦА после никотрирования

Процесс трещинообразования в поверхностной зоне стали 25Х3М3НБЦА представлен на рис. 2.6 а,б. Металлографический анализ показал присутствие сетки микротрещин различной протяженности.

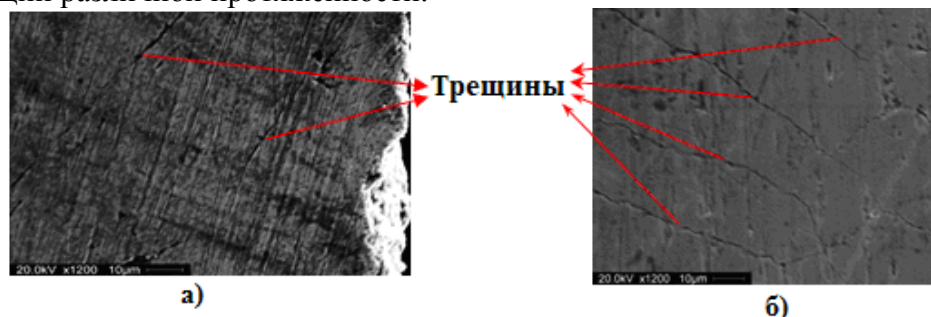


Рисунок 2.6. – Распространение трещин в поверхностных слоях никотрированной стали 25Х3М3НБЦА

Таким образом, из семи представленных марок теплостойких сталей наиболее перспективной является сталь 25Х3М3НБЦА.

2.3 Оптимизация параметров процесса никотрирования

Для выбранной марки стали 25Х3М3НБЦА была осуществлена оптимизация параметров никотрирования с целью обеспечения требуемых свойств.

2.3.1 Толщина покрытия

При помощи регрессионного анализа экспериментальных данных были получены зависимости толщины «белого» карбонитридного слоя h_{cl} и глубины диффузионной зоны h_{dz} от параметров T , τ , R :

$$h_{cl} = A_1 T + A_2 T^2 + A_3 \tau + A_4 \tau^2 + A_5 R + A_6 R^2, \quad (2.1)$$

(константы: $A_1 = -8,15 \cdot 10^{-2}$; $A_2 = 1,61 \cdot 10^{-4}$; $A_3 = -1,63$; $A_4 = 0,17$; $A_5 = 8,84$; $A_6 = -2,65$; T - $^{\circ}\text{C}$; τ - ч; R - %),

$$h_{dz} = A_1 T + A_2 T^2 + A_3 \tau + A_4 \tau^2 + A_5 R + A_6 R^2, \quad (2.2)$$

(константы: $A_1 = -16,28 \cdot 10^{-2}$; $A_2 = 3,22 \cdot 10^{-3}$; $A_3 = -32,4$; $A_4 = 3,32$; $A_5 = 176,88$; T - $^{\circ}\text{C}$; τ - ч; R - %).

Было доказано, что с увеличением температуры никотрирования от 813 К до 853 К толщина «белого» слоя h_{cl} возрастает, а также формируются более глубокие от 190 до 230 мкм диффузионные зоны. При температурах выше 853 К скорость роста покрытий снижается, что обусловлено активацией процессов деазотации поверхности и «процессов диффузии азота вглубь диффузионного слоя. Кроме того, температуры выше 853 К способствуют порообразованию и выделению карбонитридной сетки по границам α -зерен в диффузионном подслое.

В высокоуглеродистых средах состава $R=30/70$ углерод участвует в формировании диффузионной зоны покрытия только до глубины, не более 50 мкм. С увеличением парциальной доли аммиака в насыщающей смеси, наблюдается значительный рост толщины диффузионной зоны. При этом толщина «белого» слоя возрастает незначительно. Наиболее сильное насыщение поверхностного слоя азотом достигается при соотношении $R=70/30$. При температуре насыщения 873 К толщина «белого» слоя увеличивается с ростом давления газовой смеси до 1000 Па и снижается при дальнейшем повышении давления (табл. 2.4).

В результате насыщения азотом поверхности, его концентрация уменьшается, а относительное содержание углерода немного возрастает, в частности в ε - и γ' -карбонитридных фазах.

Оптимальные условия никотрирования, при которых получается качественное защитное покрытие с максимальными величинами (рис. 2.7 а-в) толщины «белого» слоя h_{cl} и глубины диффузионной зоны h_{dz} достигаются при $T=853$ К, давлении $P=1000$ Па в течение 8 часов, при составе газовой смеси $R=50/50$.

Таблица 2.4 – Значения толщины «белого» слоя $h_{сл}$ и глубины диффузионной зоны $h_{дз}$ никотрированной стали 25Х3МЗНБЦА

Температура $T, ^\circ\text{C}$	Время $\tau, \text{ч}$	Состав смеси R, (аммиак/эндогаз)	Толщина «белого» слоя $h_{сл}, \text{мкм}$		Глубина диффузионной зоны $h_{дз}, \text{мкм}$	
			расчетная	эксперимен- тальная	расчетная	эксперимен- тальная
540	4	30/70	16,4	-	143,8	-
		50/50	18,2	-	161,8	162,8
		70/30	9,4	-	73,6	76,2
	6	30/70	16,5	-	145,0	-
		50/50	18,3	-	163,0	-
		70/30	9,5	-	74,8	-
	8	30/70	19,3	-	172,8	175,8
		50/50	21,0	-	190,6	193,8
		70/30	12,3	-	102,6	-
560	4	30/70	14,4	-	164,0	-
		50/50	16,2	16,3	181,8	-
		70/30	7,4	7,6	93,8	-
	6	30/70	14,5	-	165,2	-
		50/50	16,3	-	183,0	-
		70/30	7,5	-	95,0	-
	8	30/70	17,3	17,6	193,0	-
		50/50	19,1	19,4	210,8	-
		70/30	10,3	-	122,6	-
580	4	30/70	18,4	18,7	184,8	187,4
		50/50	20,3	20,5	202,6	205,2
		70/30	11,4	11,7	114,4	117,2
	6	30/70	18,6	-	186,0	-
		50/50	20,4	-	203,8	-
		70/30	11,6	-	115,6	-
	8	30/70	21,4	21,6	214,0	216,8
		50/50	23,1	-	231,4	-
		70/30	14,3	14,6	133,4	136,6» [190].

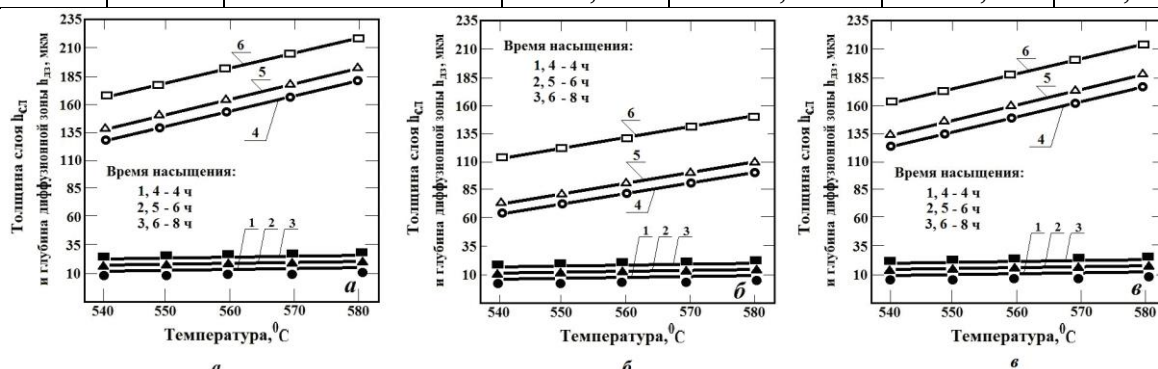


Рисунок 2.7. – Зависимости толщины «белого» слоя $h_{сл}$ и глубины диффузионной зоны $h_{дз}$ от температуры насыщения:

а – состав насыщающей среды $R=50/50$; б – состав насыщающей среды $R=70/30$;
в – состав насыщающей среды $R=30/70$. Обозначения: 1, 2, 3 – толщина «белого» слоя $h_{сл}$;
4, 5, 6 – глубина диффузионной зоны $h_{дз}$

2.4 Исследование исходного структурно-фазового состава никотрированной зоны

2.4.1 Анализ пористости поверхностной зоны

Металлографический анализ гетерогенности никотрированных зон, приведенный в предыдущем разделе диссертации, показал наличие в них пор различных размеров (рис. 2.8 а-г). Как следует из рисунка. 2.8 а-г возможны два механизма порообразования. Согласно реакции $Fe_3N + C \rightarrow Fe_3(N,C) + \text{поры}$ порообразование наблюдалось после 4 ... 6-ти часового насыщения. Несплошности, как правило, формируются около крупных частиц со стороны диффузионного фронта. Процесс порообразования можно активизировать кинетически (за счет увеличения времени насыщения) или химически (за счет повышения степени легированности). В то же время в α -матрице диффузионных зон реализуется другой механизм согласно реакции $N + N \rightarrow N_2 + \text{поры}$. Топографически центрами выделения молекулярного азота и зарождения пор в данном механизме являются субструктурные дефекты и, в первую очередь, в форме полигональных нагромождений.

Количественно пористость оценивается следующими параметрами: 1) объемной долей пор f ; 2) средним размером пор $\bar{D}$; 3) средним расстоянием между порами $\bar{d}$.

Связь между указанными параметрами для гетерогенных систем оценивается классической зависимостью

$$f = \frac{\pi}{6} \left(\frac{\bar{D}}{\bar{d}} \right)^2. \quad (2.3)$$

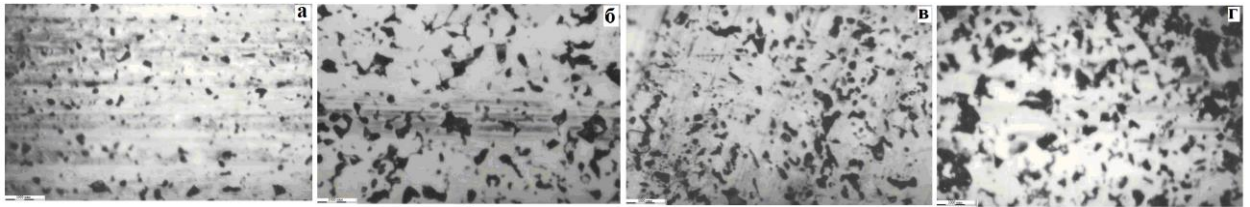


Рисунок 2.8. – Характер распределения пористости на поверхности никотрированной стали 25Х3М3НБЦА: уровни объемной пористости: а – $f=0,04$; б – $f=0,16$; в – $f=0,20$; г – $f=0,25$.

Формула (2.3) дает расчетное значение $f_{расч}$. Экспериментально параметр $f_{эксп}$ оценивается согласно методике, которая заключается в том, что объемная доля приравнивается относительной площади, занимаемой этими дефектами в произвольном плоском сечении образца, а также их доле на произвольной линии, проведенной на фотографии поверхности покрытия, либо доле беспорядочно нанесенных на микрофотографию точек, попадающих на изображения пор. Использовали соответственно точечный метод или более экспрессную его модификацию – метод сеток, в котором визуально оценивается число совпадений узлов прямоугольной сетки с участками пор. Наложение квадратной сетки из 12х12 ячеек соответствовало просчету $132=169$ точек. Объемная доля пор f определялась из выражения

$$f = \frac{N_{пор}}{N_o}, \quad (2.4)$$

где $N_{пор}$ – число точек, попавших на пористые участки; $N_o=169$ – общее число точек, наносимых на фотографию никотрированной структуры.

Всего было обследовано около 30 фотографий никотрированной поверхности. Результаты измерений приведены в таблице 2.5.

Таблица 2.5 – Показатели объемной пористости при f при $T=580$ °C и различных режимах никотрирования

Режимы никотрирования	$R(30/70)$, 8 ч	$R(70/30)$, 8 ч	$R(50/50)$, 2 ч	$R(50/50)$, 8 ч	$R(50/50)$, 12 ч
f	0,1	0,15	0,08	0,12	0,15

При прочих равных условиях установленный ранее оптимальный режим никотрирования ($T=580$ °C, $R(50/50)$, $\tau=8$ ч) обеспечивает минимальный показатель пористости $f_{\text{эсп}}$. Значения $\bar{D}$ и $\bar{d}$ были измерены по фотографиям поверхности методом линейного анализа. Результаты приведены в таблице 2.6.

Таблица 2.6 – Измеренные значения $\bar{D}$ и $\bar{d}$ карбонитридного слоя стали 25X3M3НБЦА для $T=580$ °C

Режимы никотрирования	$R(50/50)$, 8 ч	$R(70/30)$, 8 ч
$\bar{D}$, мкм	4,5	3,0
$\bar{d}$, мкм	11,0	8,0
$\left(\frac{\bar{D}}{\bar{d}}\right)^2$	0,168	0,144
$f_{\text{расч}}$	0,09	0,08

Формирование пористости в поверхностных зонах ε -фазы можно объяснить только высокой метастабильностью последней. На поверхности насыщения достаточно концентрации азота, а затем и углерода. В этой связи механизм порообразования может быть связан с фактором давления молекулярного азота, находящегося в равновесии с атомарным азотом, растворенным в кристаллической решетке. В работе [87] приводятся данные о том, что давление находящегося в равновесии свободного азота имеет порядок $P=(2 \dots 5) \cdot 10^{10}$ Па. Под влиянием внутреннего давления поры зарождаются вначале на мало- и большеугловых границах зерен. Затем главным механизмом роста пор является деформация скольжением кристаллической решетки. Давление роста пор $P_{\text{пор}}$ можно выразить соотношением

$$P_{\text{пор}} \approx \frac{Gb}{d}, \quad (2.5)$$

где $G \approx 8 \cdot 10^{10}$ Н/м² – модуль сдвига ε -фазы; $b=3 \cdot 10^{-10}$ м – вектор Бюргерса; $d=2,87 \cdot 10^{-10}$ м – параметр решетки α -Fe.

Из уравнения (2.5) следует, что при равновесном давлении $P=5 \cdot 10^{10}$ Па поры становятся нестабильными и начинают расти, достигнув размера $D \sim 5 \cdot 10^{-10}$ м. Отметим попутно, что при давлениях порядка $P=8 \cdot 10^{10}$ Па и соответствующей температуре $T>400$ °C могут происходить полиморфные превращения γ -Fe $\rightarrow$ ε -Fe.

Пористость в общем случае ухудшает антифрикционные свойства диффузионной зоны. Согласно работе [88] в условиях трения скольжения поры играют роль концентраторов напряжений, что в свою очередь активизирует появление контактно-усталостных трещин. Концентрация микронапряжений между двумя соседними порами согласно работе [89] определяется формулой

$$\sigma_{\text{конц}} = \left(\frac{2F_s E}{\pi} \right)^{0,5} \sqrt{\frac{\bar{D}}{\bar{d}}}, \quad (2.6)$$

где F_s и E – соответственно удельная свободная энергия и модуль упругости кристаллита, $F_s=3,4 \cdot 10^3$ Дж/м³, $E=2,15 \cdot 10^{11}$ Па.

Поле напряжений вокруг сфероидальных пор приведено на рис. 2.9.

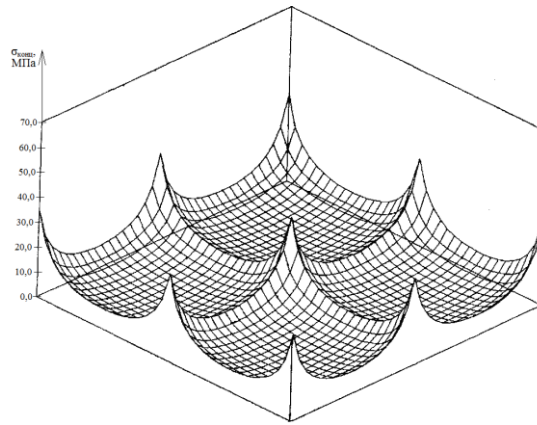


Рисунок 2.9. – Поле напряжений вокруг сфероидальных пор

2.4.2 Закономерности формирования дислокационных структур в диффузионной зоне

Для определения плотности дислокаций ρ с помощью рентгеновского дифрактометра послойно, через 10 мин рассматривались изменения ширины рентгеновских линий β деформированных трением приповерхностных слоев. Плотность дислокаций определяли по квадратической зависимости плотности ρ дислокаций от истинной (физической) ширины β рентгеновских линий

$$\rho = A\beta^2, \quad (2.7)$$

где A – коэффициент, зависящий от упругих свойств материалов (для металлов с кубической решеткой $A \approx 2 \cdot 10^{16} \text{ 1/см}^2$).

На рис. 2.10 представлены градиенты физической ширины рентгеновских линий β и плотности дислокаций ρ по глубине трибослоя.



Рисунок 2.10. – Градиенты β и ρ по глубине трибослоя для стали 25Х3МЗНБЦА:
1 – исходное состояние; 2 – после 8-ми часового трения с маслом И-45

В качестве критерия состояния дислокационных образований выбирали отношение

$$\Delta\beta = \frac{\beta_0}{\beta_h}, \quad (2.8)$$

где β_0 – физическая ширина на минимальном расстоянии от поверхности; β_h – физическая ширина на глубине h .

При $\Delta\beta > 1,6$ имеем неупорядоченное дислокационное образование в виде леса; при $\Delta\beta < 1,6$ дислокационное состояние будет упорядоченным в виде так называемых стенок.

Результаты показывают, что в исходном состоянии возможно существование дислокационного состояния в виде леса (рис. 2.11 а). Процесс трения оказывает существенное влияние на дислокационное состояние, приводя его к дислокационным стенкам (рис. 2.11 б).

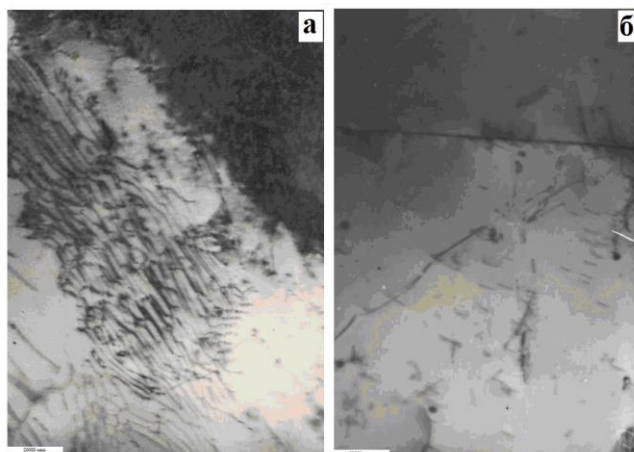


Рисунок 2.11. – Состояния дислокационных построений:
а – дислокационный лес; б – дислокационная стенка

Состояния в виде “хаотического леса” ускоряют диффузию атомов внедрения к дислокациям леса. Повышение плотности дислокаций в дислокационных стенках проявляется, прежде всего, в увеличении ширины и степени “дефектности” стенок, а также в некотором возрастании во внутри ячеистой сетке дислокаций.

Стенки обладают невысокой диффузионной проницаемостью и не способны активизировать процессы диффузии в результате трения.

2.4.3 Исследование фазового состава исходных структур в поверхностном слое

Результаты металлографических исследований базовой никотрированной стали 25Х3М3НБЦА для оптимального режима никотрирования представлены на рис. 2.12. «Белый» слой на поверхности образца имеет толщину ~10-15 мкм и содержит ϵ -фазу $\text{Fe}_3(\text{N,C})_{1+x}$. Диффузионный подслой, толщина которого составляет ~200-250 мкм, имеет характерную для сорбита (двухфазная смесь феррита и цементита) структуру [90].

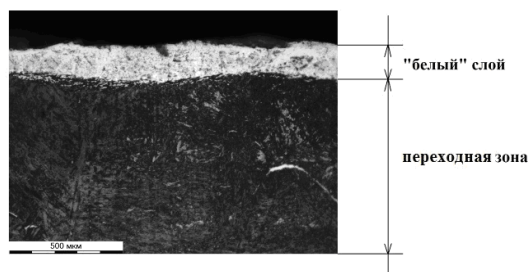


Рисунок 2.12. – Микроструктура никотрированной стали 25Х3М3НБЦА

Результаты рентгеноструктурного анализа поверхностных слоев никотрированной стали 25Х3М3НБЦА свидетельствуют о том, что в поверхностных слоях стали находятся следующие основные фазы: θ -фаза, состоящая из карбидов железа и хрома, ϵ -фаза, представляющая собой карбонитриды $\text{Fe}_3(\text{N,C})_{1+x}$, γ' -фаза, содержащая нитриды железа $\text{Fe}_4\text{N}_{1-z}$ и твердый раствор азота и углерода в α -Fe.

В процессе насыщения фазовая нитридная кривая имеет тенденцию к подъему в область большего их содержания (рис. 2.13 а). Карбидная фазовая характеристика (рис. 2.13 в) наоборот, отражает закономерность уменьшения карбидной фазы по мере нитрирования. Характер карбонитридной фазовой кривой (рис. 2.13 б) также изменяется в сторону возрастания объемов карбидной фазы.

Помимо основных фаз в поверхностной зоне зафиксированы фазы карбидов легирующих элементов Mo_2C и Cr_7C_3 и примесей FeS_2 , FeSi и Fe_2P .

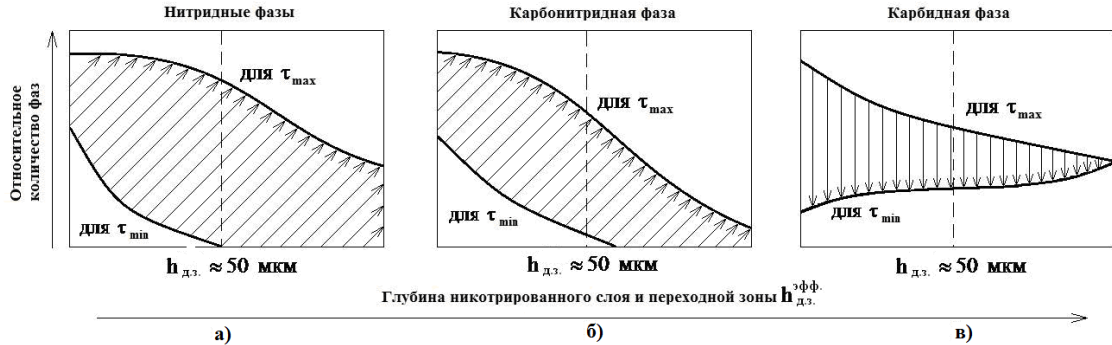


Рисунок 2.13. – Кинетическая схема формирования основных фаз в нитрированном слое и переходной зоне конструкционной стали 25Х3М3НБЦА:

а – нитридные фазы; б – карбонитридная фаза; в – карбидная фаза

2.5 Исследование процессов структурно-фазовых превращений в результате фрикционного нагрева

2.5.1 Установка для измерения параметров процесса трения

Основные характеристики установки для измерения параметров процесса трения приведены в монографии [10]. «Реализация температурных измерений представляет собой сложную инженерную задачу, что обусловлено рядом причин: малыми размерами площадок, на которых протекают тепловые процессы, неравномерностью распределения температур по глубине и вдоль поверхности контактирующих тел, кратким периодом существования теплового контакта, случайным во времени и в пространстве характером появления тепловых источников. По существу встает вопрос о том, какие температуры подлежат измерению: температуры на микроконтактах шероховатых поверхностей – так называемые температуры вспышки $T_{всп}$, поверхностные температуры $T_{нов}$ или температуры в приповерхностных областях – объемные температуры $T_{об}$.

Методы измерения температурных полей в зоне трения и соответствующего аппаратного обеспечения можно разделить на две группы: косвенные и прямые методы измерения.

Косвенные методы измерения (метод цветных термоиндикаторов, методы тепловых вставок, метод термоэлектронной эмиссии, метод оценки температуры по структурным изменениям в микрообъемах поверхностного слоя) имеют один общий недостаток – низкую точность измерения.

Из методов прямого измерения температур до недавнего времени широко использовался метод термпар (естественных, искусственных, скользящих). Из них наиболее точным представляется метод искусственных термпар, хотя он и не позволяет точно измерить $T_{всп}$.

В последние годы были разработаны более точные методы измерения: пирометрический метод, основанный на фиксации излучения в области теплового контакта и метод с использованием приемников инфракрасного излучения – тепловизоров. Однако среди перечисленных методов нет ни одного, который удовлетворял бы всем требованиям, предъявляемым к измерительной аппаратуре, так как некоторые из этих требований противоречивы и их трудно удовлетворить, применяя один универсальный измерительный метод. Поэтому перспективным представляется направление, связанное, с одной стороны, с созданием комбинированных измерительных систем, а с другой – с привлечением и расчетных методов.

С учетом необходимости измерения нестационарных температур по глубине приповерхностного слоя был выбран метод искусственной термопары, позволяющий измерять объемные температуры $T_{об}$ вблизи от поверхности трения. Что же касается поверхностных температур $T_{пов}$, то до настоящего времени нет четкого определения $T_{пов}$, очевидно, что данная температура распределяется в микрообъемах поверхности трения в пределах некоторого линейного размера v .

Учитывая неточности прямого измерения температур вспышки $T_{всп}$, в качестве основного метода для их измерения был выбран расчетный. Полученные при этом результаты сопоставлялись с результатами, полученными косвенными методами – коэффициентами трения и методом акустической эмиссии по специально разработанным для этих целей методикам.

Схема аппаратного обеспечения измерений представлена на рис. 2.14.

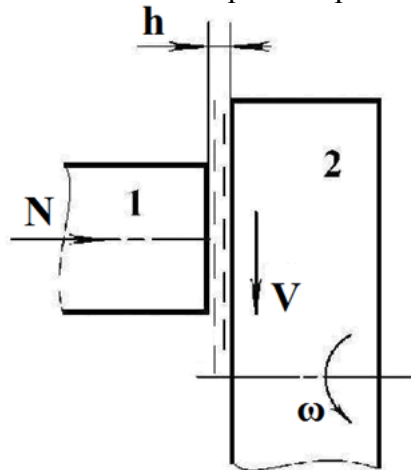


Рисунок 2.14. – Конструктивная схема системы «штифт (1)-диск (2)»

Датчик акустических сигналов – акселерометр (4) и датчик температуры (3) установлены на штифте (1). При этом хромель-алюмелевая термопара датчика температур, имеющая диаметр проволочек 0,15 мм, устанавливалась в специально просверленном отверстии на расстоянии 0,5 мм от поверхности трения и зачеканивалась. В качестве аппаратного обеспечения использовалась специализированная система унифицированных блоков фирмы “Briel el Kjaer” (“Брюль и Кьер”, Дания), обладающая высокой точностью измерений и надежностью.

Измерение температур осуществлялось следующим образом. От датчика (3) информация поступала на двухканальный усилитель-формирователь сигнала (5), где осуществлялось ее усиление и преобразование в прямоугольные импульсы. Полученные сигналы записывались на измерительном магнитофоне (6) модели А2-214. Параллельно с этим производился визуальный контроль информации с помощью осциллографа (8) модели 4048. В дальнейшем информация о температурах, записанная на магнитную ленту, поступала на анализатор (7), распечатывалась на графопостроителе (9) модели 2319» [10].

Основные методы исследований, использованные в диссертационной работе, приведены в [91]. «Рентгеноструктурный анализ выполнен на дифрактометре «ДРОН-6»

(Cu-K α излучение). Съемка дифрактограмм проводилась с фокусировкой по методу Брэгга-Брентано. Обработка рентгеновских дифрактограмм проводилась методом полнопрофильного анализа [92, 93].

Металлографические исследования выполняли на микроскопе Neophot-21. Для выявления структуры шлифы травили в 4%-ном растворе азотной кислоты в этиловом спирте.

Исследование элементного состава образцов проводили на растровом электронном микроскопе (РЭМ) Philips SEM-515 с системой рентгеновского микроанализа EDAX Genesis-2000 XMS. Глубина анализа составляла ~1-2 мкм» [91].

«Сверхтонкие поверхностные слои образцов исследовались методом рентгеноэлектронной (РФЭС) спектроскопии на электронном спектрометре SPECS с использованием возбуждающего рентгеновского излучения магниевого анода (MgK α , $h\nu=1253,6$ эВ). Послойный анализ проведен с использованием травления поверхностных слоев ионами аргона. Локальность анализа по глубине 3-5 нм.

Химический элементный анализ образцов проведен на вакуумном многоканальном эмиссионном спектрометре ДФС-51. Содержание углерода определяли на экспресс-анализаторе АН-7529» [91].

2.5.2 Анализ поро-и трещинообразования в процессе трения

Результаты металлографического анализа процесса поробразования представлены на рисунке 2.15. В зоне, прилегающей к поверхности трения, отчетливо видны поры различной формы и размеров. Глубже от данной зоны происходит резкое уменьшение количества пор.

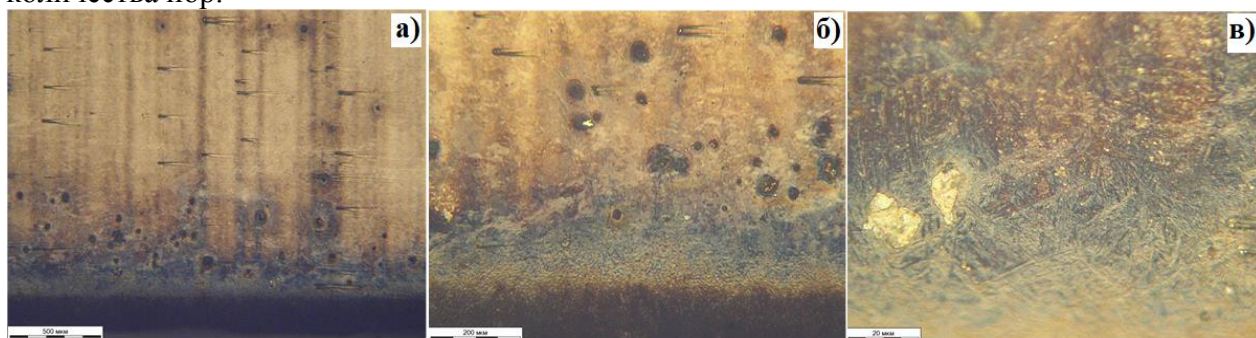


Рисунок. 2.15. – Микроструктура поверхностных слоев никотрированной стали 25X3M3NBЦА в разных масштабах: а – 500 мкм; б – 200 мкм; в – 20 мкм

Результаты металлографического анализа стали 25X3M3NBЦА показали, что на поверхности присутствуют единичные протяженные мелкие трещины. Наличие их зафиксировано вблизи края образца (рис.2.6 а). На поверхности другого образца имеется большое количество протяженных трещин (рис.2.6 б) с выявлением механизма зарождения поверхностных трещин и их роста.

Важно отметить, что процессы поро- и трещинообразования зафиксированы на начальной стадии трения, намного меньшей по времени выработки ресурса. Экспериментальные исследования позволили установить следующие механизмы процесса трещинообразования (рис. 2.16).

Схема механизма трещинообразования в высоконапряженной области циклового нагружения

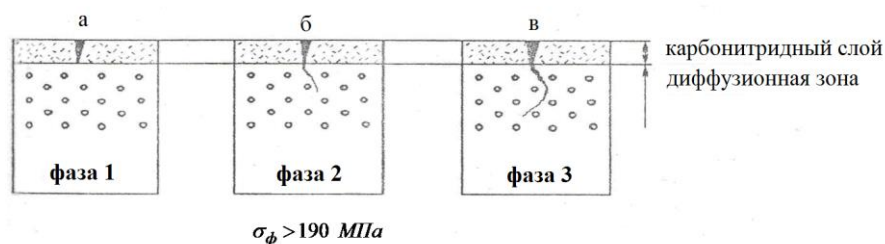


Схема механизма трещинообразования в малонапряженной области циклового нагружения

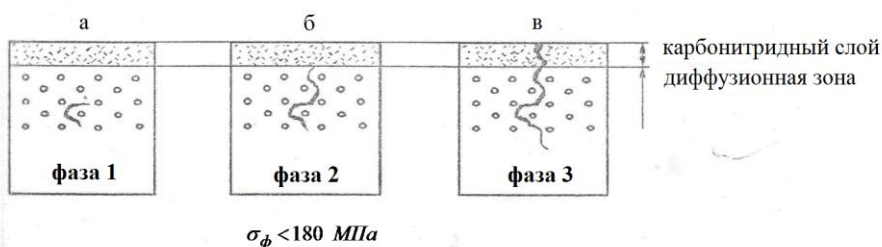


Рисунок 2.16. – Топография зарождения усталостных трещин в нитрированном покрытии при докритических (а и б) и закритических (в) амплитудах цикла нагружений

В малонапряженной области ($\sigma_{\text{вн}} < 180 \text{ МПа}$) зародыши трещин формируются ниже карбонитридной зоны. В слабогетерогенных структурах формирование трещин происходит непосредственно в диффузионной зоне, в сильногетерогенных – у крупных карбонитридов. При увеличении количества циклов нагружения трещина “пробивает” карбонитридный слой с образованием магистральной трещины (внутренний механизм).

В высоконапряженной области циклического нагружения ($\sigma_{\text{вн}} > 190 \text{ МПа}$) трещина “пробивает” с поверхности карбонитридный слой и развивается далее вглубь диффузионной зоны (внешний механизм).

Образование магистральной трещины происходит по границам фазы $\alpha\text{-Fe}$. Магистральные трещины, естественно, являются фактором, лимитирующим долговечность диффузионной зоны.

Второй механизм распространения трещин (внешний механизм повреждаемости) наиболее реален в деталях стрелково-пушечного вооружения, так как соответствует динамике воздействия на поверхности трения (рис. 2.17 а-г).

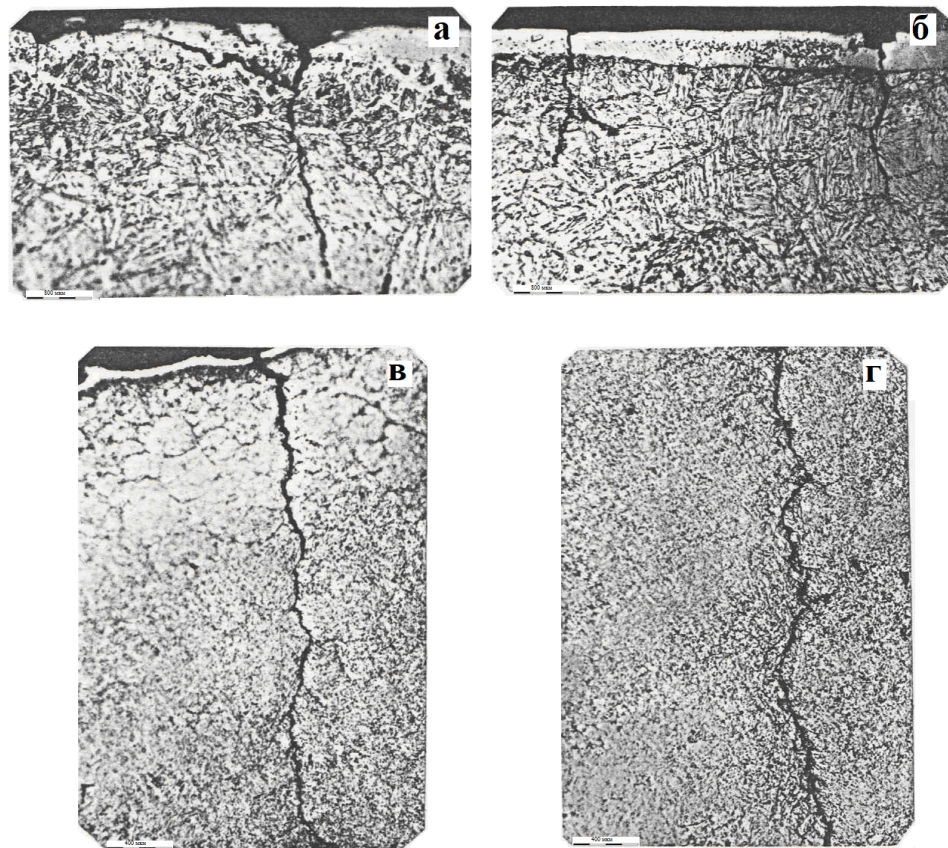


Рисунок 2.17. – Топография распространения усталостной трещины (а-г) в диффузионных зонах нитрированных сталей при внешнем механизме повреждаемости

2.5.3 Исследование фазового состава вторичных структур

Из анализа данных растровой электронной микроскопии, представленных на рисунке 2.18, видно, что на поверхности зафиксированы О и С. Как следует из рисунка 2.19, распределение легирующих элементов (Cr, Mn, Mo, Ni, Nb, Zr) имеют максимальную концентрацию на поверхности, которая уменьшается по глубине поверхностной зоны. Отсутствие фосфора Р можно объяснить недостаточной точностью аппаратуры. Точечный химический анализ поверхностных слоев нитрированной стали выявил наличие Р во всех температурных зонах (рис. 2.20 а-в). Анализ РФЭС-спектров поверхностных слоев (рис. 2.21 и рис. 2.22) позволяет сделать следующие выводы. Железо окислено незначительно. Его спектр распределен на глубине 10 и 15 нм. Молибден минимально окислен, но возможно взаимодействует еще и с углеродом или азотом. Хром окислен до 3+. Спектр размыт в сторону низких энергий связи, где при разложении возможно выделить компоненту вблизи 574 эВ. то есть одновременно есть признаки взаимодействия с углеродом и/или азотом ($E_{св} = 574,2$ эВ). На спектрах углерода, концентрация которого мала, есть слабые пики в области 284 эВ, что может быть связано с его взаимодействием с хромом, молибденом и/или железом.

Несмотря на обнаружение методом РФЭС Cr, детальный качественный анализ дифрактограммы образца не выявил наличие фазы Cr_2N . Карбиды на поверхности отсутствуют.

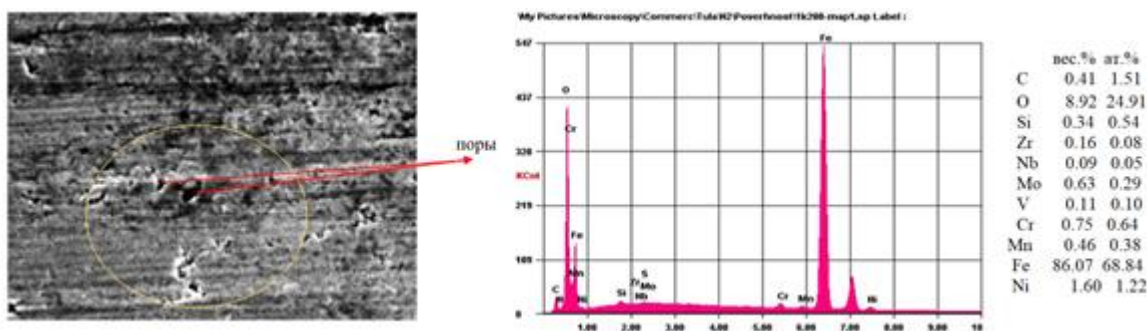


Рисунок 2.18. – Общий вид поверхности образца и спектр характеристического излучения

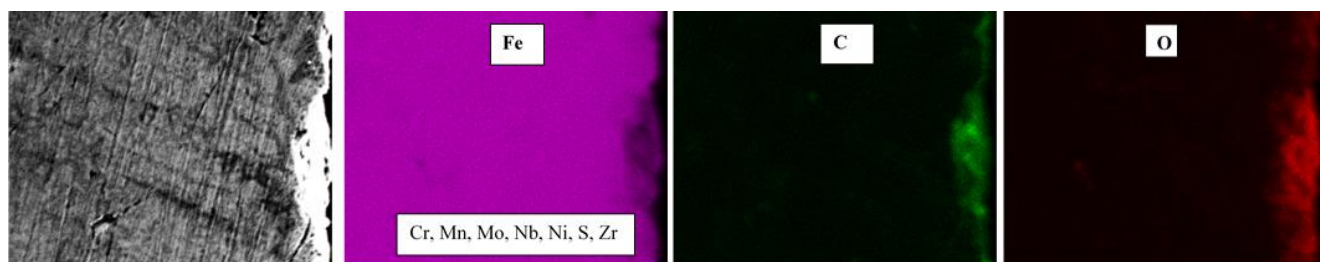


Рисунок 2.19. – Общий вид и распределение элементов. Торцев, край вблизи поверхности

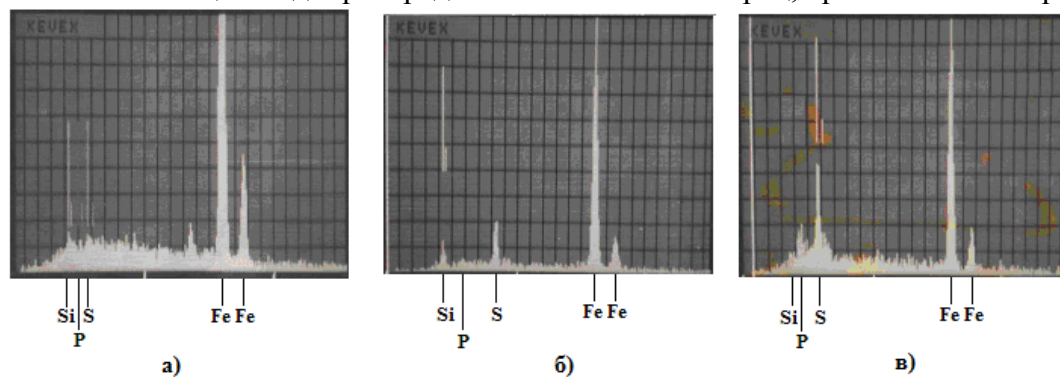


Рисунок 2.20. – Точечный химический анализ поверхностных слоев никотрированной стали 25Х3МЗНБЦА: а – низкотемпературная зона; б – среднетемпературная зона; в – высокотемпературная зона

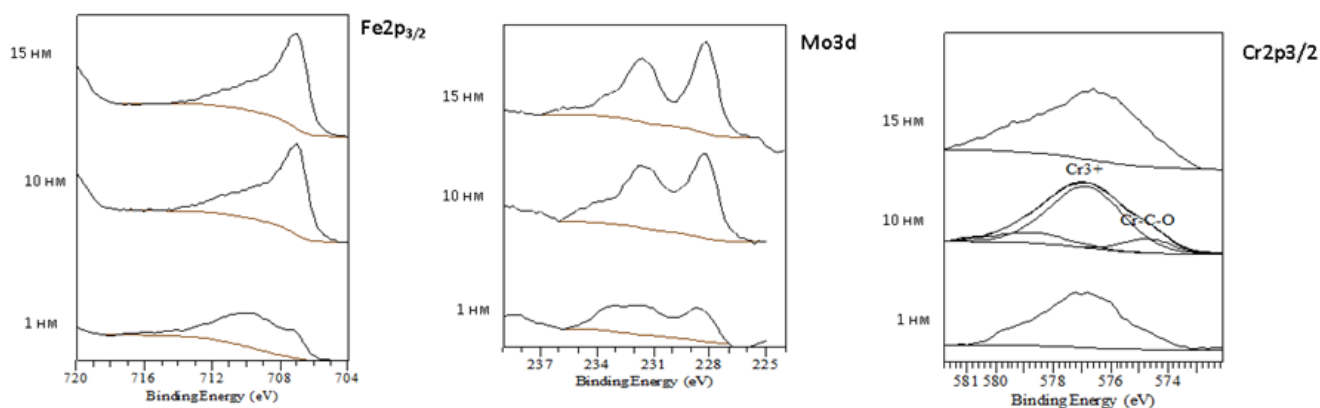


Рисунок. 2.21. – Рентгеноэлектронные спектры Fe2p_{3/2}, Mo3d и Cr2p_{3/2} поверхностных слоев после ионного травления (снизу-вверх:) 1, 10 и 15 мин

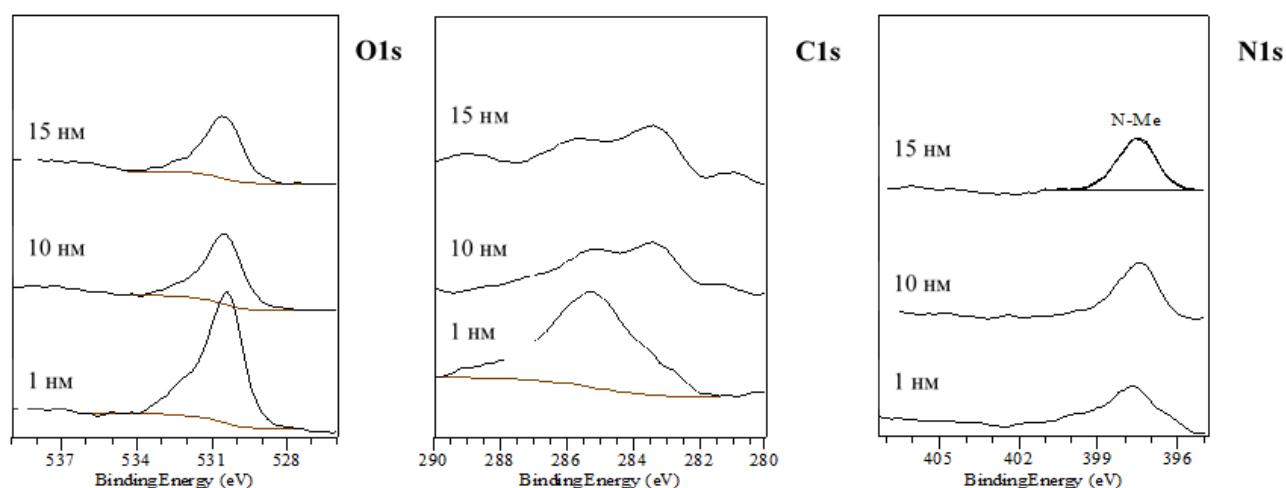


Рисунок. 2.22. – Рентгеноэлектронные спектры O1s, C1s и N1s поверхностных слоев после ионного травления (снизу вверх:) 1, 10 и 15 мин

Дифрактограмма, полученная с образца после трения, показывает, что в фазовом составе преобладают оксиды Fe_2O_3 и Fe_3O_4 (рис. 2.23). Для более детального представления о фазовом составе вторичных структур были сняты рентгенограммы с поверхности образцов никотрированной стали 25Х3МЗНБЦА, испытанных на машине трения в течение времени $\tau_{\text{изм}}$, соответствующим условиям трения семи исследуемых режимов (табл. 2.7).

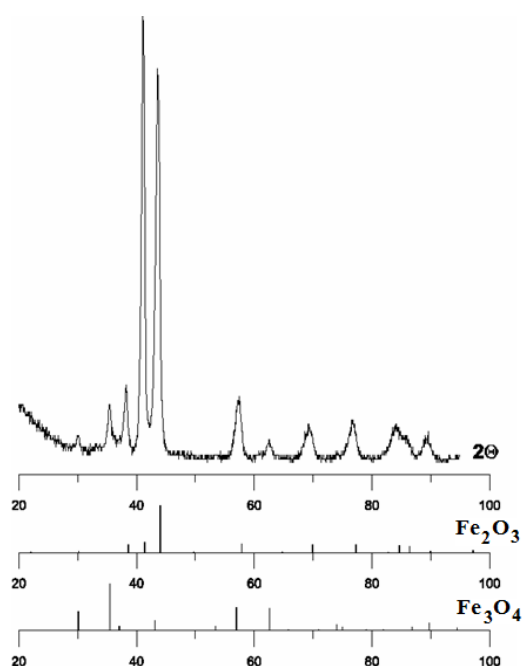


Рисунок 2.23. – Дифрактограмма, полученная с образца

Таблица 2.7 – Кинетические времена и температурные характеристики процесса образования вторичных структур

$T_{\text{изм}}, \text{K}$	410	510	550	640	680	780	800	840	870
$\tau_{\text{изм}}, \text{с}$	1200	650	320	100	65	35	24	20	16

При дальнейшем анализе фазового состава были зарегистрированы рентгеновские пики следующих обнаруженных фаз: твердого раствора на основе $\alpha\text{-Fe}$, нитридной ϵ -фазы, низкоазотистой γ -фазы, оксидной фазы типа магнетит Fe_3O_4 , оксидной фазы типа гематит Fe_2O_3 , фазы силицида молибдена $\text{MoSi}_{0,65}$, фазы сульфида железа FeS_2 , фазы силицида железа FeSi . Значения интенсивностей рентгеновских пиков фаз в зависимости от

температуры трения представлены в таблице 2.8. Кроме того, для некоторых режимов триботехнического эксперимента были обнаружены такие динамические фазы: сульфида молибдена MoS_2 , а также фосфида железа Fe_2P .

На рисунке 2.24 на базе данных таблицы 2.7 представлены распределения исходных ($\alpha\text{-Fe}$; $\gamma\text{-Fe}$; $\varepsilon\text{-Fe}$) и триботехнических (Fe_3O_4 ; Fe_2O_3 ; $\text{MoSi}_{0,65}$; FeS_2 ; MoS_2 , а также FeSi и Fe_2P) фаз в связи с изменением определенной температуры точек контроля фазового состава $T_{\text{изм}}$. В первом приближении по полученным кривым возможно сделать следующие заключения.

Таблица 2.8 – Значения интенсивностей рентгеновских пиков I_p для исходных и триботехнических фаз в трущейся никотрированной стали 25Х3М3НБЦА в зависимости от температуры

Тип фазовой составляющей в структуре поверхностного слоя	Исходное состояние	Температурные зоны измерений									
		низкотемпературная					среднетемпературная			высокотемпературная	
		$\bar{T}$, °C									
		140	210	250	340	380	420	480	540	570	600
α -Fe	140	-	80	-	-	-	50	-	-	50	-
ε -Fe	50	50	-	60	-	-	90	-	-	60	-
γ -Fe	40	-	36	32	-	-	-	30	12	Следы	Следы
Fe ₃ O ₄	-	-	15	33	-	18	-	10	10	-	-
Fe ₂ O ₃	-	Следы	Следы	-	-	-	15	-	30	-	16
MoSi _{0,65}	-	8	15	-	-	-	22	46	51	15	15
FeS ₂	-	14	35	18	-	-	-	18	24	-	12
FeSi	-	-	-	9	-	23	-	-	6	Следы	Следы
MoS ₂	-	Следы	Следы	8	15	2	7	-	Следы	Следы	Следы
Fe ₂ P	-	-	-	-	7	-	10	-	10	-	10

1. По исходным фазам.

1.1. Содержание α -фазы в триботехническом слое непрерывно уменьшается и особенно активно в начальной зоне 1 формирования трибослоя при температурах $T_{\text{изм}} \sim 540$ К (рис. 2.24 а). Это изменение по фазе составляет до четырех раз.

1.2. Содержание $\gamma\text{-Fe}$ -фазы, оставаясь постоянным в низкотемпературной зоне, значительно увеличивается в среднетемпературной зоне, а в высокотемпературной зоне имеет место тенденция к понижению ее содержания. Малоазотистая $\varepsilon\text{-Fe}$ -фаза, плавно уменьшаясь, исчезает совершенно (рис. 2.24 б).

2. По триботехническим фазам.

Следует заметить, что нет ни одной из выявленных триботехнических фаз, содержание которых бы закономерно возрастало.

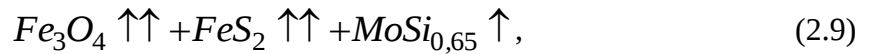
2.1. В первой низкотемпературной зоне формирования трибослоя ($T < 510$ К) появляются следующие три новые динамические фазы:

- оксидная Fe_3O_4 (магнетит) (рис. 2.24 в), содержание которой достигает индекса интенсивности рентгеновской линии – $30I_p$;

- сульфидная фаза FeS_2 (сульфид железа) (рис. 2.24 д), содержание которой весьма резко изменяется до $\sim 25I_p$ именно в самом начале первой зоны;

- силицидная фаза $\text{MoSi}_{0,65}$ (силицид молибдена) (рис. 2.24 г) формируется только в небольшом количестве и составляет $\sim 15I_p$ -единиц.

Таким образом, в первой низкотемпературной зоне ($T < 510$ К) формируются следующие триботехнические фазы:



где введены следующие символы: ($\uparrow\uparrow$) – возрастает до максимально возможного значения; ($\uparrow$) – возрастает до некоторого промежуточного значения.

2.2. Во второй среднетемпературной зоне ($T < 770$ К) формирования трибослоя (570 К $< T < 720$ К) формируется наибольшее число триботехнических фаз – четыре:

- оксидная фаза Fe_2O_3 (гематит), содержание которой достигает максимального значения ~ 30 I_p -единиц. При этом синхронно снижается количество магнетита Fe_3O_4 (рис. 2.24 в);
- силицидная фаза $MoSi_{0,65}$, содержание которой достигает максимального значения ~ 50 I_p -единиц;
- повторно формируется и достигает максимального значения по интенсивности ~ 50 I_p -единиц сульфидная FeS_2 -фаза;
- фосфидная фаза Fe_2P , которая, достигнув некоторой своей концентрации ~ 10 I_p -единиц, сохраняется и в третьей зоне формирования трибослоя (рис. 2.24 д).

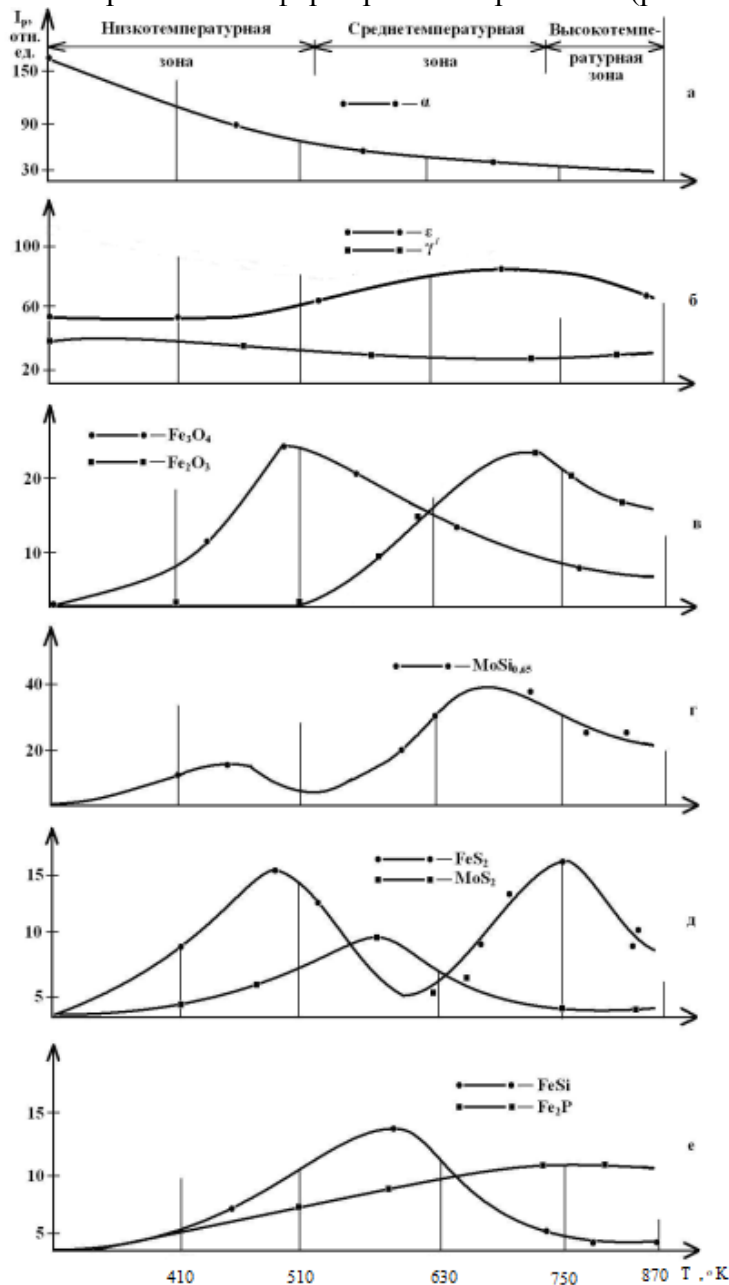


Рисунок 2.24. – Характер изменения значений интенсивности рентгеновских пиков I_p для фаз триботехнического слоя никотрированной стали 25Х3МЗНБЦА в зависимости от температуры T

Таким образом, во второй среднетемпературной зоне формируются следующие триботехнические фазы:

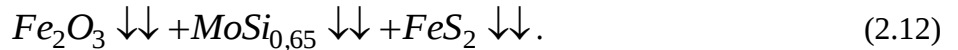


Кроме того, необходимо отметить также следующее дополнительное структурное явление, присущее данной температурной стадии: уменьшение содержания следующих, сформировавшихся в конце первой низкотемпературной зоны, фаз:



где символ ($\downarrow\downarrow$) означает, что данная фаза нивелируется до минимального значения.

2.3. В третьей высокотемпературной зоне формирования трибослоя ($T > 720$ К) сохраняется на предельном уровне ($\sim 10Ip$ -единиц) содержание фосфидной фазы Fe_2P . Данная стадия, как предвестник предстоящих процессов схватывания, характеризует тем, что содержание основных триботехнических фаз начинает уменьшаться. Структурное содержание данной зоны определяется следующим комплексом



Завершая разговор о структурных превращениях в каждой из трех рассмотренных температурных зон, отметим следующие моменты. Повышение содержания ε -фазы в среднетемпературной зоне вызвано полиморфными превращениями α -Fe $\rightarrow$ ε -Fe под действием термического удара (рис. 2.25).

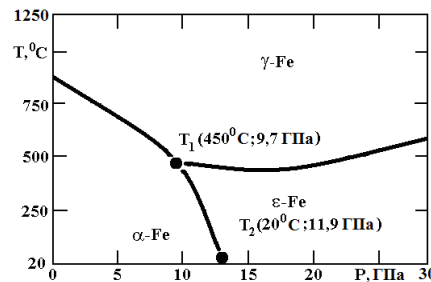


Рисунок 2.25. – Фрагмент диаграммы “ T - P ” для стали [94]

Проанализируем механизмы формирования вторичных структур. Первый механизм связан с формированием оксидных и, отчасти, сульфидных (FeS_2) фаз. Это формирование происходит на базе химических ингредиентов, находящихся в окружающей среде (O) и смазке (S). Формирование силицидных, фосфидных и отчасти сульфидных фаз происходит на основе химических элементов, находящихся в матрице диффузионной зоны (соответственно Si, P и S) стали 25Х3МЗНБЦА. Донорами для металлической основы этих фаз являются α -Fe, γ -Fe и ε -Fe. Помимо этого, донором также является и α -Mo, входящий в состав фазы Mo_2C .

Механизм формирования оксидных и, отчасти, сульфидных фаз основан на реакционной диффузии – диффузионном взаимодействии на поверхности твердого тела, сопровождающимся образованием новых фаз [95]. Зародыши оксидных фаз, образуя при разрастании сплошную пленку, возникают, если изменение свободной энергии реакции для системы Fe- O_2 отрицательно. Ионы кислорода, появляющиеся на внешней части пленки согласно реакции $O + 2e \rightarrow O^{2-}$ диффундируют к внутренней поверхности раздела фаз. Источником электронов служит внутренняя поверхность пленки, где атомы железа, переходя в оксидную фазу, генерируют электроны $Fe \rightarrow Fe^{n+} + ne$. В свою очередь атомы серы, находящиеся в смазке, превращаются в ионы благодаря реакции $S + e \rightarrow S^{1-}$. Атомы железа, переходя в ионы и образуя сульфидную фазу, генерируют электроны $Fe \rightarrow Fe^{2+} + 2e$.

Второй механизм образования вторичных структур связан с диффузионными процессами, происходящими в поверхностной зоне и направленными к поверхности трения. Подобная диффузия является восходящей и причины ее появления будут объяснены далее. Донором для вторичных структур на основе молибдена является фаза Mo_2C , находящаяся в поверхностной диффузионной зоне. Под действием восходящей

диффузии фаза распадается $\text{Mo}_2\text{C} \rightarrow \text{Mo}^{2+} + 2\text{C}^{1-}$ и ионы диффундируют к поверхности трения порознь, имея различные коэффициенты диффузии. По аналогичному механизму диффундируют фазы Fe_2P , FeSi и FeS_2 .

2.6 Экспериментальные и аналитические исследования температурных процессов в поверхностной зоне

Исторически сложилось так, что температуры, относящиеся к поверхности трения $T_{\text{пов}}$ и объемные $T_{\text{об}}$, рассматриваются отдельно от температуры на микроконтактах $T_{\text{всп}}$ (температуры вспышки), а также температуры на субшероховатостях $T_{\text{суб}}$. Между тем, очевидно, что имеет место следующая зависимость, предполагающая трансформацию температур [96, 97]

$$T_{\text{max}} = T_{\text{см}} \rightarrow T_{\text{суб}} \rightarrow T_{\text{всп}} \rightarrow T_{\text{пов}} \rightarrow T_{\text{об}}, \quad (2.13)$$

где $T_{\text{см}}$, $T_{\text{суб}}$, $T_{\text{всп}}$, $T_{\text{пов}}$, $T_{\text{об}}$ – соответственно температуры смазки, на суб- и микрошероховатости, поверхности и в объеме.

Приведенная зависимость предполагает проводить определение всех температур с единых методологических позиций. Обычно температурам $T_{\text{суб}}$ и $T_{\text{всп}}$ не уделяется должного внимания. Между тем, как показали наши исследования, именно эти температуры в условиях общего нестационарного температурного процесса способствуют возникновению температурных эффектов, имеющих важное значение для анализа структурно-фазовых превращений в поверхностной зоне. В результате возникают отличные от общепринятых условия повреждаемости данной зоны.

Графики расчетных и экспериментальных температур представлены на рис. 2.26.

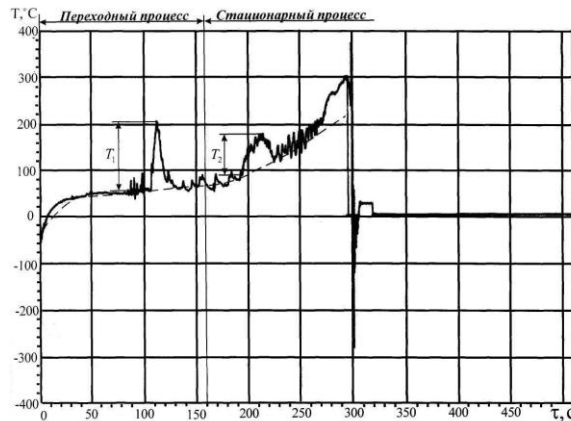


Рисунок 2.26. – Графики расчетных и экспериментальных объемных температур $T_{\text{об}}$ на неподвижной стенке при величине зазора $h: h=6 \cdot 10^{-5}$ м, $V_{\text{ск}}=5$ м/с;
 — экспериментальная зависимость, ---- — расчетная зависимость

2.6.1 Исследование температур на субшероховатых поверхностях $T_{\text{суб}}$

Определение температур на субшероховатых поверхностях вызвано необходимостью установления механизма диффузии в поверхностной зоне трения, вызывающей изменения в исходном структурно-фазовом составе. Как показали исследования, данные изменения приводят к образованию в поверхностной зоне

вторичных структур. В свою очередь вторичные структуры, в конечном счете, и определяют трибологическую работоспособность узлов трения.

Проблема заключается в том, что данный механизм диффузии определяется как результат воздействия тепловых (термоциклирование) и упругих колебаний материала на наноуровне, то есть на уровне субшероховатости.

2.6.2 Постановка тепловой задачи трения

При постановке тепловой задачи трения используются методы теории теплопроводности и теплопередачи, в которые включаются способы задания источника тепла при трении. Для гладких поверхностей при постановке тепловой задачи необходимо первоначально определить поля собственных температур смазки. Согласно Г. Греберу для этого необходимо использовать диссипативную функцию уравнения энергии Навье-Стокса

$$\lambda \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} = -\eta \left(\frac{dV}{dz} \right)^2, \quad (2.14)$$

где λ , η , V – соответственно коэффициенты теплопроводности, динамической вязкости и скорости смазки в зазоре h .

Решение дифференциального уравнения имеет вид:

$$T(0, z) = \frac{1}{2} \frac{\eta}{\lambda} \left(V \frac{z}{h} \right)^2. \quad (2.15)$$

На неподвижной детали ($z=0$) $T(0, z)=0$, на подвижной – ($z=h$) – максимальное значение. В результате возникающего перепада температур ($0, T_{max}$) возникает тепловой поток q с максимальным значением на неподвижной детали.

Для шероховатых поверхностей дифференциальные уравнения записываются следующим образом.

Смазочный материал

$$\frac{\partial T_1(x, z, \tau)}{\partial \tau} + W - T_{нач} = a_1 \nabla^2 T_1, \quad (2.16)$$

где W – плотность теплового потока; a_1 – коэффициент температуропроводности смазки; $\nabla^2 T_1$ – оператор Лапласа.

Твердое тело

$$\frac{\partial T_2(x, z, \tau)}{\partial x} - T_{нач} = a_2 \nabla^2 T - q, \quad (2.17)$$

где $T_{нач}$ – начальная температура; q – теплоотдача от микровыступа в окружающую среду.

Начальные условия

$$T_1(x, y, z, 0) = T_2(x, y, z, 0) = const. \quad (2.18)$$

Граничные условия

$$\begin{aligned} \frac{\partial T(x, z, \tau)}{\partial z} &= H_1 [T(x, z, \tau) - T_{нач}] - \text{подвод тепла;} \\ \frac{\partial T(x, z, \tau)}{\partial z} &= H_2 [T(x, z, \tau) - T_{нач}] - \text{отвод тепла,} \end{aligned} \quad (2.19)$$

где H_i – критерий Нуссельта.

Для решения поставленной задачи необходимо определить длины контактов на субшероховатостях. Для этих целей используется профилограмма субшероховатой поверхности, полученная с помощью атомно-силового микроскопа (АСМ) (рис. 2.27).

Параметры субшероховатости вычислялись с помощью комплекса программ НТ-МДТ (Roughness Analysis). На полученной профилограмме в зависимости от приложенного контактного давления σ_k для стандартного 7 класса шероховатости получили среднеарифметическое отклонение профиля $=36,82$ нм, среднее значение длин контактов $=98,46$ нм, средний шаг субшероховатостей $=358,12$ нм.

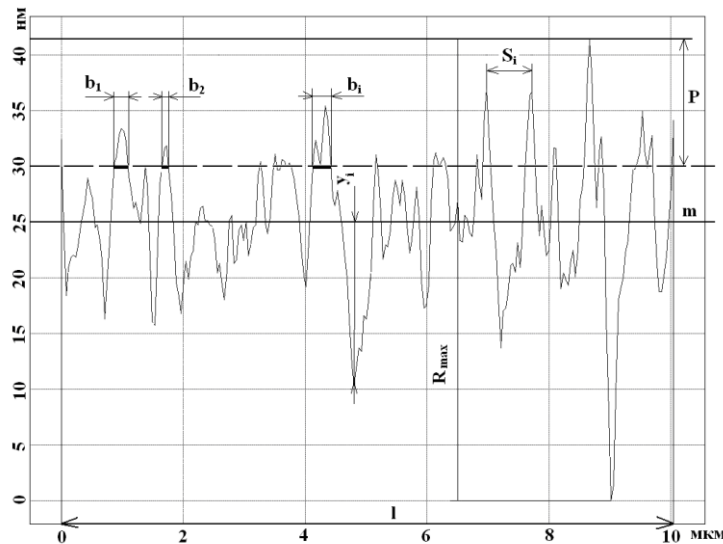


Рисунок 2.27. – Профилограмма субшероховатой поверхности, полученная с помощью атомно-силового микроскопа

Для получения спектральной модели субшероховатости полученный ряд случайных значений b подвергался вейвлет-преобразованиям. Отметим, что вейвлет – это функция коротких волн (всплесков). При этом использовалась программа Matlab. Учитывая высокочастотный характер температур на субшероховатостях, для дискретного вейвлет-преобразования (ДВП) в качестве материнского вейвлета использовали вейвлет Добеши, имеющий максимальную центральную частоту $F_0=0,7143$ Гц. Для непрерывного вейвлет-преобразования (НВП) применяли вейвлет Морле с центральной частотой $F_0=0,8125$ Гц. С практической точки зрения интерес представляет ДВП с максимальной частотой – с аппроксимирующими коэффициентами (рис. 2.28).

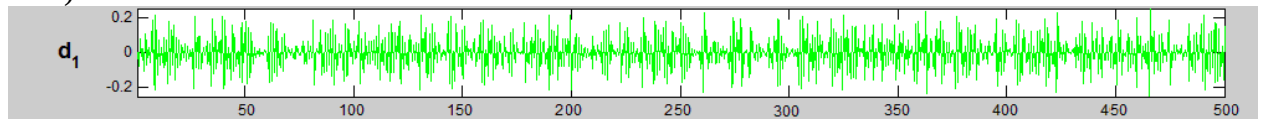


Рисунок 2.28. – График аппроксимирующего коэффициента ДВП

Графики детализирующих коэффициентов ДВП представляют собой кратное увеличение частоты аппроксимирующего коэффициента и будут использованы для анализа процессов, происходящих на гармониках.

Проверка полученных вейвлет-преобразований на наличие хаоса с помощью характеристики – размер фазового пространства n показала, что $n < 3$, то есть хаос отсутствует. Решение дифференциального уравнения (2.15) в 4^x -мерном пространстве (x, y, z, τ) в аналитической форме не представляется возможным. В связи с этим применяется один из численных методов решения, а именно метод конечных разностей (метод сеток). Численные решения приведены в приложении А. Шаг сетки по

координатным осям $dx=dy=dz=10^{-8}$ м. Для определения временного шага использовалась зависимость $d\tau = \frac{dx}{12a}$, где a - коэффициент теплопроводности.

Расчетная схема для моделирования представлена на рисунке 2.29. Единичная субшероховатость аппроксимировалась усеченным цилиндром диаметром b . Подвижная система координат (x,y,z) привязывалась к цилиндру на подвижной стенке, и неподвижная (x,y,z) - к цилиндру на неподвижной стенке. Так как контакт цилиндров является нецентральный, то вводилось смещения ε центров цилиндров. Результаты моделирования приведены на рисунке 2.29 б).

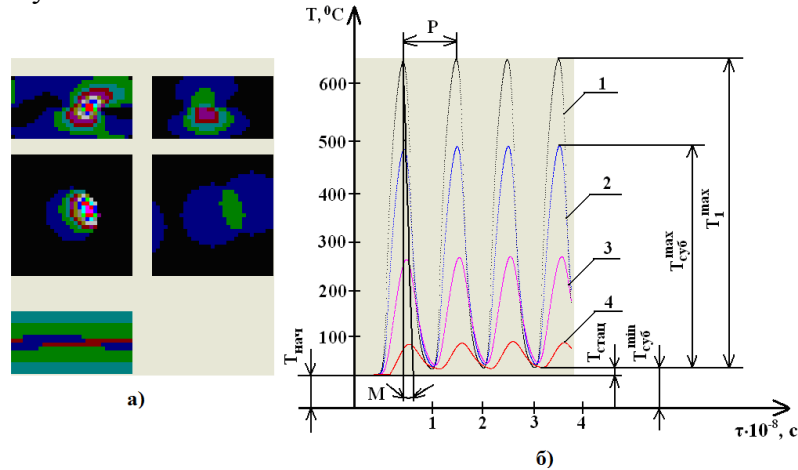


Рисунок 2.29. – Расчетная схема (а) и температурные поля в центре неподвижного контакта в зависимости от времени контактирования τ и глубины расположения z ($V_{mp}=10$ м/с) (б): 1 – изменение температуры смазки, 2 – изменение температуры на субшероховатостях $T_{суб}$, 3 – изменение температуры на глубине $z=10^{-6}$ м, 4 – изменение температуры на глубине $z=3 \cdot 10^{-6}$ м

Значения параметров процесса приведены в таблице 2.9, а распределение относительной температуры $T_{отн}$ по глубине стенки – на рисунке 2.30.

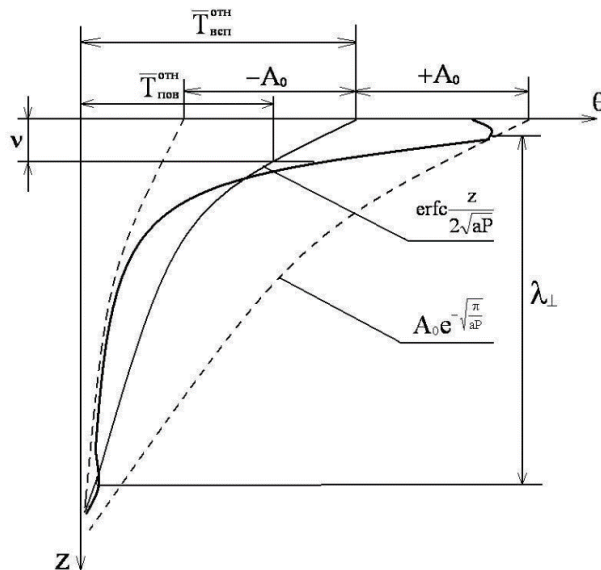


Рисунок 2.30. – Общая схема распределения относительной температуры на глубине стенки

Произведем оценку полученных расчетных параметров температурного процесса. Во-первых, отметим, что среднее значение температуры вспышки $\bar{T}_{всп}$, соответствующее температуре субшероховатости $T_{суб}$ на глубине $z=\nu$, в целом незначительно отличается от

температуры вспышки $T_{всп}$, определенной для исходной шероховатости ($P_i=1$). Следовательно, распространение температур в твердом теле происходит посредством трансформации температур $T_{суб} \rightarrow T_{всп} \rightarrow T_{нов} \rightarrow T_{об}$. Во-вторых, возникает возможность оценить на качественном уровне влияние субтемператур на кристаллическую решетку металла с точки зрения инициирования процесса ускорения диффузионных процессов.

Наиболее информативными в этом отношении являются параметры K_ω , ω , ψ и ΔU .

Таблица 2.9 – Значения параметров процесса термоциклирования ($h=10^{-6}$ м)

Параметр	Скорость трения V, м/с			Параметр	Скорость трения V, м/с		
	1	5	10		1	5	10
$T_1^{max}, ^\circ\text{C}$	39,4	311	616	ψ , рад	$0,124\pi$	$0,124\pi$	$0,124\pi$
$\bar{T}_1, ^\circ\text{C}$	34,5	272	540	A_0	0,69	0,51	0,46
$\bar{T}_{суб}, ^\circ\text{C}$	23,8	158	284	$U_{ }$, м/с	1	5	10
P , с	$3,6 \cdot 10^{-7}$	$0,72 \cdot 10^{-7}$	$3,6 \cdot 10^{-8}$	$U_{\perp}$, м/с	17,2	21	54
ω , МГц	17,4	87	174	$\Delta v = U_{ }/U_{\perp}$	0,06	0,24	0,19
M , рад	$0,07\pi$	$0,07\pi$	$0,1\pi$	K_ω	$6,6 \cdot 10^7$	$2,19 \cdot 10^9$	$1,57 \cdot 10^{10}$
$\lambda_{\perp}$, м	$3,26 \cdot 10^{-6}$	$1,46 \cdot 10^{-6}$	$1,03 \cdot 10^{-6}$	$T_{суб}^{(z=v)} = \bar{T}_{всп}$	21	144	274
ν , $\frac{\text{м}}{\text{нм}}$	$\frac{0,358 \cdot 10^{-6}}{358}$	$\frac{0,16 \cdot 10^{-6}}{160}$	$\frac{0,113 \cdot 10^{-6}}{113}$	$\bar{T}_{всп}^*$	19	140	280

Примечание: * приведена в работе [98]

Значение ν определяет распределение температуры на микрошероховатости $T_{всп}$.

Вышеприведенные расчеты касались единичных субшероховатостей при $b=const$. Для реальных контактов $b \neq const$. В программу моделирования вводилась последовательность b_i , взятая из профилограммы, полученной с помощью атомно-силового микроскопа.

В результате моделирования были получены графики изменения температур $T_{суб}(\tau)$, определяемые как процесс термоциклирования на субшероховатостях (рис. 2.31). График $T_{суб}(\tau)$ представляет собой случайную функцию, обладающую свойствами стационарности и эргодичности. С целью получения обобщающих характеристик подобного температурного процесса обычно используется спектральное преобразование Фурье [97]. Однако при Фурье-преобразовании используются длинные синусоидальные волны, не учитывающие тонкие особенности температурного процесса (резкие изменения амплитуд и частот колебаний, наличие разрывов, уступов и т.д.). Применение оконного преобразования Фурье увеличивает объем вычислений и зачастую не обеспечивает должной точности расчетов.

В последние годы в практику обработки сигналов вошли вейвлет-преобразования [99]. Отметим, что вейвлет-преобразования являются частотно-временными, то есть исследуют изменение частот по времени и не рассматривают изменение амплитуд сигнала. Для практического использования вейвлет-преобразований разработана компьютерная программа MATLAB [100, 101].

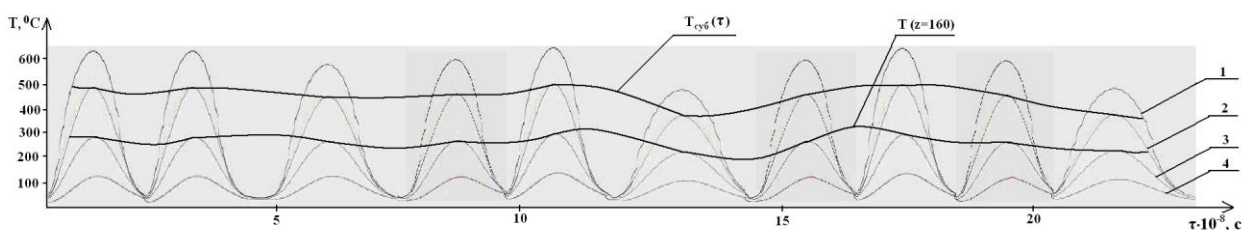


Рисунок 2.31. – Изменение температурных полей при трении субшероховатых поверхностей в зависимости от времени контактирования τ и глубины z расположения ($V_{mp}=5$ м/с): 1 и 2 – температуры смазки и субшероховатости; 3 и 4 – на глубине соответственно $z=160$ и 400 нм

Исследуемый сигнал был введен в систему MATLAB посредством графического интерфейса либо представлен в виде кусочно-линейной функции табличным способом. Для функции $T_{суб}(\tau)$, представленной на рисунке 2.32, был выбран табличный способ, при этом интервал дискретизации по времени составлял $\Delta\tau=1,5\cdot 10^{-10}$ с. В результате число отсчетов в табличном представлении $N=512$.

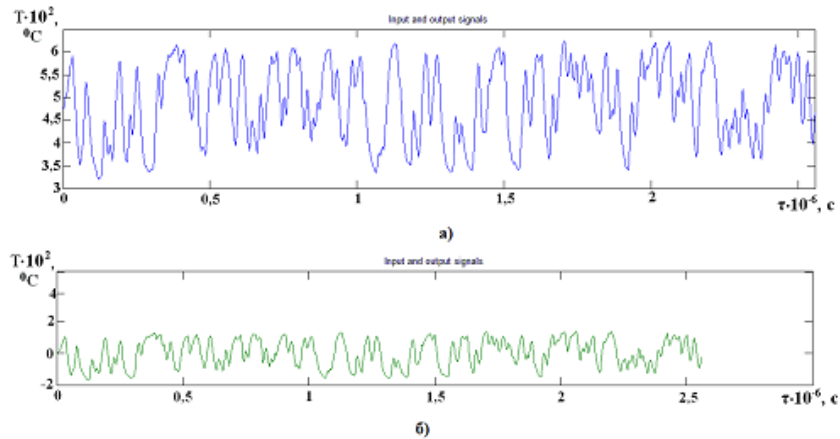


Рисунок 2.32. – Результаты представления исходной информации:
а – временная диаграмма температурного процесса; б – построение модели процесса

Центральная частота выбранного вейвлета на первом уровне разложения должна быть примерно равной частоте колебаний атомов в кристаллической решетке. Учитывая высокочастотный характер температурных колебаний для дискретного вейвлет-преобразования использовался вейвлет Добеши, который из всех вейвлетов, встроенных в MATLAB, имеет максимальную центральную частоту $Fr=0,7143$ Гц. Для непрерывного вейвлет-преобразования применялся вейвлет Морле с центральной частотой $Fr=0,8125$ Гц.

Результаты моделирования приведены на рис. 2.32 и рис. 2.33.

Сущность одномерного дискретного анализа заключается в нахождении аппроксимирующего a и детализирующих d_i разложений исходного сигнала. Аппроксимирующее разложение в наибольшей степени огрубляет исходный сигнал, но позволяет дать его общую оценку. Детализирующие разложения дают более точные оценки исходного сигнала на различных частотах. Определим данные частоты. Так как степень дискретизации сигнала $\Delta\tau=0,156\cdot 10^{-10}$ с, то общее число отсчетов за 1 с составляет $6,4\cdot 10^9$. Откуда центральная частота для первого разложения вейвлета Добеши d_1 составляет $Fr1=0,7143\cdot 6,4\cdot 10^9=4,57\cdot 10^9$ Гц (рис. 2.35). Для других разложений центральные частоты соответственно равны $Fr2=2,28\cdot 10^9$ Гц, $Fr3=1,14\cdot 10^9$ Гц, $Fr4=5,7\cdot 10^8$ Гц, $Fr5=2,85\cdot 10^8$ Гц. Диапазон частот $\omega=2,85\cdot 10^8 \dots 6,4\cdot 10^9$ Гц должен охватывать частоты температурных колебаний $T_{суб}$. Средние значения частот колебаний $T_{суб}$ приведены в работах [22, 23] и составляют для скорости трения $V_{mp}=1$ м/с – $\omega=0,17\cdot 10^8$ Гц, $V_{mp}=5$ м/с – $\omega=0,87\cdot 10^8$ Гц, $V_{mp}=10$ м/с – $\omega=1,74\cdot 10^8$ Гц.

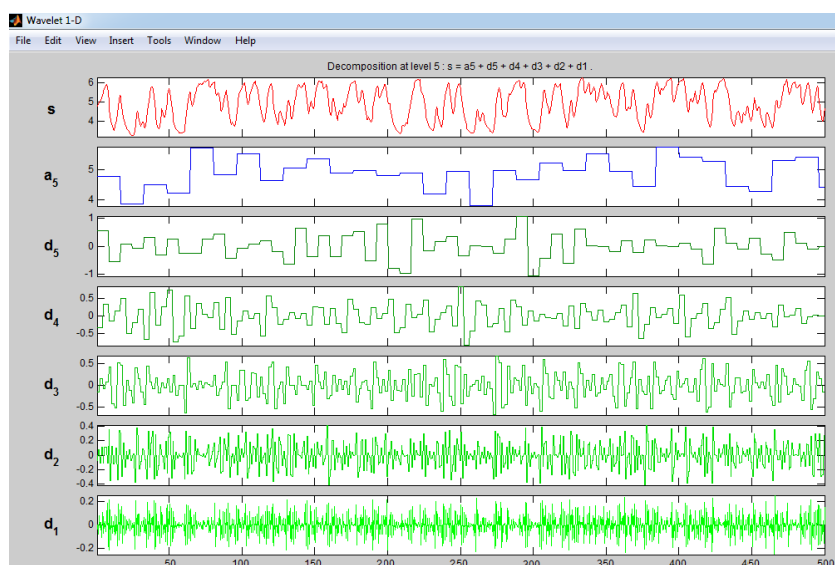


Рисунок 2.33. – Графики аппроксимирующего и детализирующих коэффициентов дискретного вейвлет-преобразования

Дискретное одномерное вейвлет-преобразование (рис. 2.34) вскрывает особенности звуковых тепловых колебаний, в том числе и хаотичности, возможной на высоких частотах (d_1 и d_2).

Структура сигнала на больших частотах дробна (фрактальна) и для ее исследования необходимо использовать методы стохастического анализа.

По определению фрактал – это множество с нецелой размерностью. Присутствие неустойчивости создает возможность соединить, казалось бы, несоединимые понятия – динамическую природу системы, то есть предсказуемость, и хаос, то есть непредсказуемость. Аттрактор – это множество точек в фазовом пространстве диссипативной системы, посещаемых в установившемся режиме, то есть при отсутствии неустойчивости. Для восстановления аттрактора из вейвлет-коэффициентов используются такие характеристики, как фрактальная размерность, показатель Херста, корреляционная размерность и размерность фазового пространства. Для определения данных характеристик использовалась программа “Fractan” [102] (табл. 2.10).

Таблица 2.10 – Стохастические характеристики компонент температуры

Показатель Херста	Фрактальная размерность	Корреляционная размерность	Размерность фазового пространства
0,8399	1,1501	0,493	2

Из приведенных показателей основной интерес представляет размерность фазового пространства n , в которое можно вложить исследуемый ряд значений в виде динамической системы – странного аттрактора. Странный аттрактор используется для идентификации существенно нелинейных динамических систем, в которых при определенных условиях может возникать хаос. Хаос ассоциируется с наличием в фазовом пространстве странных аттракторов. Можно однозначно утверждать, что при $n < 3$ хаос не возникает [103]. При $n \geq 3$ наличие странного аттрактора обязательно и в этих случаях при анализе динамических режимов используется спектр ляпуновских показателей устойчивости.

Установлено, что в паре трения со смазочным материалом на субшероховатых поверхностях возникает стохастическое температурное поле $T_{\text{суб}}(\tau)$, свидетельствующее о неоднородности температурных процессов в поверхностных слоях трущихся тел. Подобная неоднородность приводит с одной стороны к высокочастотным температурным колебаниям в приповерхностных слоях, с другой – ускоряет процесс микроизнашивания и появление между трущимися телами “квазижидкого” слоя из частиц износа. Оба процесса,

в конечном счете, определяют механизмы процесса распада двойных твердых растворов и процессов диффузии элементного состава растворов к поверхности трения.

Проведенный частотно-временной анализ на основе одномерных дискретного и непрерывного вейвлет-преобразований показал, что диапазон частот звуковых тепловых колебаний может охватывать диапазон колебаний атомов в кристаллической решетке, следовательно, возникают предпосылки к возникновению резонансного механизма диффузии с высоким коэффициентом диффузии D . Определенные при этом стохастические характеристики в виде корреляционной размерности и размерности фазового пространства указывают на отсутствие хаоса в динамической системе, то есть хаос в исследуемой системе отсутствует.

При частотах звуковых тепловых и упругих колебаний, меньших, чем диапазон колебаний атомов в кристаллической решетке, возникает кооперативный механизм диффузии с меньшим коэффициентом диффузии D .

2.7 Модельные представления термического удара

Основные положения данного раздела базируются на результатах работ [180, 181, 182]. «Моделирование температурных процессов показало, что на площадках контакта, формирующихся на суб- и микрошероховатостях в результате приложенного давления и скорости V_{mp} возникают высокотемпературные пульсирующие поля со следующими параметрами [10, 98]: темп тепловвода $dT/d\tau = 10^6 \dots 10^9$ К/с; скорость тепловвода $U = 10^4 \dots 10^7$ с⁻¹, плотность мощности теплового потока $q_0 = 10^9 \dots 10^{10}$ Вт/м². За исключением параметра q_0 , который на два-три порядка ниже, они соответствуют параметрам лазерного облучения металла [104]. Высокие значения темпа тепловвода позволяют говорить о существовании термических ударов, инициированных на площадках контакта микронеровностей температурой трения. Помимо термических ударов в результате тангенциального соударения микронеровностей скорость деформации $\dot{\epsilon} = 10^3 \dots 10^4$ с⁻¹, что соответствует механическому удару [10].

Динамическая реакция поверхностного слоя на термические удары состоит в возникновении термоупругих напряжений, на механические удары — вязких контактных напряжений [105].

Существует несколько подходов для модельного представления термического удара. Применительно к рассматриваемой в диссертации задаче рассмотрим подробно два из них: в континуальном приближении (среда предполагается сплошной) и дискретный (среда рассматривается на уровне кристаллической решетки)» [180, 181].

2.7.1 Континуальное приближение

«В классической теории теплопроводности, основанной на гипотезе Фурье о распространении тепла в сплошной среде $q = -\lambda \frac{dT}{dx}$ и уравнении теплопроводности параболического типа постулируется бесконечная скорость распространения тепла $V_T \rightarrow \infty$. Однако, скорость V_T имеет конечное значение, так как тепловой поток

релаксирует (для стали время релаксации $\tau_p \sim 10^{-11}$ с). Влияние скорости V_T становится заметным, когда в нестационарном температурном процессе рассматривается малый промежуток времени τ . Термический удар соответствует данным условиям, так как с учетом инерционных эффектов $\tau = 10^{-4} \dots 10^{-6}$ с. В этом случае уравнение распространения тепла имеет вид $q = -\lambda \frac{dT}{dx} - \tau_r \frac{dq}{d\tau}$, а скорость распространения тепла $V_T = \sqrt{\frac{a}{\tau_r}}$, где a

– коэффициент температуропроводности стали ($V_T = 10^3$ м/с). Процесс распространения тепла носит волновой характер и описывается гиперболическим уравнением теплопроводности» [180, 181, 182].

Решение задачи для континуального приближения приведено в работе [106].

«Решение в графической форме приведено на рисунке 2.33. Напряжения в абсолютных величинах для температур $T = 200 \dots 500$ °С равны $\sigma_{zz} = (9,8 \dots 24) \cdot 10^{10}$ Па.

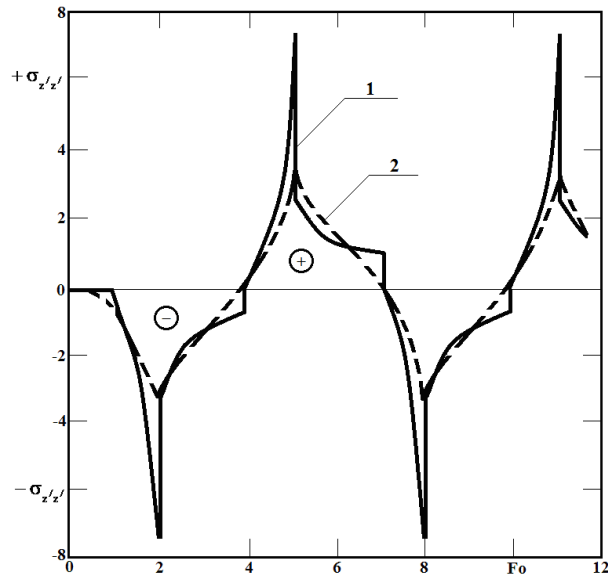


Рисунок 2.33. – Зависимость изменения напряжения σ_{zz} от времени Fo при температурах $T = 500$ °С (1) и $T = 200$ °С (2)

Величина давления в поверхностном слое стали определяется как взятое с обратным знаком среднее из трех главных напряжений

$$P = -\frac{\sigma_{zz} + \sigma_{xx} + \sigma_{yy}}{3}, \quad (2.20)$$

где $\sigma_{xx} = \sigma_{yy} = \frac{\nu}{1-\nu} \sigma_{zz}$ » [183, 184].

«При отрицательных термоупругих напряжениях происходит сжатие поверхностного слоя, при положительных – растяжение.

Механический удар вызывает в поверхностной зоне вязкие напряжения $\sigma_\theta = \eta \cdot \dot{\epsilon}$, где $\eta = (5 \dots 5,8) \cdot 10^5$ Па·с [107], коэффициент динамической вязкости стали при скорости деформации $\dot{\epsilon} = 10^3 \dots 10^4$, следовательно, $\sigma_\theta = (0,5 \dots 1)$ ГПа.

Таким образом, приповерхностный слой находится в вязкоупругом состоянии в течение времени релаксации $\tau = (1 \dots 2) \cdot 10^{-6}$ с [108, 109] и в нем возникают вязкоупругие напряжения. Однако, как показали расчеты, динамическая реакция вязкоупругих сред Максвелла на термический удар несущественно отличается от динамической реакции упругих сред и при изучении поведения вязкоупругих сред под действием термического

удара могут применяться соотношения для упругих сред. Расчетные значения давлений приведены в таблице 2.11.

Таблица 2.11 – Значения давления P в поверхностном слое в континуальном и дискретном приближении

Тип подходов	Тип контакта		Микрошероховатость		Субшероховатость	
Континуальный подход	сжатие	$T, ^\circ\text{C}$	200	300	400	500
		$P, \text{ГПа}$	6	8,9	11,8	14,7
	растяжение	$P, \text{ГПа}$	6	8,9	11,8	14,7
Дискретный подход		$T, ^\circ\text{C}$	200	300	400	500
		Параметр Γ	8			
		$P, \text{ГПа}$	5,4	8,1	10,8	13,8» [180, 183].

2.7.2 Дискретный подход

«Дискретный подход рассматривает структурное состояние поверхностного слоя на уровне кристаллической решетки и предполагает, что в результате действия термического удара в среде возникают ударные волны расширения-сжатия с образованием отрицательного давления и с амплитудой, пропорциональной плотности мощности теплового потока W [110]. В результате в поверхностном слое образуется неравновесная область с характерным временем акустической релаксации $\tau_p \approx 10^{-6}$ с.

В данном случае релаксация представляет собой частный случай, когда система стремится к равновесию по изменению одного параметра – давления P . Релаксация достигается либо акустической разгрузкой, либо структурно-фазовыми превращениями в стали, если давление не успевает релаксировать путем акустической разгрузки. Так как время фазовых превращений $\tau_\phi \ll \tau_p$, в частности, время полиморфных превращений составляет 10^{-13} с, то в стали будут происходить фазовые превращения (диффузионные и бездиффузионные).

Давление от термического удара целесообразно определять по зависимости [110]

$$P \sim \Gamma c \rho \int_{T_0}^{T_1} dT, \quad (2.21)$$

где c и ρ соответственно теплоемкость и плотность стали; $T_1 - T_0$ – диапазон исследуемых температур; Γ – параметр Грюнайзена.

Для приведенных температур $T^* = \frac{T}{\theta}$, где θ – температура Дебая. $\Gamma = 1,68 \dots 1,72$

[111]. Однако экспериментально и на основе модельных расчетов установлено, что в упругонапряженном теле существует поверхностный слой толщиной до $0,3 \cdot 10^{-6}$ м,

физические свойства которого отличаются от свойств объема. В частности, параметр Γ увеличивается от 2,5 до 5 раз [112].

Расчеты давлений по формуле (2.21) приведены в таблице 2.12.

Таблица 2.12 – Расчетные значения коэффициентов диффузии D и $E_{кин}$ атомов отдачи ($Fe-Fe$)

Параметр	$T, ^\circ\text{C}$			
	200	300	400	500
$P, \text{ГПа}$	5,4	8,1	10,8	13,8
$V_a, \text{м}^3$	$0,84 \cdot 10^{-29}$			
ε	0,023	0,038	0,074	0,100
$\Delta E_{ном}, \text{эВ}$	0,035	0,100	0,370	0,640
n	90	32	9	5
$F_{упр}, \text{Н}$	$0,4 \cdot 10^{-9}$			
$\lambda \cdot 10^9, \text{м}$	1,8	1,6	1,4	1,24
$W \cdot 10^{-14}, \text{Вт/м}^2$	0,082	0,14	0,27	0,35
$S_{яч} (\alpha\text{-Fe}), \text{м}^2$	$4,13 \cdot 10^{-20}$			
$W_{ам} \cdot 10^6, \text{Вт/ат}$	0,34	0,56	1,10	1,46
$V_{ам} \cdot 10^{-3}, \text{м/с}$	0,85	1,42	2,72	3,67
$D \cdot 10^6, \text{м}^2/\text{с}$	1,50	2,25	3,80	4,60
$E_{кин}, \text{Дж/эВ}$	$\frac{0,36 \cdot 10^{-20}}{0,015}$	$\frac{1,10 \cdot 10^{-20}}{0,097}$	$\frac{3,40 \cdot 10^{-20}}{0,25}$	$\frac{0,70 \cdot 10^{-19}}{0,43}$

Проанализируем далее причины аномального ускорения диффузионного процесса под действие термического удара. Контактные и упругие напряжения, проникая вглубь поверхностного слоя, воздействуют на диффузионную подвижность атомов в решетке. Оценка влияния упруго-волновых воздействий на динамику поведения атомов может быть осуществлена с помощью потенциалов парных взаимодействий $v(r)$ [110]. На рисунке 2.34 схематически представлен потенциал парных взаимодействий атомов в равновесном состоянии и при волновом нагружении механическими и термическими ударами.

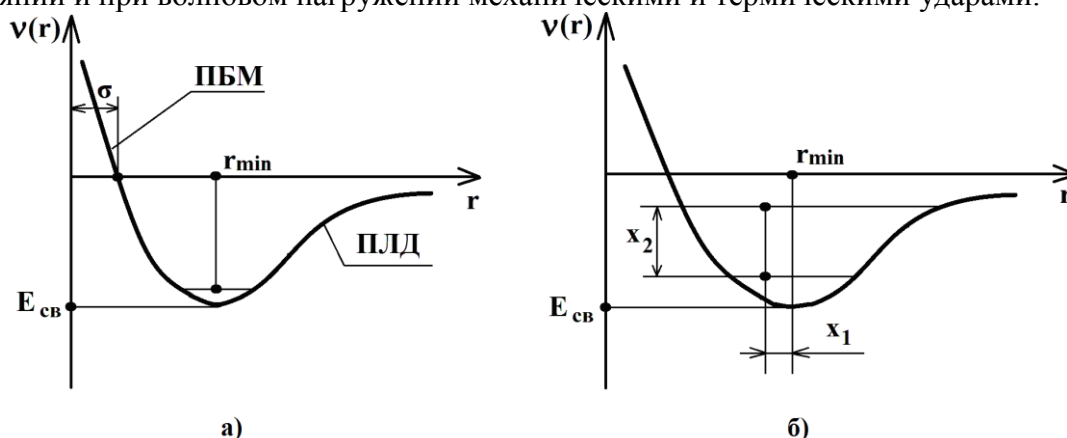


Рисунок 2.34. – Потенциалы парного взаимодействия атомов $v(r)$ в равновесном состоянии (а) и волновом нагружении механическим и тепловым ударами (б)» [180, 181, 183, 184].

«При механическом ударе атом смещается из положения r_{min} , соответствующего минимальной потенциальной энергии (глубине потенциальной ямы) E_{cv} , на расстояние x_1 . При термическом ударе смещение x_2 , пропорциональное энергии удара $E_{уд}$, уменьшает энергию E_{cv} . Если $E_{уд} < E_{cv}$, то атом смещается в решетке на расстояния x_1 и x_2 . Расчеты показывают, что $x_1 \approx 3 \cdot 10^{-11}$ м, следовательно, это смещение можно не рассматривать. При $E_{уд} > E_{cv}$ атом выбивается из решетки, приобретая некоторую скорость V , то есть

кинетическую энергию $E_{кин}$. В зависимости от величины $E_{кин}$ либо образуется пара “вакансия - междоузельный атом”, либо при $E_{кин} > 2E_{св}$ может произойти каскад столкновений. При подобном сценарии для описания диффузионного процесса необходимо проводить анализ перемещения отдельных атомов и эволюции исследуемого ансамбля атомов в целом, что возможно при моделировании процесса посредством использования метода молекулярной динамики при известных потенциалах парных взаимодействий» [183, 184].

2.8 Анализ причин возникновения восходящей диффузии

Проблема “восходящей диффузии” была впервые исследована В.С. Горским в 1935 г. (эффект Горского), сущность которого изложена в работе [113].

Если переходить к восходящей диффузии при трении, то она экспериментально подтверждается практически всеми исследователями [113, 114]. Качественный признак ее наличия – направление диффузионных потоков в сторону поверхности трения.

Источником диффузионных процессов в поверхностных слоях трущихся деталей являются ТУ, инициированные термоциклирующими процессами на суб- и микрошероховатостях поверхности трения в присутствии смазочных материалов [115]. Плотность мощности теплового потока от кипящей смазки в поверхность составляет $q_0 = (5,6 \dots 11) \cdot 10^9$ Вт/м² (для $T = 300 \dots 700$ °С). В результате действия теплового потока на поверхности трения возникают пульсирующие напряжения “сжатия-расширения” (рис. 2.35). Значения давления P намного превышают предел текучести σ_T теплостойких сталей ($\sigma_T = 1,0$ ГПа). Следовательно, в поверхностном слое возникает упругопластическое состояние. К сказанному следует добавить, что практически одновременно в поверхностном слое возникают ударные механические напряжения от соударения микронеровностей со скоростью деформации $\dot{\epsilon} = 10^3 \dots 10^4$ 1/с и давлением $P_{max} \leq 1$ ГПа. В результате в поверхностных слоях возникает вязкое состояние с коэффициентом динамической вязкости $\eta = (5,0 \dots 5,6) \cdot 10^5$ Па·с. В результате мгновенного воздействия ТУ возникающие упругие напряжения в поверхностном слое не вызывают деформацию. Следовательно, вязкие напряжения приходятся на пластическую часть напряжений. Подобное состояние материала поверхностного слоя характеризуется как упруго/вязкопластическое [116], а в поверхностном слое возникает упругопластическая волна. На данном этапе исследований предполагается установить причины возникновения восходящей диффузии при трении. В этой связи представляется целесообразным отказаться от применения сложного математического аппарата теории упруго/вязкопластического состояния, а обойтись исследованиями на качественном уровне.

Цель дальнейших исследований заключается в установлении механизмов трансформации поверхностных давлений от ТУ (рис. 2.35) в приповерхностный слой трения; определения на этой основе глубины расположения и энергии процесса восходящей диффузии. Как следует из рисунка 2.35, в направлении, перпендикулярном поверхности трения действуют сжимающие и растягивающие давления (напряжения σ_z в случае одномерной задачи).

Следуя работе [63], вначале дадим оценку глубины z действия ТУ. Так как теплота в металле передается звуковой волной, то глубина z определяется глубиной затухания звуковой волны, то есть коэффициентом поглощения звука α . Оценочное значение коэффициента α определяется по зависимости

$$\alpha \sim \frac{d}{\lambda^2}, \quad (2.22)$$

где d – параметр кристаллической решетки (для α -Fe $d=2,87 \cdot 10^{-12}$ м); λ – длина звуковой волны.

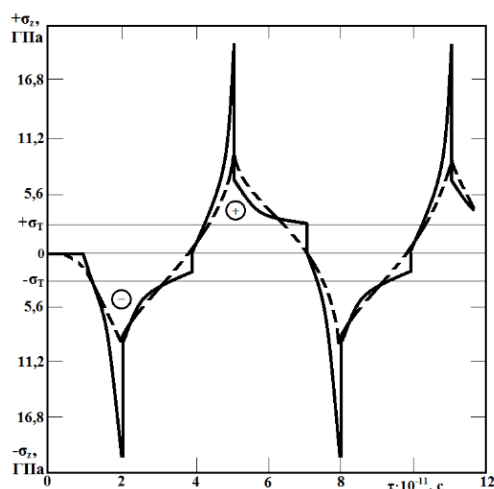


Рисунок 2.35. – Зависимость напряжений σ_z от времени τ

В свою очередь из [117] следует, что

$$\lambda = 2\sqrt{kp}, \quad (2.23)$$

где $k=10^{-5}$ м²/с – коэффициент температуропроводности стали; $p=3,6 \cdot 10^{-8}$ с – период колебаний тепловой (звуковой) волны.

Окончательно имеем $\lambda=1,2 \cdot 10^{-6}$ м, $\alpha=200$ 1/м. Величина α^{-1} , имеющая размерность длины, будет определять глубину поглощения звука, то есть ТУ и $1/\alpha=5 \cdot 10^{-3}$ м.

Падение температуры по глубине подчиняется экспоненциальной зависимости

$$T = T_{max} e^{-z \cdot 10^6}, \quad (2.24)$$

где z – глубина l м.

В зоне действия ТУ следует выделить слой поглощения тепла $z_{\perp}$, где согласно критерию Предводителя содержится более 90 % всего тепла ТУ. Величина $z_{\perp}$ зависит от скорости трения V_{mp} , которая определяет приповерхностную температуру T (табл. 2.13 [117]).

Таблица 2.13 – Глубина теплосодержащей зоны $z_{\perp}$

V_{mp} , м/с	3	5	10
T , °C	300	500	700
$z \cdot 10^6$, м	60	40	25

Проанализируем области решений, представленных на рисунке 2.35. В работе [116] используется разрыв напряжений. Начальный разрыв имеет место на поверхности трения в точке приложения ТУ. При деформации все разрывы существуют в виде двух частей: передней упругой, зависящей от предела текучести σ_m и более медленной пластической, разделенной упругими волнами. За пластическим разрывом следуют растягивающие напряжения. Теория упругих разрывов хорошо разработана и не нуждается в уточнениях.

Теория пластических разрывов требует более детального рассмотрения. Во-первых, пластический разрыв $I \rightarrow 0$ на глубине 2^x слоев поглощает тепло (табл. 2.12). Во-вторых, согласно [116] условие для наступления пластического разрыва имеет вид

$$e_s = \frac{(1 - e^{-\eta_e})}{\eta_0}. \quad (2.25)$$

Восходящая диффузия определяется действием напряжения $\sigma_{диф}$ и соответствующим значением силового поля, определяющим действующую на диффундирующие атомы силу F_s . Под ее влиянием потенциальный барьер становится асимметричным и, следовательно, на фоне фиковской энтропийной миграции должно себя обнаруживать направленное, дрейфовое перемещение атомов. В этом случае поток определяется уравнением

$$J = -(D\nabla c - \xi c F_s) \omega^{-1}, \quad (2.27)$$

где $\xi = \frac{D}{kT}$ – подвижность атомов; ∇c – градиент концентраций; ω – объем атома.

Если ∇c и F_s антипараллельны F_s вносит в диффузионный поток компоненту восходящей диффузии, осуществляющейся против ∇c .

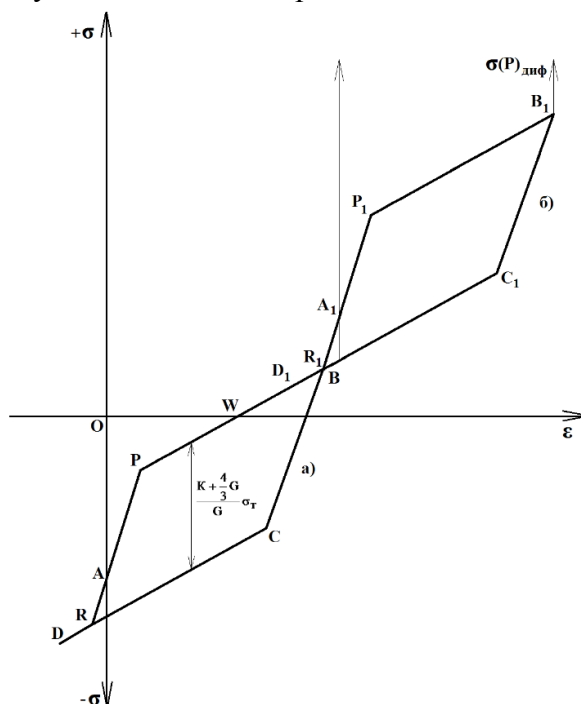


Рисунок 2.37. – Зависимость продольных напряжений от деформации:
а – при сжатии ($-P$); б – при растяжении ($+P$)

Таким образом, восходящая диффузия начинается на глубине $z_{\perp}$ и воздействует на атомы растягивающим напряжением в точке B_1 .

Определим численные значения максимальных растягивающих напряжений (давлений) для данных таблицы 2.14.

Таблица 2.14 – Значения σ_z^{max} для различных температур

$T, ^\circ\text{C}$	300	500	700
$z \cdot 10^6, \text{м}$	60	40	25
$\sigma_z(P), \text{ГПа}$	3,04	5,29	8,08
$\pm P_{усх}, \text{ГПа}$	5,6	11,2	16,8
$E, \text{эВ}$	0,17	0,5	1,36
n	14	8	3

Значение потенциальной энергии, действующей на атом в потенциальной яме при использовании модели жестких сфер, находятся по формуле [118]

$$E_{ном} = 3\varepsilon PV, \quad (2.28)$$

где $\varepsilon = \frac{P}{E}$ – относительная линейная деформация; $V = 4,189 \cdot R^3$ – объем атома.

Определим значение E для самодиффузии железа в поверхностной зоне $R_{Fe} = 1,26 \cdot 10^{-10}$ м, $V = 2 \cdot 10^{-30}$ м³. Значения E_{nom} для различных температур приведены в таблице 2.14, причем $E_{nom} < E_{св}^{Fe} = 4,28$ эВ. Следовательно, для преодоления потенциального барьера необходимо несколько парных ударов “сжатие-растяжение”. Отметим при этом, что релаксация решетки происходит только после выхода атома, то есть атомы будут находиться в потенциальной яме в “подвешенном” состоянии. Согласно принятой в металловедении терминологии атомы “будут увеличивать диффузионную подвижность”.

Количество парных ударов, необходимых для преодоления потенциального барьера считается накопленным путем

$$\frac{n(n+1)}{2} = \frac{E_{св}}{E_{nom}}. \quad (2.29)$$

Значения n приведены в таблице 2.14.

Подобный механизм относится к кооперативному механизму диффузии. Далее параметры восходящей диффузии при кооперативном механизме будут определены с использованием метода молекулярной динамики.

Последние удары в серии из n ударов можно отнести к термическим флуктуациям, способствующим переходу атома через потенциальный барьер. Известно, что термические флуктуации играют решающую роль на многих этапах эволюции структуры кристаллической решетки, включающей и диффузионные процессы.

Диффузионные процессы определяются элементарными атомными перемещениями. Вместе с тем свойства макроскопических тел обусловлены термически активированными перестройками дефектной структуры и кинетикой ансамблей дефектов в структуре [119].

Глава 3

Использование метода молекулярной динамики (ММД) применительно к задачам трибологии

Рассмотренные в предыдущих главах аналитические и экспериментальные методы относились, прежде всего, к исследованиям изменения структуры и свойств поверхностной зоны в макромасштабном измерении (континуальное приближение). В рамках этого приближения рассматриваются свойства сплошных сред без учета их дискретности. В этой связи не рассматривается вид симметрии кристаллических решеток, их точечные и линейные дефекты и анизотропия структуры. Представляется затруднительным устанавливать различия в свойствах между различными аллотропическими модификациями железа (α -Fe, γ -Fe, ε -Fe), которые, являясь матрицами двойных и тройных растворов, превалируют в объемном содержании стали 25ХЗМЗНБЦА. Кроме того, процесс эволюции пор и трещин, носящий нанометровый уровень, сложно представить в аналитической форме или визуализировать.

3.1 Формализм метода молекулярной динамики

Одним из перспективных направлений развития трибологии является разработка атомистической теории трибопроцессов [1]. Описание адгезии, трения и износа на основе атомистических моделей кристаллических решеток, электрон-фоонных процессов с явлениями диссипации энергии служит основой атомистической теории трибопроцессов. Процессы диффузии локализуются в тонких поверхностных слоях, в малых объемах имеет место повышение дефектов решетки, коэффициент диффузии увеличивается на несколько порядков. Наличие смазки в контактной зоне влияет на закономерности возникновения и распределения дефектов. В результате происходят структурно-фазовые превращения, приводящие к появлению ВС [1, 96]. В свою очередь вторичные структуры влияют на изменение функциональных свойств поверхностных слоев. Одним из способов описания данных процессов является использование ММД.

Приведенные в предыдущей главе данные, полученные методом натурального эксперимента, позволяют определить состав вторичных структур, полученных в результате структурно-фазовых превращений исходных структур.

Вместе с тем, выявить особенности структурно-фазовых превращений ввиду их быстротечности ($\tau \leq 10^{-12}$ с) экспериментальным путем затруднительно, а в ряде случаев практически невозможно. Границы применимости экспериментальных методов могут быть существенно расширены, если помимо эксперимента произвести еще и расчет термодинамических величин с использованием какой-либо модели твердых растворов, соответствующей исходным фазам поверхностной зоны трения. В данном случае наиболее эффективным оказывается применение метода компьютерного моделирования, позволяющего изучать процессы, протекающие на атомном уровне, с использованием различных наглядных визуализаторов структуры и структурно-фазовых превращений.

В диссертационной работе в качестве метода компьютерного моделирования используется ММД. Данный метод моделирования базируется исключительно на классических методах моделирования систем.

Для решения уравнений движения требуется информация о межатомных взаимодействиях, которые зависят от расположения ближайших соседей в окружении

атома. Сложные эффекты, связанные с этим, можно учесть, используя потенциалы межатомного взаимодействия φ (ПМВ).

Обычно рассматривается система из сотен, тысяч и десятков тысяч атомов N с заданным потенциалом φ .

Система уравнений движения атомов имеет вид

$$\begin{aligned} m_i \frac{d\vec{V}_i}{d\tau} &= \vec{F}(\vec{r}_i), \\ \frac{d\vec{r}_i}{d\tau} &= \vec{V}_i, \end{aligned} \quad (3.1)$$

$$\vec{F}_i(\vec{r}_i) = -\sum_{j \neq i} \frac{d}{d\vec{r}_i} \varphi_{ij}(|\vec{r}_j - \vec{r}_i|),$$

где $\vec{V}_i$ – вектор скорости i -того атома; $\vec{r}_i$ – радиус-вектор i -того атома; $\vec{F}(\vec{r}_{ij})$ – вектор силы, действующей на i -тый атом со стороны j -того атома; φ_{ij} – ПМВ атома i с атомом j ; m_i – масса i -того атома.

Система уравнений (3.1) решается численными разностными методами: по известным значениям координат $x_{ki}(\tau)$ в момент времени $\tau(k=1,2,3)$ и времени $\left(\tau - \frac{\Delta\tau}{2}\right)$

вычисляются новые скорости и координаты атомов. В данной схеме на величину шага $\Delta\tau$ накладываются жесткие ограничения. Поэтому для расчета $\Delta\tau$ используются специальные программы.

В связи с тем, что сам процесс разработки программного обеспечения требует больших затрат времени, целесообразно использовать разработанное и апробированное программное обеспечение. В настоящее время в ММД широко используются две программы моделирования: XMD – для однопроцессорных компьютеров, LAMMPS – для параллельных кластеров. В диссертационной работе использовалась программа Д.Рифкина XMD в версии 2.5.38 [77]. В данной программе учтены накопленные ошибки, свойственные как непосредственно методу ММД, так и ошибки вычислительного характера. Процесс реализации программы XMD носит пошаговый характер, включающий в себя формирование модельного кристаллита из заданного количества атомов (кристаллических решеток) различного фазового состава, адаптацию программы XMD к используемому программному обеспечению и собственно исследования механизмов структурно-фазовых превращений в модельных кристаллитах под действием пульсирующих температур на суб- и микрошероховатостях в виде термических ударов.

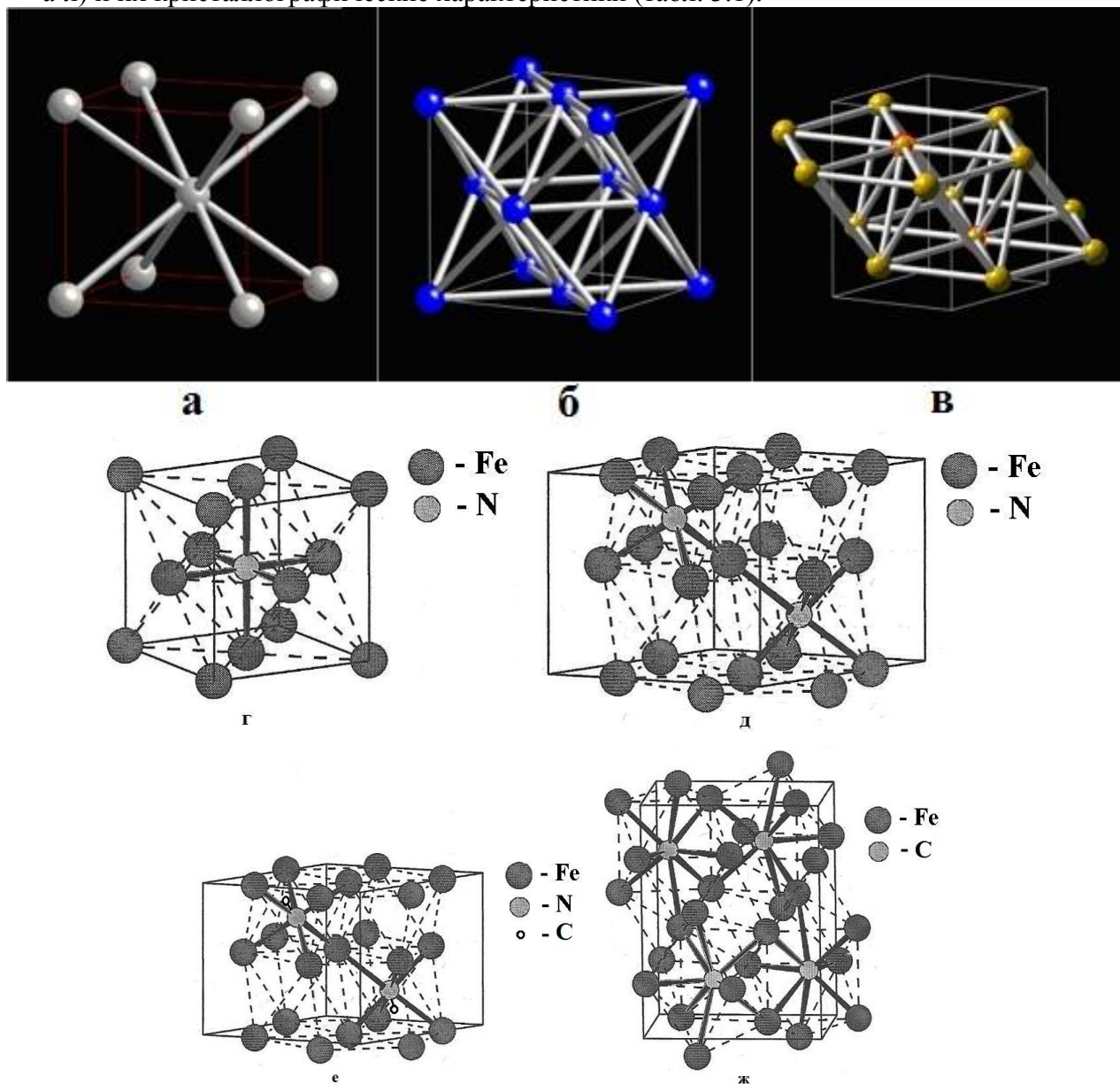
В данной главе исследуется процесс формирования модельных кристаллитов исходных фаз никотрированного слоя и переходной зоны.

Процедура формирования кристаллита включает в себя следующие этапы.

1. Анализ типов кристаллических решеток исходных фаз в никотрированном покрытии и переходной зоне.
2. Ввод в программу XMD атомных решеток с целью формирования модельного кристаллита.
3. Разработка ПМВ для модельных решеток.
4. Тестирование используемых ПМВ с целью сопоставления модельных физико-механических свойств исходных фаз с экспериментальными данными.
5. Задание начальных условий, шага интегрирования, выбор оптимального временного шага.
6. Формирование дефектов структуры.
7. Визуализация дефектов структуры.

3.2 Анализ типов кристаллических решеток исходных фаз в нитрированном слое и переходной зоне

Для реализации ММД необходимо транслировать кристаллические решетки данных фаз в программу. Ниже приводятся схематические изображения решеток (рис. 3.1 а-л) и их кристаллографические характеристики (табл. 3.1).



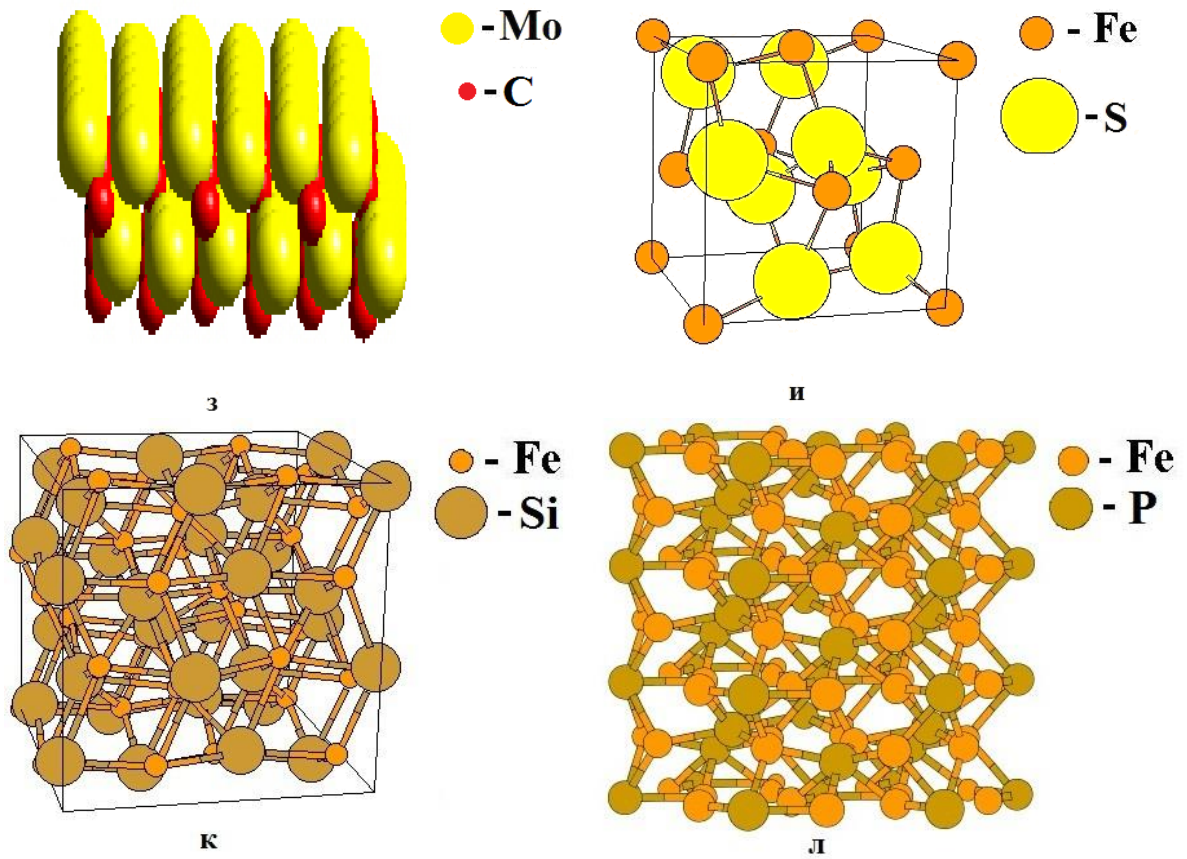


Рисунок 3.1. – Схематические изображения кристаллических решеток фаз нитрированного слоя и переходной зоны:

а – α -Fe; б – γ' -Fe; в – ε -Fe; г – Fe_4N ; д – Fe_3N ; е – $\text{Fe}_3(\text{CN})$;
ж – Fe_3C ; з – Mo_2C ; и – FeS_2 ; к – FeSi ; γ' – Fe_2P

Таблица 3.1 – Кристаллографические характеристики фаз никотрированного слоя и переходной зоны [120-127]

Фаза	Параметры решетки,			c/a	Сингония	Координационное число	Прототип	Символ Пирсона	Обозначение структурной группы	Пространственная группа	Номер
	Å										
	a	b	c								
Фазы никотрированного слоя											
α -Fe	2,8665	-	-	-	кубическая	8	W	cI2	A2	$\text{Im}\bar{3}\text{m}\left(\text{O}_{\text{h}}^9\right)$	229
γ -Fe	3,6467	-	-	-	кубическая	12	Cu	cF4	A1	$\text{Fm}\bar{3}\text{m}\left(\text{O}_{\text{h}}^5\right)$	225
ε -Fe	2,468	-	3,96	1,603	гексагональная	12	Mg	hP2	A3	$\text{P6}_3/\text{mmc}\left(\text{D}_{6\text{h}}^4\right)$	194
Fe ₄ N	3,787	-	-	-	кубическая	12	Cu	cF4	L'_1	$\text{Fm}\bar{3}\text{m}\left(\text{O}_{\text{h}}^5\right)$	225
Fe ₃ N	2,752	-	4,413	1,604	гексагональная	12	Mg	hP12	L'_3	$\text{P6}_3/\text{mmc}\left(\text{D}_{6\text{h}}^4\right)$	194
Fe ₃ C	5,0787	6,7297	4,5144	-	орторомбическая	12	Fe ₃ C	oP16	D0 ₁₁	$\text{Pnma}\left(\text{D}_{2\text{h}}^{16}\right)$	62
Fe ₃ (C,N)	2,752	-	4,413	1,604	гексагональная	12	Mg	hP12	L'_3	$\text{P6}_3/\text{mmc}\left(\text{D}_{6\text{h}}^4\right)$	194
Фазы никотрированного слоя и переходной зоны											
Mo ₂ C	4,729	6,028	5,197	-	орторомбическая	12	PbO ₂	oP12	L''_3	$\text{Pbcn}\left(\text{D}_{2\text{h}}^{14}\right)$	60
FeS ₂	5,4189	-	-	-	кубическая	8	FeS ₂	cP12	C2	$\text{Pa}3\left(\text{T}_{\text{h}}^6\right)$	205
FeSi	4,4891	-	-	-	кубическая	8	FeSi	cP8	B20	$\text{P2}_13\left(\text{T}^4\right)$	198
Fe ₂ P	5,864	-	3,456	0,589	тригональная	12	Fe ₂ P	hP9	C22	$\text{P}321\left(\text{D}_3^2\right)$	150

3.3 Разработка потенциалов межатомного взаимодействия (ПМВ)

Первые две серьезные работы, связанные с созданием ПМВ, основывались на теории псевдопотенциалов.

Используя в качестве априорной информации спектроскопические термы атомов и плотность электронов в работе [128] удалось осуществить тестирование ряда потенциалов и рассчитать основные свойства металлов (энергию связи, сжимаемость, фононный спектр, коэффициенты теплового расширения и т.д.) в твердом и жидком состоянии. Точность описания свойств по сравнению с экспериментальными значениями колебалась в пределах 15 ... 30 %. Однако для корректного описания металлоидных атомов в сталях использовать метод псевдопотенциала невозможно, так как он развит для чистых металлов. Кроме того, устойчивость сложных решеток при использовании метода псевдопотенциала достигается за счет осциллирующего (фриделевского) характера взаимодействия на больших расстояниях.

Отметим основные недостатки псевдопотенциалов.

1. Атомы в решетке и на поверхности или около дефекта не зависят от окружения, то есть они ничем не отличаются друг от друга в смысле взаимодействия с соседями.
2. Они не учитывают зависимость силы связи от направления.
3. Дают завышенную оценку энергии образования вакансии E_f .
4. Неправильно описывают упругие свойства кристаллов (следуя соотношению Коши).

В дальнейшем разработки более совершенных потенциалов базировались на положениях, изложенных в работе [118], в которой отмечалось, что в валентных металлах и сплавах "... электронные облака составляющих атомов подвергаются при взаимном сближении атомов столь радикальной перестройке, что электроны уже нельзя рассматривать как принадлежащие индивидуальным атомам, а взаимодействия атомов друг с другом даже приблизительно не могут считаться парными".

Возникает вопрос: как описать взаимодействие атомов, следуя данному положению. Дело в том, что в действительности атомы – квантовые объекты, когда взаимодействие атомов осуществляется через электроны, что не следует из классических уравнений. Делается важное предположение, что металлы и сплавы, как единые системы, представляют собой совокупность двух подсистем: электронной (электропроводность и теплопроводность) и ионной (механические свойства, диффузия).

Тогда для создания ПМВ необходимо описать ионную и электронную подсистемы. Для описания ионной подсистемы используется адиабатическое приближение Борна-Оппенгеймера. В сущности, с помощью данного приближения делается обоснование возможности применения второго закона Ньютона вместо методов квантовой механики (уравнение Шредингера) для описания взаимодействия ионов. Дело в том, что ядра атомов, имеющие массу $m_{яд} > 10^4$ раз, чем масса электронов m_e , движутся гораздо медленнее, чем электроны. Поэтому оператор кинетической энергии атома рассматривается как возмущение. Тогда движение ядер характеризуется потенциальной энергией, соответствующей энергии электронов при фиксированных координатах ядер. Эта энергия при классическом описании движения ядер соответствует потенциальной энергии парных взаимодействий атомов $\varphi(r_{ij})$.

В свою очередь электронная подсистема может быть описана через функционал плотности многоэлектронных систем посредством теоремы Хоэнберга и Кона, утверждающей, что все аспекты электронной структуры системы взаимодействующих электронов, находящихся во внешнем потенциальном поле $\varphi(r_{ij})$ и в невырожденном состоянии, полностью определяются плотностью электронного заряда $\rho(r)$.

Эта теорема значительно упрощает изучение электронных состояний, так как приходится иметь дело с функцией всего трех переменных $\rho(r)$, минимизируемой определенной функцией. Потенциальная энергия взаимодействия ядра атома с плотностью электронного заряда $\rho(r)$ может быть определена через функцию вложения атома $F(\rho)$ в плотность электронного заряда $\rho(r)$.

Опираясь на эти положения, для описания ПМВ был разработан метод вложенного атома ЕАМ (Embedded Atom Model), широко применяющийся в настоящее время.

Полная потенциальная энергия твердого тела (модельного кристаллита), состоящего из N атомов, представляется в виде

$$U = \sum_{i=1}^N U_i \quad U_i = F_i(\rho) + \frac{1}{2} \sum_{j \neq i}^N \phi(r_{ij}), \quad (3.2)$$

$$\text{где} \quad \rho_i = \sum_{j \neq i} f_j(R_{ij}). \quad (3.3)$$

Здесь F , f , ϕ – определенные функции, конкретная интерпретация которых зависит от использованного метода. Первый метод – это расчеты из первых принципов (ab initio). Однако расчеты такого типа пока не позволяют получить достаточно точные потенциалы из-за недостаточного количества используемых в расчете атомов N ($N < 10^3$). Второй метод – это подбор функциональной формы и параметров таким образом, чтобы некоторый набор свойств кристаллита совпадал с экспериментальными значениями. Например, потенциалы ЕАМ для α -Fe подгоняются под значения параметра решетки $a_0 = 2,87 \text{ \AA}$. Параметры $F^{(0)}$ и $F^{(2)}$ выражаются через экспериментальные значения энергии связи $E_0 = 4,28 \text{ эВ}$ и объемного модуля сжатия $B = 166,88 \text{ ГПа}$. Кроме этого коэффициент q_1 определяется из граничного условия $F_\rho(0) = 0$.

Теплостойкие стали типа 25Х3МЗНБЦА с никотрированным покрытием являются наиболее перспективным конструкционным материалом для узлов ТМСН. Многообразие исходных фаз – от аллотропических модификаций железа до твердых растворов типа “Fe-металлоид”, “Fe-газ” и (Mo-газ) вызывает определенные трудности при разработке ПМВ с использованием метода “погруженного атома” (ЕАМ). В связи с большим количеством имеющихся потенциалов для железа и молибдена, являющихся матрицами для твердых растворов, при разработке соответствующих потенциалов внимание уделялось возможности выделить в потенциале индивидуальные особенности поведения модельных кристаллитов под действием внешних нагрузок, которое интегрально выражается посредством температурного фактора – ТУ.

3.3.1 Потенциалы для фаз α -Fe, γ -Fe и ε -Fe

Потенциалы для железа должны обеспечивать возможность изучения взаимодействия различных дефектов друг с другом для прогнозирования кинетики микроструктурных изменений в поверхностной зоне. На этой основе с учетом масштабных факторов возможно прогнозировать ресурс реальных изделий. В методе “погруженного атома” (ЕАМ) описание объемной плотности энергии основного состояния кристалла может быть представлено в виде двух аддитивных составляющих

$$E_{cs} = \frac{1}{2} \sum_m \phi(\vec{r}^m) + F(\rho), \quad (3.4)$$

где первое слагаемое – это парнопотенциальная часть плотности энергии; $F(\rho)$ – энергия вложения атома в электронную плотность: энергию некоторой связанной с наличием свободных электронов многочастичных сил.

В связи с тем, что данные силы в потенциалах для железа должны продуцировать дефекты, которые, в свою очередь, являются функцией деформируемого объема металла, в работе [129] предлагается представить второе слагаемое в формуле (3.4) как

$$F(\rho) = E_v(\Omega), \quad (3.5)$$

где $E_v(\Omega)$ – зависящая только от атомного объема Ω $\Omega = \frac{V}{N}$ и не зависящая от

структуры кристалла составляющая полной энергии связи.

Разработанный в работе [130] ПМВ базируется на обширном экспериментальном материале, который был обработан математически и представлен в виде функциональных зависимостей. Однако, для других модификаций железа (γ' -Fe и ε -Fe) он не может быть использован.

В диссертационной работе предлагается другой подход, также связанный с деформированием объема, но пригодный для трех модификаций железа, как результата полиморфных превращений. При трении данные превращения зависят от температуры T и давления P , методы определения которых рассмотрены в предыдущих главах диссертации. Рассмотрим влияние давления P на полиморфные превращения фаз Fe на основании результатов работы [131]. В данной работе приводятся расчетные данные по

изменению энергии связи E_{cs} фаз в связи с изменением их относительного объема $\frac{\Omega}{\Omega_0}$

(рис. 3.2). Для этих целей используется универсальная шкала Vanerjea–Smith [64]. В свою

очередь отношение $\frac{\Omega}{\Omega_0}$ изменяется от приложенного давления P (рис. 3.3). В работе [131]

приведены рассчитанные значения E_{cs} для α -Fe: -4,28 эВ (-4,28), γ' -Fe: -4,229 эВ (-4,223) и ε -Fe: -4,2134 эВ (-4,213). В скобках приведены экспериментальные значения E_{cs} .

Используя график, приведенный на рисунке 3.2 ($E_{cs} - \frac{\Omega}{\Omega_0}$), можно определить значения

относительного объема $\frac{\Omega}{\Omega_0}$, отвечающего соответствующему полиморфному

превращению. Далее, используя график на рисунке 3.3, определяется давление P , необходимое для соответствующего полиморфного превращения. Погрешность расчетов

по кривой $E_{cs} - \frac{\Omega}{\Omega_0}$ определяется по зависимости

$$E_{us} = E_{cs}(1 + S)\exp(-S), \quad (3.6)$$

$$\text{где} \quad S = 4,85406479 \left(\frac{-E_{cs}}{BS_0} \right), \quad (3.7)$$

где $B=166,86$ ГПа – модуль сжатия в относительных единицах; S_0 – радиус ячейки Вигнера-Зейца.

Значение S_0 находится из следующих соображений. Объем, приходящийся на один атом (так называемый атомный объем Ω_0)

$$\Omega_0 = \frac{M}{\rho N_A}, \quad (3.8)$$

где $M=55,65$ г/ моль – атомная масса Fe; $\rho=7,85$ г/см³ – плотность Fe; $N_A=6,022 \cdot 10^{23}$ – число Авогадро.

$$\Omega_0 = 11,8 \cdot 10^{-24} \text{ см}^3 = 11,8 \text{ \AA}^3.$$

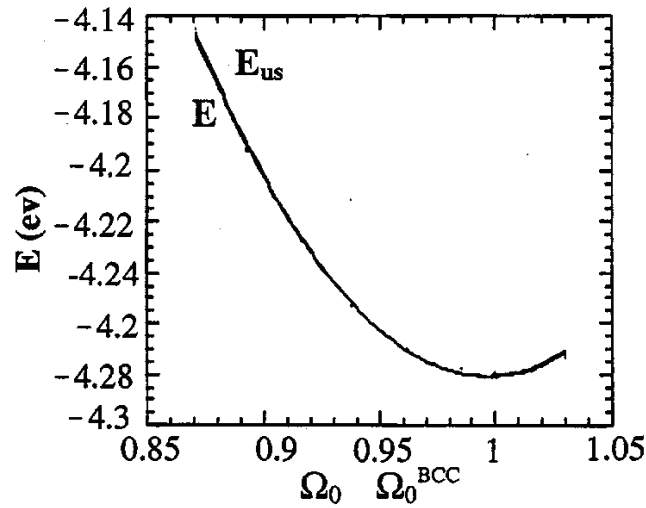
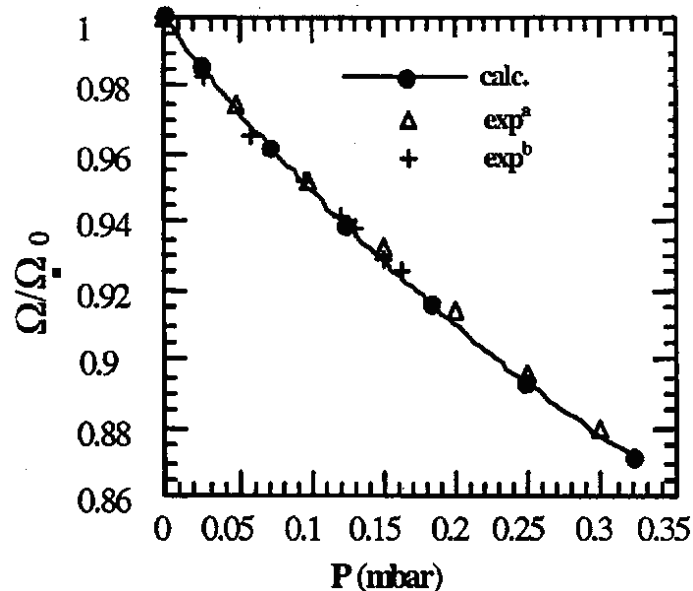


Рисунок 3.2. – Сравнение рассчитанного объема зависимости энергии связи с универсальной масштабной (E_{us}) кривой (Banerjea и Smith, 1998) [131]

Считая объем ячейки Вигнера-Зейца сферой, найдем радиус этой сферы $R = \sqrt[3]{\frac{\Omega_0}{4\pi/3}} = 1,41 \text{ \AA}$. Подставляя полученное значение в формулу (3.8), получим $S=8,8$.

Откуда $E_{us}=0,006 \text{ эВ}$ – это фактически погрешность шкалы Banerjea–Smith.

Следует отметить, что данная методика не учитывает влияние температуры на полиморфные превращения. Совместное влияние T и P можно определить на экспериментальных диаграммах состояния “ T - P ” [132]. Вместе с тем для расчета потенциалов достаточно только влияние давления.



^a Giles et al. 1971.

^b Clendener and Drickamer 1964.

Рисунок 3.3. – Расчет уравнений состояния для α -Fe [132]

Приведенные выше расчеты показывают, что для разработки потенциалов α -Fe, γ -Fe и ε -Fe можно использовать единый методологический подход [133]. К несомненным достоинствам данной работы относится возможность моделирования процессов на поверхности трения и диффузионных механизмов на кристаллографических плоскостях кристаллов Fe.

1. Парный потенциал для α -Fe и γ' -Fe представляется в виде суперпозиции двух потенциалов Морзе. После подстановки значений параметров он принимает следующий вид

$$\varphi(r) = \left\{ E_1 [\exp(-9,0164(r - 1,16319)) - 2 \exp(-4,50082(r - 1,16319))] + \right. \\ \left. + 0,0045482 \left[\exp(-4,447442(r - 4,70161)) - \right. \right. \\ \left. \left. - 2 \exp(-2,2372(r - 4,70161)) \right] - 0,02942 \right\} \psi(x), \quad (3.9)$$

где функция отсечки $\psi(x) = \frac{r - 5,67337}{0,59906}$, $\psi(x) = \frac{x^4}{x^4 + 1}$ при $x < 0$, $\psi(x) = 0$ при $x > 0$.

2. Электронная плотность после подстановки значений параметров

$$\rho(r) = [A \exp(-0,00572(r + 0,018072)^2) + \exp(-0,08581(r + 0,0648))] \psi(x). \quad (3.10)$$

3. Функция вложения представляется полиномом

$$F(\rho) = F^{(0)} + \frac{1}{2} F^{(2)} (\bar{\rho} - 1)^2 + \sum_{n=1}^4 q_n (\bar{\rho} - 1)^{n+2}, \quad (3.11)$$

если $\bar{\rho} < \bar{\rho}_1$;

$$F_\rho(\bar{\rho}) = F_\rho(\bar{\rho}_1) + F'_\rho(\bar{\rho}_1) \left\{ (\bar{\rho} - \bar{\rho}_1) + \frac{1}{2} F''_\rho(\bar{\rho}_1) (\bar{\rho} - \bar{\rho}_1)^2 + \frac{1}{6} F'''_\rho(\bar{\rho}_1) (\bar{\rho} - \bar{\rho}_1)^3 + \right. \\ \left. + \sum_{i=1}^5 S_k H(\bar{\rho} - \bar{\rho}_k)^4 \right\}, \quad (3.12)$$

если $\bar{\rho} < \bar{\rho}_1 > 1$,

где $H(\bar{\rho} - \bar{\rho}_k)$ – единичная функция Хэвисайда.

Параметры E_1 и A в формулах (3.9) и (3.10) установили путем нормализации функции $\rho(r)$ за счет процедуры $\rho(r) = \bar{\rho} = 1$ и использования условия механического равновесия структуры α -Fe на экспериментальном значении параметра решетки $a_0 = 2,87 \text{ \AA}$. Параметры $F^{(0)}$ и $F^{(2)}$ выражаются через экспериментальные значения энергии связи $E_0 = 4,28 \text{ эВ}$ и объемного модуля сжатия $B = 166,88 \text{ ГПа}$. Кроме этого коэффициент q_1 определяется из граничного условия $F_\rho(0) = 0$.

Некоторые значения из 14 используемых параметров были рассчитаны из первых принципов (ab initio) для α -Fe и γ' -Fe, как функция атомного объема Ω . Это позволило использовать расчетные потенциалы как для α -Fe, так и для γ' -Fe, хотя они различаются по параметру решетки a_0 , энергии связи $E_{св}$ и координационному числу n , учитывающему влияние ближайших соседей. Для устранения отмеченных различий для фазы γ' -Fe после ввода потенциалов в программу предусмотрена процедура расслабления при $T = 0 \text{ К}$.

Кристаллическая решетка α -Fe, построенная с помощью программы XMD, показана на рисунке 3.4, а на рисунке 3.5 а-г приведены графики потенциалов для α -Fe и их уравнений в виде полиномов.

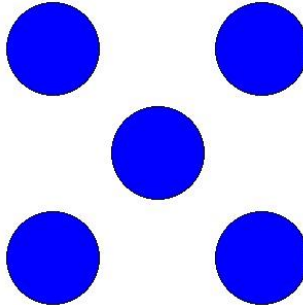


Рисунок 3.4. – Кристаллическая решетка α -Fe

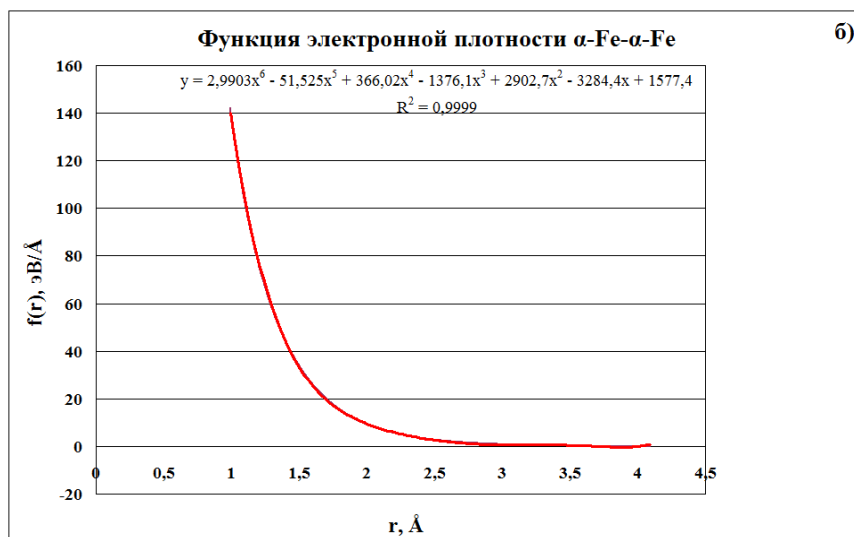
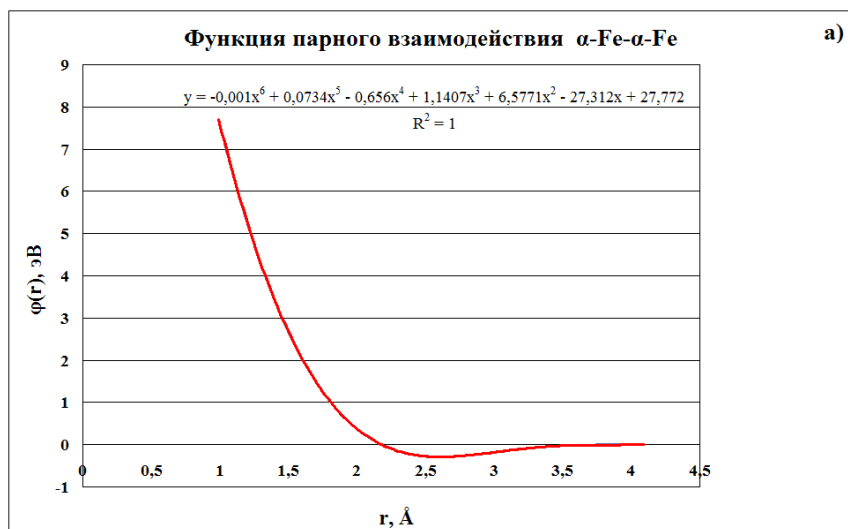




Рисунок 3.5. – Функции ПМВ для α-Fe:

а – функция парного взаимодействия; б – функция электронной плотности;
в – функция вложения; г – функция потенциальной энергии

Кристаллическая решетка γ' -Fe, построенная с помощью программы XMD, показана на рисунке ПБ.1, а на рисунке ПБ.2 а-г приведены графики потенциалов для γ' -Fe и их уравнений в виде полиномов (Приложение Б).

Кристаллическая решетка ε -Fe, построенная с помощью программы XMD, показана на рисунке ПВ.1, а на рисунке ПВ.2 а-г приведены графики потенциалов для ε -Fe и их уравнений в виде полиномов (Приложение В).

3.3.2 Тестирование ПМВ

Тестирование ПМВ производится с целью проверки соответствия значений динамических свойств модельных кристаллитов с полученными экспериментально или *ab initio* (из первых принципов) аналогичными свойствами реальных кристаллов. Динамические свойства кристаллов – фундаментальные характеристики, определяющие такие физические свойства как диффузия, теплоемкость, теплопроводность, кинетика зарождения дефектов. В термодинамическом приближении они полностью характеризуются двумя функциями: распределения плотности колебательного состояния атомов (ПКСА) (фононный спектр) и распределения по скоростям атомов (ФРСА) или энергиям.

Основные выражения для описания необходимых динамических свойств хорошо известны [134] и выражаются через параметры ПМВ $\varphi(R)$: жесткость решетки

$$C = \varphi''(R) \quad (3.13)$$

и давление в решетке

$$P = \varphi'''(R). \quad (3.14)$$

Для определения упругих постоянных C_{ij} разработаны зависимости, приведенные в работе [135]. Жесткость решетки C определяет ее устойчивость, упругие постоянные при $C_{ij} > 0$ влияют на стабилизацию структуры решетки. Более сильное условие стабилизации – неотрицательность собственных частот колебаний атомов $\omega^2(k)$ в любой точке кристаллита.

Для ряда кристаллических решеток ПМВ протестированные данные и значения динамических свойств приводятся в диссертационной работе. Для других решеток необходимые значения динамических свойств определялись с помощью дополнительных зависимостей.

Помимо динамических свойств определялись энергетические свойства (энергия связи $E_{св}$, энергия образования вакансий E_v^f , поверхностная энергия F_s) и размерные характеристики (постоянные решеток).

3.4 Задание начальных условий

К начальным условиям следует отнести исходную температуру, начальную скорость колебаний атомов, выбор оптимального шага моделирования.

3.4.1 Задание начальной температуры

При задании начальной температуры $T_{нач}$ сформированный модельный кристаллит должен пройти операцию релаксации, заключающуюся в задании $T_{нач}=0$ К и выдержку при этой температуре в течение времени $\tau \approx 10^{-14}$ с. Непосредственное задание $T_{нач}$ осуществляется командой `itemp  $T_{нач}$` и последующим зажимом температуры с помощью команды `clamp  $T_{нач}$` .

3.4.2 Задание начальной скорости колебаний атомов

Начальные скорости колебаний атомов $V_{нач}$ задаются из физически обоснованных предположений, что они носят вероятностный характер и подчиняются распределению Максвелла с функцией плотности вероятности [21]

$$f(V)dV = 4\pi V^2 \left(\frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{3/2} \exp\left(-\frac{mV^2}{2k_B T} \right) dV, \quad (3.15)$$

где m – масса атома; k_B – константа Больцмана; T – заданная начальная температура.

На рисунке 3.8 приведены графики плотности вероятности скоростей атомов для различных температур.

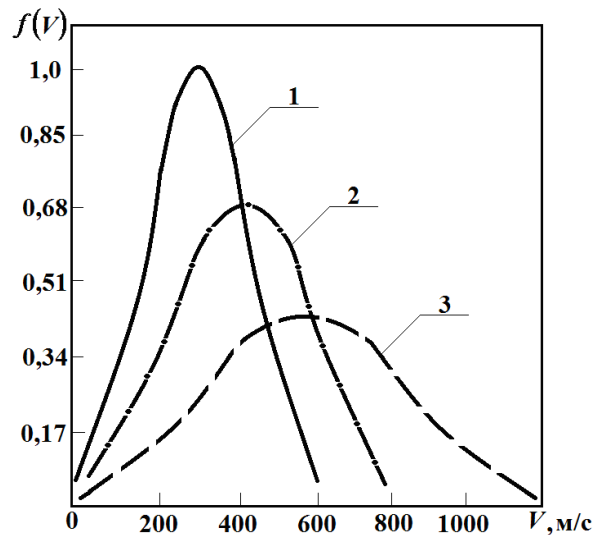


Рисунок 3.8. – Плотности вероятности распределения колебательных скоростей для атомов Fe: 1 – $T_h=300$ K; 2 – $T_h=500$ K; 3 – $T_h=900$ K

Для задания распределения Максвелла в программу XMD вводится специальная подпрограмма, основанная на положениях теории вероятности, а именно, на законах распределения функций случайных аргументов [22].

3.4.3 Задание оптимального времени шага интегрирования $\Delta\tau$

Временной шаг $\Delta\tau$ – это разница во времени между двумя смежными шагами программирования. Величина временного шага имеет ограничения сверху и снизу. С точки зрения охвата больших по времени и размерам объектов моделирования целесообразно иметь максимальное значение $\Delta\tau$. Однако, алгоритм ММД становится при этом неустойчивым из-за нарушения закона сохранения энергии. В свою очередь нижнее ограничение $\Delta\tau$ связано с вибрационными явлениями в процессе моделирования. Физически размер $\Delta\tau$ – это приблизительно 0,033 от 0,01 минимального вибрационного перехода $\Delta\tau_g$. Величина $\Delta\tau_g$ наиболее сильно зависит от выбранного ПМВ и в меньшей степени от особенностей структуры решетки и температуры.

Методом проб и ошибок с использованием адиабатического моделирования в XMD реализована подпрограмма выбора оптимального значения $\Delta\tau$. Используя данную подпрограмму, определено оптимальное значение $\Delta\tau=10^{-16}$ с, охватывающее весь диапазон используемых ПМВ, структур кристаллических решеток и температур трения.

3.5 Задание граничных условий

Для моделирования систем необходимо накладывать на атомы на границе системы специальные условия, называемые граничными.

Для моделирования процессов внутри расчетной ячейки, например, модельного кристаллита, на ячейку накладываются повторяющиеся граничные условия. При их

использовании атом “запирается” в ячейке, как бы отталкивается от стенки ячейки в противоположную сторону.

Для исключения влияния стенки ячейки, то есть пересечения атомом границы расчетной ячейки, на ячейку накладываются периодические граничные условия. При этом в соседнюю ячейку входит не сам атом, а его образ, то есть число атомов в ячейке сохраняется. Так как потенциал межатомного взаимодействия имеет ограниченный радиус, то обеспечивается ограниченное количество пар “образ атома-атом соседней ячейки”. Вместе с тем, периодические граничные условия вносят дополнительные сложности в программу моделирования. Это затруднение преодолевается посредством правила ближайшей частицы: из всех возможных образов атома в паре сохраняется только ближайший, а остальные отбрасываются. При этом размеры расчетной ячейки, на которую накладываются периодические граничные условия, и используется правило ближайшей частицы должны превышать удвоенный размер радиуса обрезания потенциала $2r_c$.

При моделировании открытых поверхностей (в нашем случае поверхностей трения) используются непериодические граничные условия, когда в направлении к нормали к открытой поверхности периодические граничные условия “отключаются”.

3.6 Моделирование дефектов в кристаллах

Моделирование точечных (вакансий и междоузельных атомов (СМА)), линейных (краевых и винтовых дислокаций) и объемных (вакансионный, междоузельных кластеров и межзеренных границ) дефектов имеет свои специфические особенности.

3.6.1 Нарушение термодинамического равновесия (ТДР) в металлах при трении

Нарушение ТДР при трении может происходить под действием различных факторов, однако основным из них является температурное условие, устанавливающее нарушение ТДР, которое хорошо известно: $\tau_T > \tau_p$, где τ_T – время воздействия температуры на кристалл, τ_p – время релаксации. Так как в диссертационной работе рассматриваются импульсные температурные процессы ($\tau_T \approx 10^{-11}$ с), то основная группа процессов (обмен с окружающей средой, кинетические процессы на межфазных границах при фазовых переходах, установление равновесного распределения атома), имеющих $\tau_p \approx 10^{-6}$ с, будет находиться в неравновесном состоянии.

Вместе с тем остается открытым вопрос о времени релаксации при энергообмене между электронами и атомами в процессе диффузии и установлении равновесной конфигурации точечных и линейных дефектов. С квантово-механических позиций время установления равновесия между электронами и кристаллической решеткой можно оценить по формуле [63]

$$\tau_p = \frac{kT}{2mV_0^2} \frac{k\theta}{\varepsilon_{OF}} \tau_{np}, \quad (3.16)$$

где T – температура решетки; k – постоянная Больцмана; θ – температура электронов проводимости; mV_0^2 – энергия возбуждения фононов; $\varepsilon_{OF} = 8 \cdot 10^{-19}$ Дж – энергия электрона

на уровне Ферми; $\tau_{np}=5 \cdot 10^{-16}$ – время свободного пробега электрона при взаимодействии с решеткой.

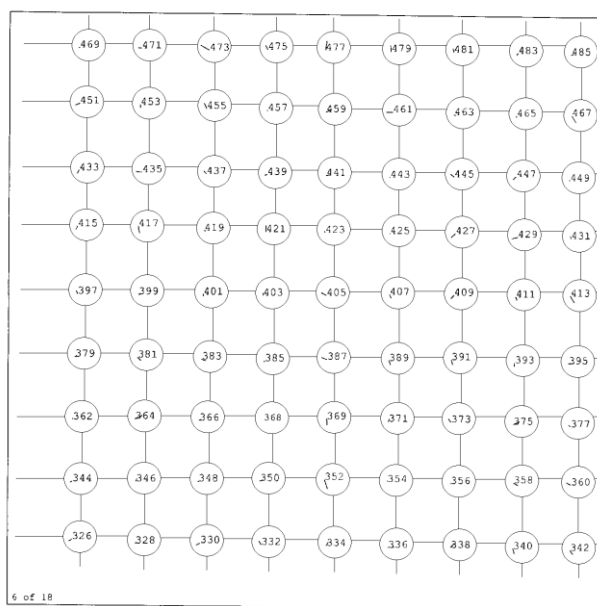
Оценим значение τ_p . При $T=10^3$ К, $\theta=10^4$ К, $mV_0^2=10^{-24}$ Дж, тогда $\tau_p=5,5 \cdot 10^{-13}$ с.

Так как $\tau_T > \tau_p$, то в процессе импульсного нагрева равновесие между электронной и ионной подсистемами практически не нарушается. При протекании диффузионных процессов термодинамическое равновесие также не нарушается, так как после выхода атомов из решетки система автоматически релаксируется [110].

Образование вакансий по механизму Шоттки ($\tau_T < 10^{-6}$) при диффузионных процессах (на дислокациях, границах зерен, поверхности) имеет время релаксации $\tau_p \approx 1$ с [136], то есть равновесия вакансий не достигается. Что же касается образования вакансий по механизму Френкеля, то вопрос остается спорным. Рассмотрим данный вопрос согласно положениям, представленным в работе [14].

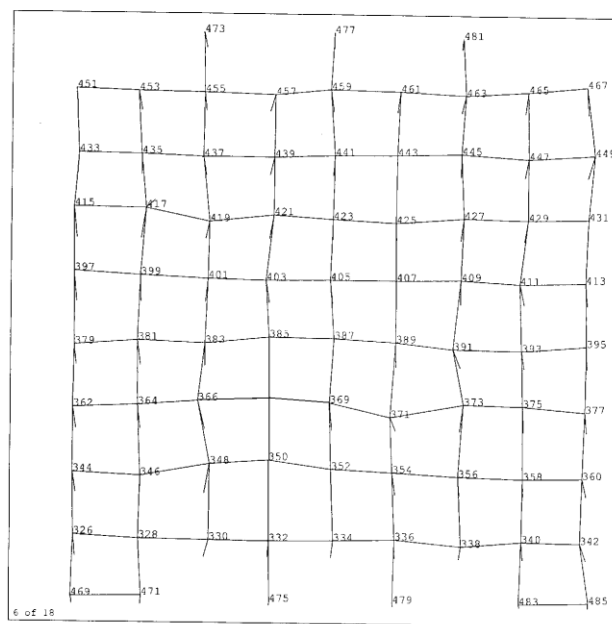
3.6.2 Моделирование точечных и линейных дефектов

При моделировании точечных и линейных дефектов был сформирован кристаллит α -Fe из 1458 атомов. Результаты моделирования в плоскости $\langle 100 \rangle$ представлены на рисунке 3.9, а. В результате температурного воздействия произошло упругое деформирование решеток в двух взаимно перпендикулярных направлениях (рис. 3.9, б).



Atom displacements in alpha Fe
Diana Farkas's Fe potential
A = 2.87
box 9 9 9
1458 atoms in box
temp 900K clamp 900
vacancy - atom N368
5000 steps of cmd
RUN 1 STEP 5000 ORIENT Y/Z Thu Jul 21 23:21:25 2016 Page 1 of 1

Рисунок 3.9, а. – Структура кристаллита α -Fe в плоскости $\langle 100 \rangle$ при $T=0$ К ($K=8$)



Atom displacements in alpha Fe (Diana Farkas's Fe potential)
 A0 = 2.87, box 9 9 9
 1458 atoms in box
 temp 900K clamp 900K
 vacancy in this layer - atom N368
 atoms 348, 350, 352, 366, 369, 383, 385, 387, 397, 399, 415, 417
 is under extforce 0.3e-3 Kelvin (in the Y dir) after 5000 steps of cmd

 RUN 1 STEP 15000 ORIENT Y/Z Sat Jul 30 22:53:44 2016 Page 1 of 1

Рисунок 3.9, б. – Структура кристаллита α -Fe в плоскости $\langle 100 \rangle$ при $T=900$ К ($K=8$)

Данные деформации инициируются бризерными и фононными колебаниями атомов [73]. Бризеры – это высокотемпературные многофононные колебания с высокой энергией [129, 137]. Они определяют значения предэкспоненциального множителя D_0 в формуле диффузии уравнения Аррениуса, отражая тем самым диффузионную подвижность атомов.

Фононные колебания – это низкоамплитудные нелинейные колебания атомов, определяющие энергию активации диффузии в системе атом-атом (экспоненциальный множитель в формуле Аррениуса). На рисунке. 3.10, а-в приведены бризерные и фононные колебания в зависимости от температуры.

Непосредственно моделирование точечных дефектов проводилось с помощью координационного числа K . При проведении опытов сначала определялся параметр решетки с учетом теплового расширения (постоянная решетки α -Fe при 20°C составляет около $2,87 \text{ \AA}$) для различных температур подбором среднего значения константы решетки (equilibrium lattice constant, пакет XMD). Эта величина (параметр решетки) составила $2,87 \text{ \AA} + 0,085 \dots 0,0925 \text{ \AA}$.

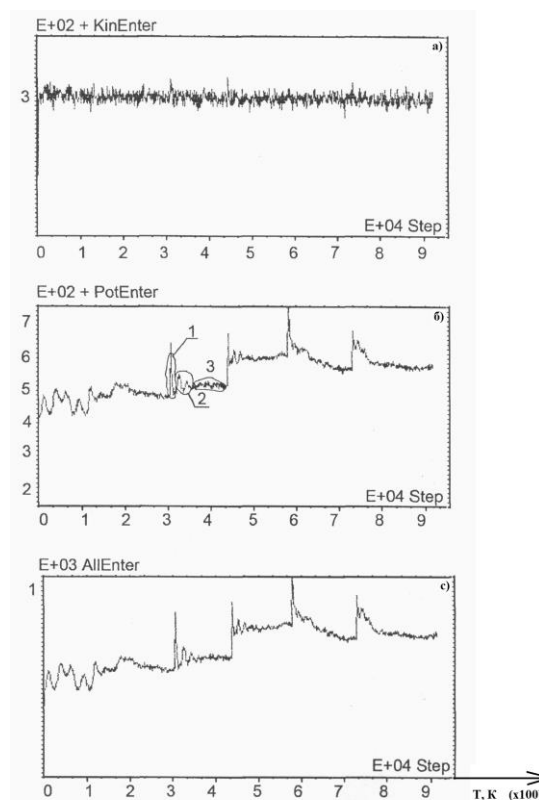


Рисунок 3.10. – Зависимость кинетической (а), потенциальной (б) и полной (в) энергий от температуры T : 1 – бризерные колебания; 2 – фоновые колебания

Далее был произведен расчет координационных чисел всех атомов (как количества их окружения) входящих в кристаллит для различных температур с помощью функции радиального распределения (RDF) пакета XMD. Результаты представлены на рис. 3.11. Из данного распределения видно, что при повышении температуры кристаллита растет количество атомов с координационным числом >8 и <8 (координационное число идеальной кристаллической решетки α -Fe $K=8$), что явно указывает на возникшие в результате теплового движения атомов структурные изменения в решетке. Численные значения на шкале r – это результат наложения температурного расширения решетки и тепловых колебаний атомов.

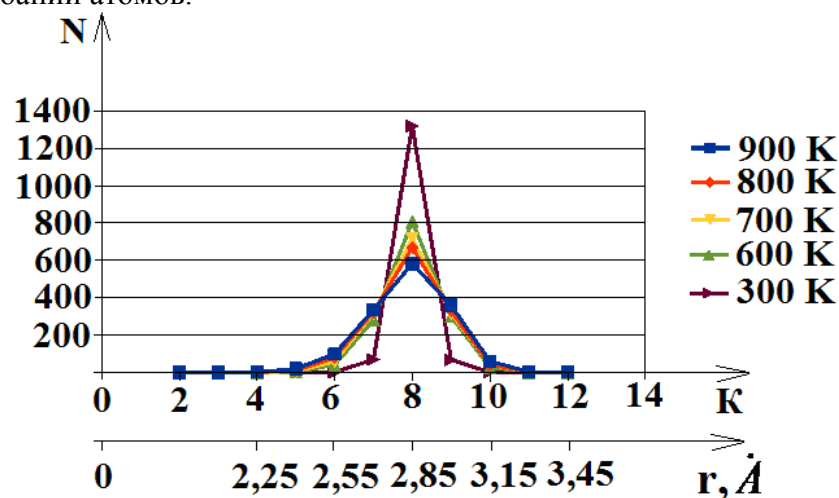


Рисунок 3.11. – Распределение координационных чисел кристаллита при различных температурах

При $K < 8$ происходит образование вакансий (при $K=7$ образуется одна вакансия и т.д.), при $K > 8$ образуются собственные междоузельные атомы (СМА) (при $K=9$ образуется

один междоузельный атом и т.д.). Симметричность распределения координационных чисел указывает на примерное равенство вакансий и СМА при различных температурах. Наглядное представление о данных процессах дает рисунок 3.12, а-б, где представлены снимки части описанного кристаллита (250 атомов), сделанные с помощью программы xmdview, входящей в состав пакета XMD, при температуре 900 К. Обращаем внимание на выделенные области с заметной деформацией кристаллической решетки в связи со скоплением СМА.

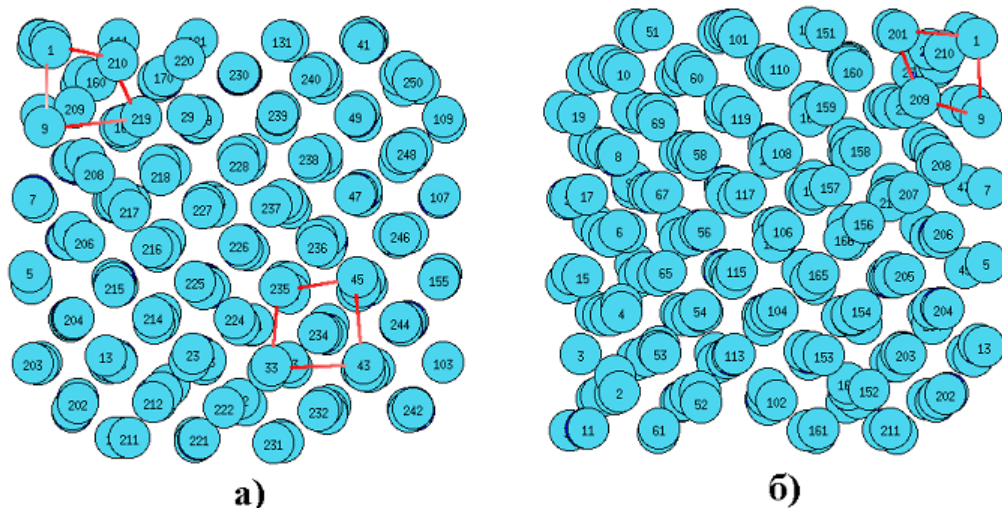
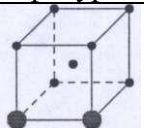
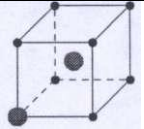
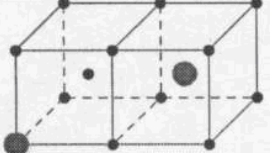


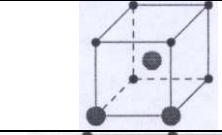
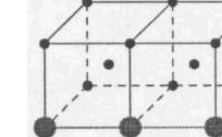
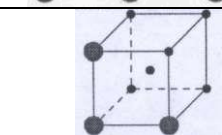
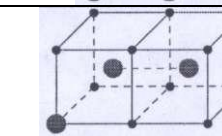
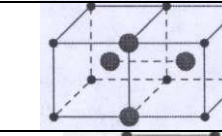
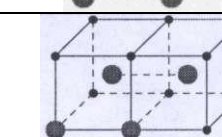
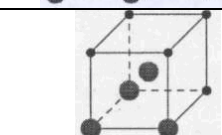
Рисунок 3.12. – Часть кристаллита α -Fe с вакансией (а) и СМА (б)

При $K < 7$ и $K > 9$ вакансии и СМА создают различные пространственные конфигурации. Максимальное количество вакансий и СМА $n=4$. Следуя работе [130], проанализируем данные конфигурации (табл. 3.2). В таблице 3.2 приняты следующие обозначения: E^F – энергия образования, E^B – энергия связи, V^R – релаксационный объем, $\Omega_0 = 23,64 \cdot 10^{-30} \text{ м}^3$ – объем идеальной решетки.

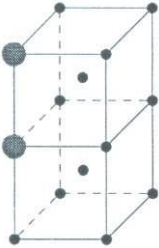
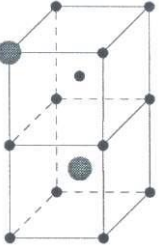
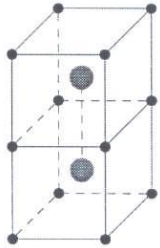
Наиболее устойчивой конфигурацией дивакансии обладает кластер $V_2^{(2)}$, имеющий тетрагональную симметрию, в котором вакансии располагаются на расстоянии вторых ближайших соседей в ОЦК решетке. Стабильные конфигурации тривакансии, тетравакансии и пентавакансии (V_3 , V_4 и V_5 , табл. 3.2) формируют наиболее компактные структуры в ОЦК решетке, имеющие соответственно орторомбическую и тетрагональную симметрию упругого поля.

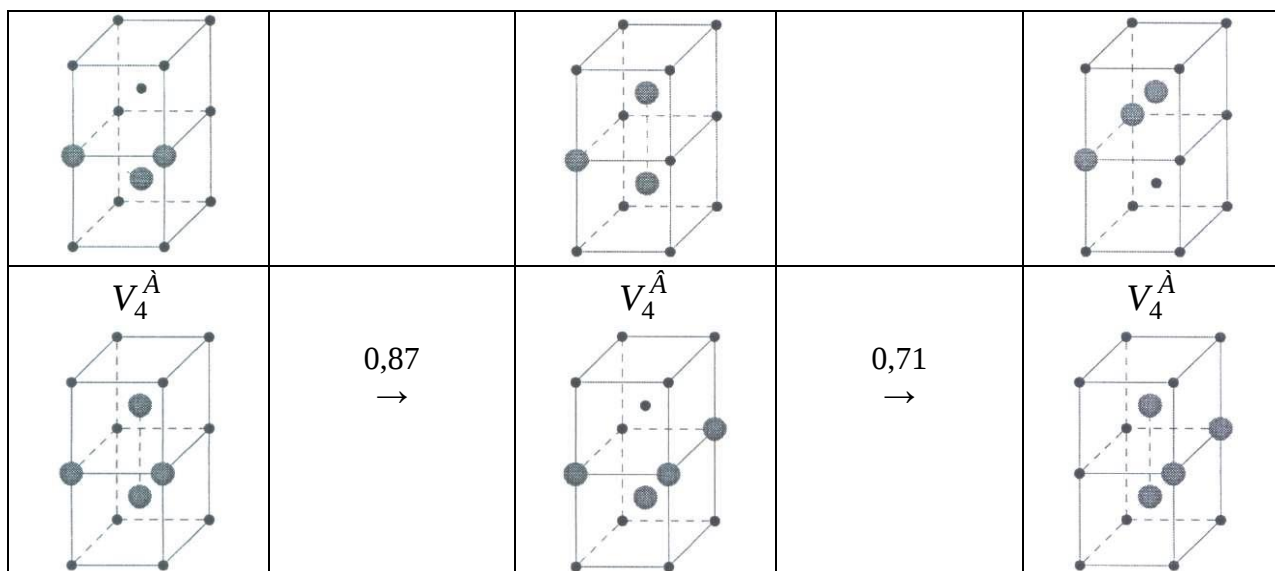
Таблица 3.2 – Свойства стабильных и метастабильных конфигураций, содержащих n вакансий в ОЦК α -Fe (● – вакансии, • – атомы Fe) [130]

Число n_V	Конфигурация	E^F , эВ	E^B , эВ	V^R , Ω_0	Симметрия
2		3,625	0,215	-0,36	Тетрагональная
2		3,762	0,077	-0,24	Тригональная
2		3,799	0,041	-0,29	Моноклинная

Число n_V	Конфигурация	E^F , эВ	E^B , эВ	V^R , Ω_0	Симметрия
3		5,301	0,244	-0,43	Орторомбическая
3		5,309	0,236	-0,59	Тетрагональная
3		5,337	0,208	-0,58	Орторомбическая
3		5,424	0,121	-0,47	Моноклинная
4		6,667	0,553	-0,54	Тетрагональная
4		6,752	0,469	-0,88	Тетрагональная
4		6,817	0,404	-0,62	Моноклинная
4		6,830	0,390	-0,61	Моноклинная

Дальнейшее изменение конфигураций вакансионных комплексов может происходить по миграционному механизму. Миграционный механизм менее энергозатратен, формируя тем самым наиболее стабильные конфигурации (табл. 3.3). Таблица 3.3 – Вероятные пути миграции и соответствующие им энергии активации (над стрелками приведены значения энергии миграции в эВ) [130]. Определим энергию бризерных и фононных волн (рис. 3.13).

$V_2^{(2)}$ 	0,70 →	$V_2^{(4)}$ 	0,53 →	$V_2^{(2)}$ 
V_3	0,62 →	V_3	0,62 →	V_3



Далее приводится расчет бризерных и фононных колебаний.

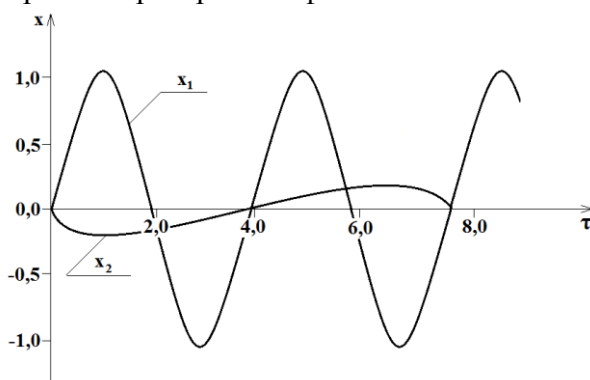


Рисунок 3.13. – Бризерные и фононные волны в α -Fe [137]

Минимальное соотношение частот $\frac{\omega_{\text{бр}}}{\omega_{\text{ф}}} = 2$, а максимальное соотношение амплитуд

$$\frac{A_{\text{бр}}}{A_{\text{ф}}} = 3.$$

Энергия упругих волн рассчитывается по формуле

$$E = \frac{1}{2} \rho A^2 \omega^2, \quad (3.17)$$

где ρ – плотность стали; A – амплитуда волны; ω – частота волны.

Для α -Fe $\omega_{\text{ф}} = 2,5 \cdot 10^{12}$ 1/с [106]. В данной работе моделировался спектр фононных и бризерных колебаний в кристаллите с числом атомов $n=100$.

Расчеты проводились по зависимости

$$D = \frac{1}{n} (A_i - A)^2, \quad (3.18)$$

где D – дисперсия колебаний; A_i – значения i -тых амплитуд при числе вакансий и СМА $k=1,2,3,4$ (рис. 3.9).

Значения плотности стали 25Х3М3НБЦА в зависимости от температуры взяты из работы [10]. Результаты расчетов по зависимости (3.5) дают значения удельной энергии $E_{\text{уд}}$, Дж/м². Определение энергии волны производится по формуле

$$E = E_{\text{уд}} \Omega, \quad (3.19)$$

где Ω – объем кристаллической решетки для α -Fe в зависимости от температуры.

Результаты расчетов приведены в таблице 3.4.

Дальнейшее преобразование вакансионных конфигураций связано с образованием вакансионных кластеров (пор). Объединение вакансий в кластеры является энергетически выгодным процессом. С точки зрения теории зарождения (при наличии в кристалле вакансионного пересыщения) должен происходить распад твердого раствора вакансий с образованием устойчивых вакансионных пор [130]. Определение числа вакансий n с помощью координационного числа K не позволяет определить конфигурацию вакансионных кластеров. Подобные исследования проведены в работе [130] (табл. 3.5).

Таблица 3.4 – Энергия бризерных и фононных волн

T, K	300	600	800	1000
$D \cdot 10^{20}, m^2$	0,08	0,095	0,10	0,12
$\omega \cdot 10^{-12}$	1	2	3	5
$A_i \cdot 10^{10}, m$	2,25	2,85	3,15	3,45
$A_\phi \cdot 10^{10}, m$	2,04	2,35	2,74	3,03
$A \cdot 10^{10}, m$	6,11	7,84	8,22	9,12
$\rho \cdot 10^{-3}, H \cdot c^2/m^4$	1,72	1,62	1,58	1,5
$\Omega \cdot 10^{30}, m^3$	28,07	28,15	28,23	28,4
$E_{\phi p} \cdot 10^{10}, Дж$	2,11	5,76	6,34	7,8
$E_\phi \cdot 10^{10}, Дж$	0,12	0,32	0,35	0,43
$E_{\phi p}, эВ$	3,25	7,03	10,1	13,8
$E_\phi, эВ$	0,18	0,39	0,56	0,77

Сравнение данных по энергии бризеров, приведенных в таблице 3.4 с результатами формирования вакансионных конфигураций (табл. 3.2, 3.3 и 3.5) позволяет сделать выводы, что на стадии нарушения термодинамического равновесия имеют место:

- 1) формирование вакансий ($n \geq 1$) во всем исследованном температурном диапазоне;
- 2) миграция вакансий в равновесное положение во всем температурном диапазоне;
- 3) формирование пор различных типов возможно при температурах $T > 800 K$;
- 4) при температурах $T \leq 800 K$ могут возникать промежуточные конфигурации атомов.

Дополнительно отметим, что согласно работе [130] формирование дислокационных петель маловероятно.

Процессы образования вакансий и собственных междоузельных атомов являются взаимосвязанными, так как атомы, покидающие узлы решетки под действием энергий бризерных и фононных колебаний перемещаются в соседние решетки. В этой связи важно определить равновесные и диффузионные свойства СМА.

Энергетические и кристаллографические свойства СМА были детально изучены в работе [130] (табл. 3.6).

Наиболее стабильной конфигурацией СМА является $\langle 110 \rangle$ гантельная конфигурация. Об этом свидетельствует значение релаксационного объема V^R , характеризующего интенсивность взаимодействия СМА с другими структурными дефектами. Менее стабильна $\langle 111 \rangle$ гантель.

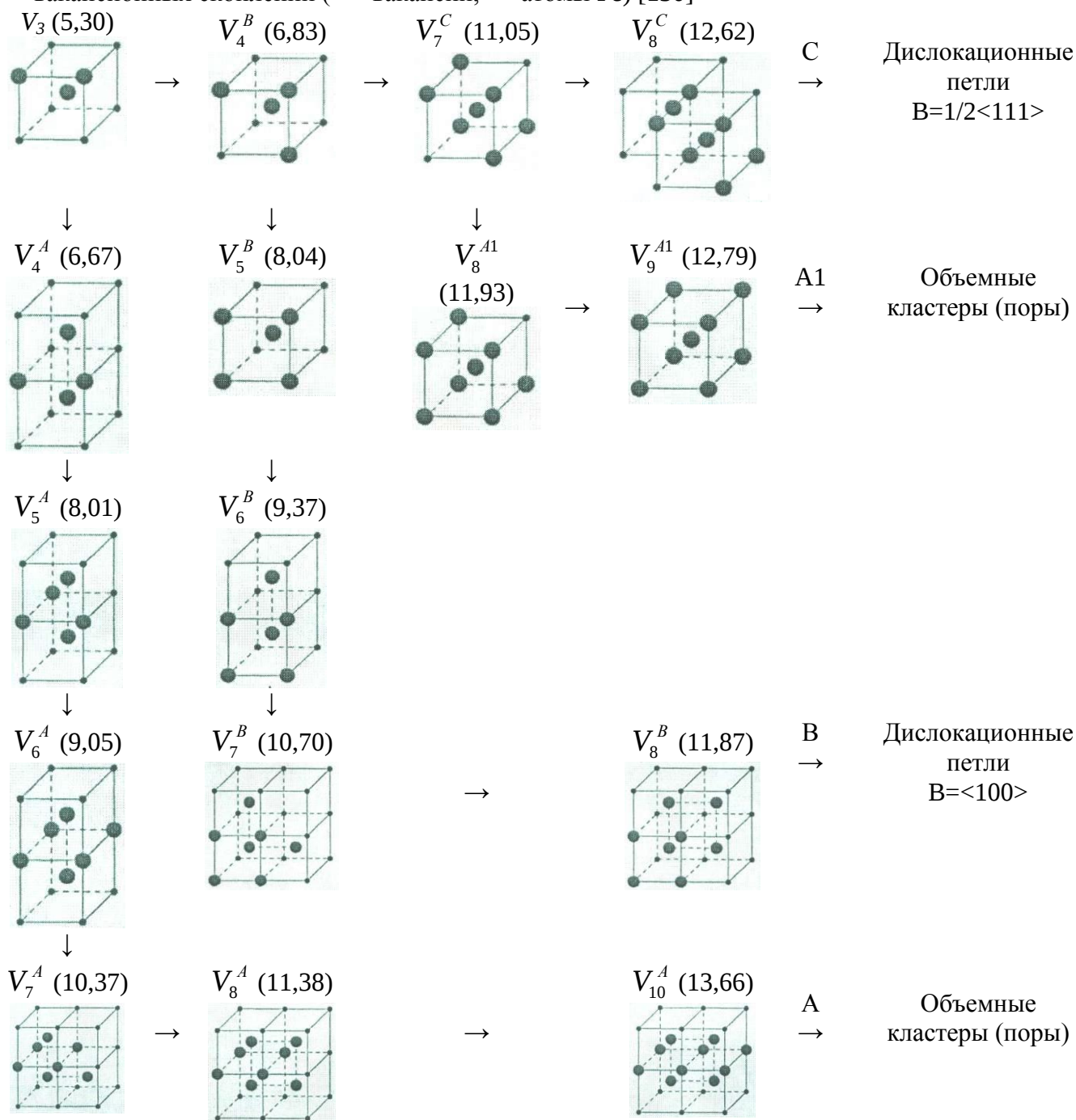
Под действием полей напряжений различные конфигурации СМА могут переориентироваться по различным механизмам миграции, то есть возникает процесс самодиффузии СМА. Как уже отмечалось ранее, предэкспоненциальный множитель D_0 в уравнении Аррениуса количественно определяется бризерами, а экспонента – фононами. Значение D_0 определялось по формуле Эйнштейна для 3^x -мерного пространства

$$D_0 = \frac{R^2}{6\tau}, \quad (3.20)$$

где R^2 – квадрат смещения СМА (значение дисперсии как функции частоты ω); $\tau = \frac{1}{\omega}$

– время смещения; Ω – частота брзерных колебаний.

Таблица 3.5 – Наиболее энергетически выгодные пути формирования объемных и плоских вакансионных скоплений (● – вакансии, • – атомы Fe) [130]



Примечание. Цифры в таблице указывают энергию образования комплексов (эВ)

Таблица 3.6 – Энергия образования E^F и релаксационный объем V^R для различных конфигураций СМА в ОЦК железе

Конфигурация СМА*	E^F , эВ	V^R , Ω
$\langle 110 \rangle$ гантель	4,384	1,480
СТ миграции $\langle 110 \rangle$ гантели	4,630	1,476
СТ реориентации $\langle 110 \rangle \rightarrow \langle 111 \rangle$	4,634	1,457
СТ реориентации $\langle 111 \rangle \rightarrow \langle 110 \rangle$	4,633	1,451

Конфигурация СМА*	E^F , эВ	V^R , Ω
<111> гантель	4,627	1,436
Краудион	4,635	1,442
Тетраэдрическая	5,149	1,286
Октаэдрическая	5,464	1,174
<100> гантель	5,618	1,171

* СТ – седловые точки процессов миграции и реориентации

Значение R можно определить по формуле

$$R = \frac{1}{n} \sqrt{A_i - \bar{A}}. \quad (3.21)$$

Значения искомых параметров приведены в таблице 3.4. В экспоненциальном множителе $\exp\left(-\frac{E_{акт}}{kT}\right)$ энергия активации $E_{акт}=E_{фон}$ (табл. 3.4).

«Окончательные значения параметров уравнения Аррениуса приведены в таблице 3.7.

Таблица 3.7 – Значения параметров диффузии в зависимости от температуры

T , К	300	600	800	1000
$D_0 \cdot 10^{10}$, м ² /с	1,30	2,0	5,0	10,00
$\exp\left(-\frac{E_{акт}}{kT}\right) \cdot 10^2$	1,30	0,9	0,4	0,25
$D \cdot 10^{12}$, м ² /с	1,69	1,9	2,0	2,50» [185, 186]

В результате действия диффузионных процессов происходит образование кластеров СМА за счет конденсации стабильных конфигураций СМА. В конечном счете,

образуются гексагональные дислокационные петли $\left(\frac{a}{2}\langle 111 \rangle\right)$ вектора Бюргерса, а в направлении <112> – петли, состоящие из дислокационных отрезков, обладающих минимальной энергией образования. Дислокационные петли состоят из 2, 3 и 4 атомов.

Рассчитанные энергетические характеристики ряда простейших СМА кластеров, обладающих минимальной энергией образования, представлены в таблице 3.8 [130].

Таблица 3.8 – Расчетные значения энергии образования E^F , релаксационного объема V^R и энергии связи E^B стабильных кластеров СМА I_{ns} в ОЦК железе

Конфигурация петель	Конфигурация	E^F , эВ	$V^R \cdot 10^{-29}$, Ω_0	E^B , эВ
	$I_2^{\langle 110 \rangle}$	7,88	2,84	0,89
	$I_2^{\langle 111 \rangle}$	7,98	2,89	0,78
	$I_3^{\langle 111 \rangle}$	11,04	4,26	1,23
	$I_3^{\langle 110 \rangle}$	11,16	4,32	1,11
	I_4	13,37	5,52	2,05

Согласно данным таблицы 3.8 дислокационные петли образуются при $T \geq 800$ К.

3.6.3 Моделирование межзеренных границ

Основу современной теории межзеренных границ составляют решеточные модели. В данных моделях основное внимание уделяется углам границ (большеугольные и малоугольные границы) и собственно толщине границы d . Согласно работе [138] экспериментальные значения толщин границ зерен составляют $d=(2 \dots 4)a$, где a – параметр кристаллической решетки. Однако, данные значения не отражают температурной зависимости значения d . Подобная зависимость приведена в работе [139]. В данной работе приводится количественная оценка конденсированного состояния бинарной системы, основанная на решеточной модели с использованием модели Гинсбурга-Ландау, учитывающей дальнедействующую часть ПМВ.

Предложена следующая зависимость для определения значения d

$$d = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{k^{(2)}}{3\bar{T}\bar{\Omega}T_c}} \alpha \frac{1}{\sqrt{\bar{T}}}, \quad (3.22)$$

где $k^{(2)}$ – “условный” межатомный потенциал (для α -Fe $k^{(2)}=4,3$ эВ); $\bar{T} = \frac{T_c - T}{T_c}$ – относительная температура (для α -Fe $T_c=1073$ К); $\alpha=2,3 \cdot 10^3$ – коэффициент приведения координат решеточной модели и модели Гинсбурга-Ландау; $\bar{\Omega}$ – предельное значение обратной плотности атомов, имеющая размерность объема (м^3).

$$\bar{\Omega} = \Omega^{(1)} n, \quad (3.23)$$

где $\Omega^{(1)}$ – атомная плотность в решетке; n – число решеток в межзеренной границе.

Для α -Fe $\Omega^{(1)}=7,5 \cdot 10^{-29} \text{ м}^3$, $n \approx 10^3$, откуда $\bar{\Omega}=7,5 \cdot 10^{-23} \text{ м}^3$.

Результаты расчетов по формуле (3.23) приведены в таблице 3.9.

Таблица 3.9 – Значения толщин межзеренных границ для α -Fe и FeS₂ в зависимости от температуры

$T, \text{ K}$	300	400	500	600	700	800	900	1000
$d, \text{ \AA}$	2,39	2,6	3,06	3,7	4,67	6,97	10,81	24

Таким образом, относительно параметра решетки a $d=(0,83 \dots 8,36)a$. Для моделирования межзеренной границы в программе XMD используется команда “move”, с помощью которой производится совмещение кристаллитов, участвующих в создании межзеренной границы. Данная команда осуществляет внедрение двух кристаллитов друг в друга с энергией, зависящей от температуры. Данная энергия учитывает коротко- и дальнедействующие части ПМВ кристаллитов, имитируя тем самым процесс создания конденсируемого состояния межзеренной границы. Таким образом, создается ее межзеренное строение определенной толщины d . Для примера на рис. 3.14, а-б показан процесс формирования межзеренной границы для γ -Fe и Fe₃(CN).

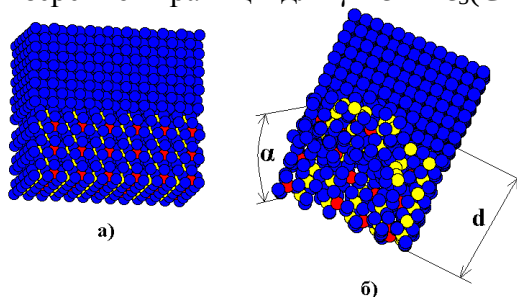


Рисунок 3.14. – Моделирование процесса формирования межзеренных границ γ -Fe-Fe₃(CN) ($T=600$ К): а – исходное состояние; б – конечное состояние

(● – γ -Fe; ● – C; ● – N)

Поскольку $\alpha=150^\circ$, то межфазная граница большеугловая.

3.7 Визуализация дефектов

При визуализации дефектов строения решеток интерес представляют только дефектные участки кристаллитов, атомы которых отличаются от атомов совершенной решетки различными значениями таких характеристик, как энергия, напряжение, локальное окружение. Следуя работе [140], в ММД целесообразно использовать функцию радиального распределения атомов (ФРРА).

ФРРА – важнейшая характеристика атомной структуры, так как характеризует корреляцию в расположении атомов [141, 136]. ФРРА значительно наглядна, поскольку дает относительную вероятность нахождения пары атомов на определенном расстоянии один от другого. Пики кривых ФРРА соответствуют межъядерным расстояниям, но они несколько размыты из-за тепловых движений атомов. На рисунке 3.15 приведены ФРРА для идеального кристалла и для кристалла, содержащего винтовую дислокацию.

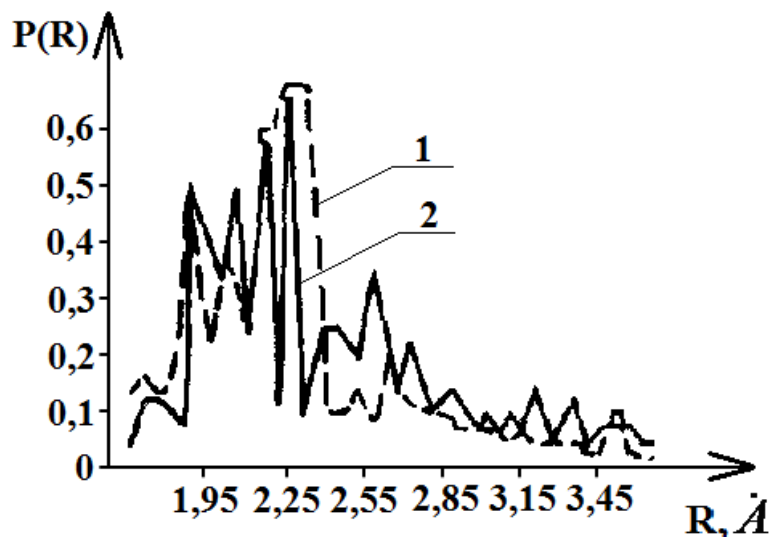


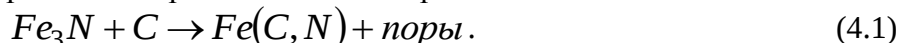
Рисунок 3.15. – ФРРА идеального кристалла α -Fe (1) и винтовой дислокации (2) ($T=900$ К)

Графики показывают, что ФРРА идеального кристалла более размыта, чем ФРРА винтовой дислокации, которая концентрируется вокруг оси дислокации.

Глава 4

Моделирование процесса эволюции трещин и пор и критерии оценки ресурсной долговечности

Возникновение технологических (“врожденных”) пор и трещин в процессе никотрирования происходит по двум возможным механизмам [142]. В никотрированном покрытии процесс порообразования происходит за счет реакции



Поры образуются после 4 ... 6 часов насыщения, формируясь, как правило, около крупных частиц со стороны диффузионного фронта (рис. 4.1 а). В то же время в α -матрице диффузионной зоны реализуется другой механизм согласно реакции $N+N \rightarrow N_2$ (поры). Топографическими центрами выделения молекулярного азота и зарождения пор в данном механизме являются субструктурные дефекты и, в первую очередь, полигональные нагромождения (рис. 4.1 б). Формирование пористости в γ - и ε -фазах можно объяснить высокой метастабильностью последних. В таком случае главную роль в порообразовании играет фактор давления молекулярного азота, находящегося в равновесии с атомарным азотом, растворенным в кристаллической решетке. Согласно данным работы [142] данное давление имеет порядок $P=(2 \dots 5) \cdot 10^{10}$ Па. Под влиянием внутреннего давления поры вначале образуются на мало- и большеугловых границах, затем главным механизмом роста пор является деформация скольжения кристаллической решетки. Давление роста пор $P_{пор} \approx 10^{11}$ Па.

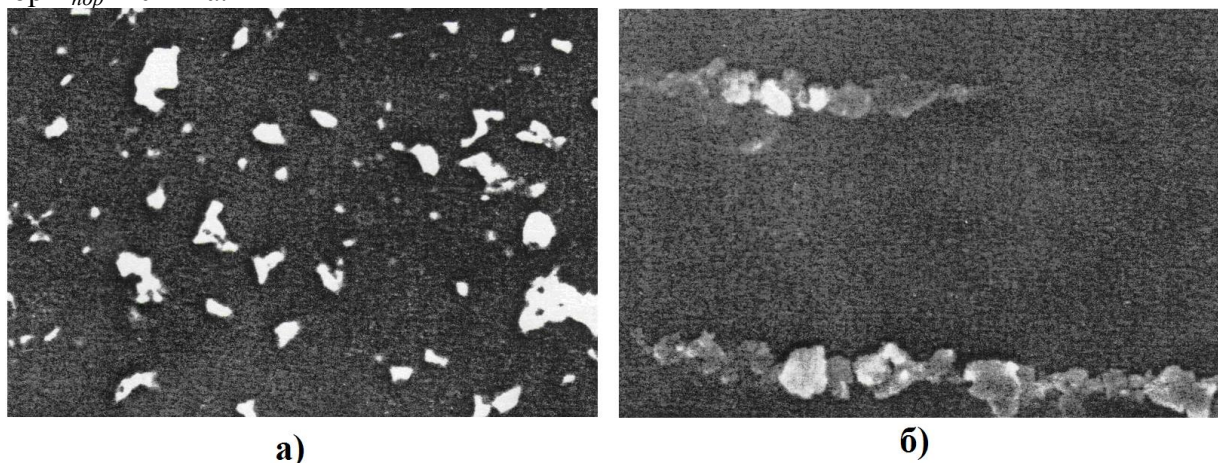


Рисунок 4.1. – Порообразование в поверхностной зоне (негативное изображение):
а – карбонитридное покрытие; б – диффузионная зона

Количественно пористость оценивается объемной долей пор f

$$f = \frac{\pi}{6} \left(\frac{\bar{D}}{\bar{d}} \right)^2, \quad (4.2)$$

где $\bar{D}$ – средний размер пор; $\bar{d}$ – среднее расстояние между порами.

Численно объемная доля пор f приравнивается относительной площади, занимаемой этими дефектами в произвольном плоском сечении образца. В таком случае, параметр f можно принять за вероятность F появления пор в заданной зоне. Оценка значений f при 8-ми часовом насыщении и газовом соотношении R (50/50), осуществленная по 30 фотографиям, приведена в таблице 4.1.

Проведенные металлографические исследования поверхностной зоны показали малое количество микротрещин, идущих от поверхности вглубь зоны. Непосредственно в объеме поверхностной зоны количество трещин заметно возрастает. Их наличие

объясняется наличием пор. Вокруг пор возникает концентрационное напряжение $\sigma_{\text{конц}}$, активизирующее процесс трещинообразования. Согласно работе [142]

$$\sigma_{\text{конц}} = \left(\frac{2F_s E}{\pi} \right)^{0,5} \sqrt{\frac{\bar{D}}{\bar{d}}}, \quad (4.3)$$

где $F_s = 3,4 \cdot 10^3$ Дж/м³ – удельная свободная энергия; $E = 2,15 \cdot 10^{11}$ Па – модуль упругости.

Таблица 4.1 – Оценка объемной пористости поверхностной зоны

Зона	Карбонитридная			Диффузионная		
Пористость	$\bar{D}$, мкм	$\bar{d}$, мкм	f	$\bar{D}$, мкм	$\bar{d}$, мкм	f
Значение	4,5	11,0	0,09	3,0	8,0	0,08

Откуда $\sigma_{\text{конц}} = 2,6 \cdot 10^7 \sqrt{\frac{\bar{D}}{\bar{d}}}$. Следовательно, $\sigma_{\text{конц}} \approx 1,36 \cdot 10^7$ Па. Под действием

$\sigma_{\text{конц}}$ между порами может возникать микротрещина. Объемная пористость микротрещин, учитывая, что вокруг поры может возникнуть, по крайней мере, четыре микротрещины

$$f = 4 f_{\text{пор}} \frac{S_{\text{тр}}}{S_{\text{пор}}} \approx 1,33 f_{\text{пор}}, \quad (4.4)$$

где $S_{\text{тр}}$ и $S_{\text{пор}}$ – соответственно площадь трещин и пор.

Поры и трещины являются основными структурными элементами, определяющими процессы усталостного разрушения поверхностной зоны трения под действием внешнего давления – термических ударов и, как следствие, восходящей диффузии. Динамика изменения пор и трещин зависит от начальной стадии и действия напряжений восходящей диффузии – $\sigma_{\text{диф}}$ и $\sigma_{\text{цикл}}$.

В кинетике изменения пор и трещин следует выделить два этапа: этап “залечивания” технологических пор и трещин и этап возникновения новых пор и трещин в образующихся вторичных структурах. Физическая природа и действующие механизмы на данных этапах различны и требуют отдельного рассмотрения. В методологическом отношении анализ данных этапов принципиально не меняется: результаты моделирования тестируются данными теоретических и экспериментальных исследований.

4.1 Моделирование процесса залечивания технологических пор и трещин

Залечивание трещин и пор происходит на начальном этапе действия восходящей диффузии под действием динамического сжатия $\sigma_{\text{цикл}}$ и напряжения $\sigma_{\text{диф}}$, определяющих диффузионный процесс в поверхностной зоне. Устойчивость трещин и пор к схлопыванию определяется зависимостью [143]

$$l > \sqrt{bL}, \quad (4.5)$$

где b – вектор Бюргерса; L – длина технологических пор и трещин.

Принимая значения $b = 2,25 \cdot 10^{-10}$ м, $L = 10^{-5}$ м, получим $l > 5 \cdot 10^{-7}$ м.

Так как размеры большинства пор и трещин удовлетворяют условию (4.5), то процесс произвольного схлопывания отсутствует. В то же время, как показали исследования [144, 145], при динамическом сжатии данный процесс реализуется, причем сжатие происходит по дислокационному механизму. При сжатии увеличивается подвижность дислокаций, приводящая к изменению волновой картины и сопутствующему увеличению температур [121, 146]. В работах [147, 148] установлено, что при некоторых режимах динамического нагружения вблизи трещины происходит активизация

дислокационных источников, сопровождающаяся заметным уменьшением трещины, то есть имеет место процесс залечивания трещины.

В последние годы для изучения динамики залечивания пор и трещин на атомном уровне используется молекулярно-динамическое моделирование. В работе [148] приведены результаты моделирования структуры нитевидного железа при одноосном растяжении. Показано, что при различных уровнях деформации происходят полиморфные превращения $\alpha - Fe \Leftrightarrow \gamma - Fe \rightarrow \varepsilon - Fe$, приводящие к залечиванию указанных дефектов. В работе [149] исследована эволюция микротрещины в алюминии. Основные результаты работы состоят в следующем: сжимающие напряжения или нагрев до 650 ... 850 К приводит к залечиванию нанотрещины, сопровождающемуся испусканием и движением дислокаций. В работе [150] исследована эволюция атомной структуры алюминия в условиях импульсных внешних нагрузок и больших пластических деформаций. Показано, что в этих условиях деформационный процесс происходит преимущественно по двойниковому механизму. В работе [151] детально исследован процесс залечивания микротрещин и пор в алюминии и никеле в условиях наиболее сложного внешнего воздействия: импульсного нагружения и ионной имплантации. Подобное воздействие приводит к ускорению процесса залечивания. Представляется, что аналогичные процессы имеют место и при действии восходящей диффузии в условиях трения.

Данное предположение подтверждается экспериментальными результатами. Исследовались структуры образцов в исходном состоянии (рис. 4.2 а) и на начальной стадии нормального износа (рис. 4.2 б). В исходном образце в никотрированной зоне преобладают поры диаметром (2 ... 8) мкм, в переходной зоне – горизонтальные трещины длиной $l \sim 10$ мкм. В конце начальной стадии трения зона никотрированного слоя исчезла, а трещины и поры практически залечились.

Для более детального исследования процесса залечивания трещин и пор использовали ММД. Для моделирования был сформирован кристаллит α -Fe из $6 \cdot 10^4$ атомов. В кристаллите формировалась шарообразная пора диаметром $4 \cdot 10^{-9}$ м (рис. 4.3 а).

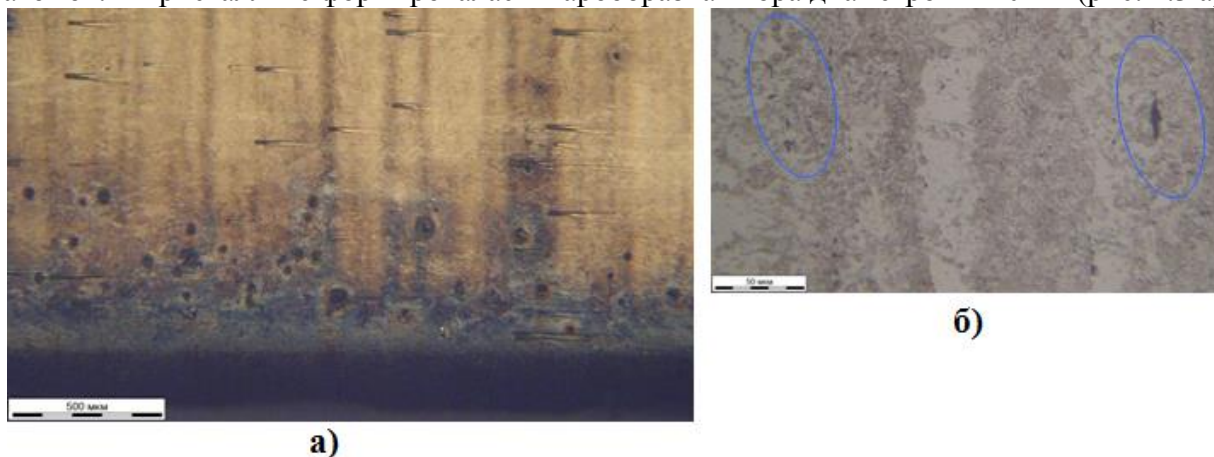


Рисунок 4.2. – Микроструктура поверхностной зоны никотрированной стали 25Х3МЗНБЦА: а – исходное состояние (никотрированный слой и переходная зона); б – после начальной стадии трения

При температуре 600 К кристаллит подвергался сжатию с напряжением $\sigma_{цикл}$ и одновременному воздействию диффузионного напряжения $\sigma_{диф}$. После 1500 шагов моделирования ($\tau = 1,5 \cdot 10^{-13}$ с) произошло частичное залечивание поры (рис. 4.3 б). Залечивание поры полностью завершилось после 2000 шагов ($\tau = 2,5 \cdot 10^{-13}$ с) (рис. 4.3 в).

Аналогичные процессы имеют место и при залечивании трещин. Под влиянием диффузионных процессов размеры трещины уменьшаются с одновременным изменением ее конфигурации (рис. 4.4 а-в).

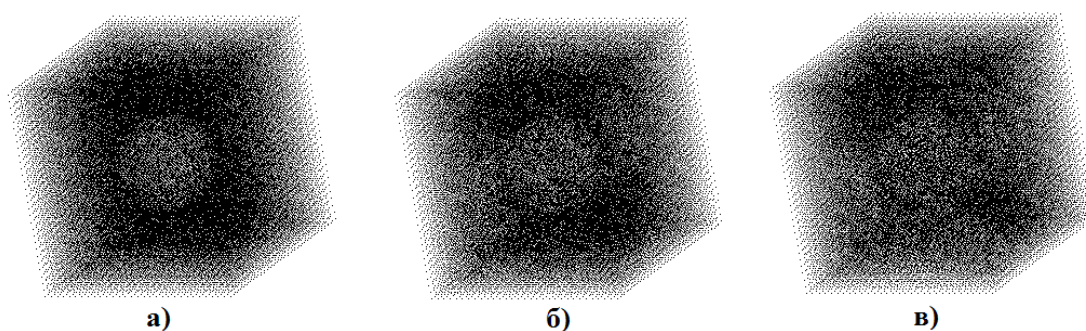


Рисунок 4.3. – Стадия залечивания пор: а – $\tau=0$; б – $\tau=1,5 \cdot 10^{-13}$ с; в – $\tau=2,5 \cdot 10^{-13}$ с

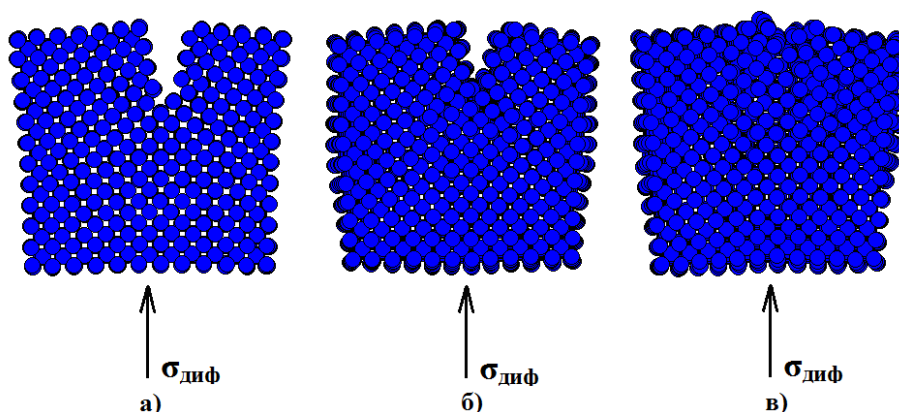


Рисунок 4.4. – Моделирование процесса залечивания трещин (аксонометрия): а – 1000 шагов; б – 5000 шагов; в – 10000 шагов моделирования

Процесс залечивания трещины в кристаллографическом направлении $[010]$ представлен на рисунке 4.5 а-в.

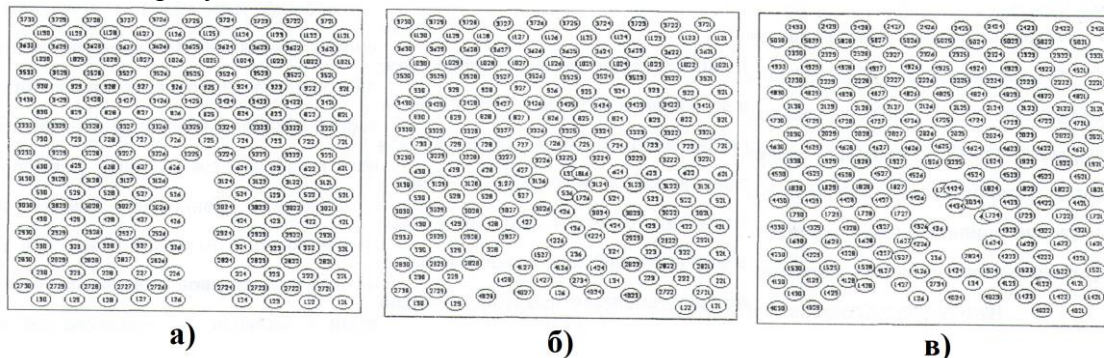


Рисунок 4.5. – Атомная структура соседних плоскостей кристаллита $[010]$ вблизи устья нанотрещины $[152]$: а – исходное состояние; б, в – после сжатия и действия диффузионного механизма

Видно, что атомы расположенные вблизи вершины трещины, вовлекаются внутрь кристаллита. Перемещение происходит не атомными рядами, а отдельными фрагментами. В результате диффузии на месте бывшей трещины появляется область, обогащенная вакансиями, фактически происходит “самозалечивание” трещины.

Обобщая результаты моделирования, следует отметить, что трещины, как и поры, находятся в области хаотического столкновения атомов. В результате микронесплошности должны каким-либо образом трансформироваться. Каскад столкновений у края трещины, где напряжения и деформации максимальны, создает квазижидкое состояние. При диссипации энергии и релаксации внутренних напряжений в этой области это приводит к уменьшению энергии, соответствующей процессу залечивания трещин и пор.

4.2 Моделирование процесса дислокационного упрочнения поверхностной зоны

Анализ литературных источников [69-72] показал, что возникающие в результате действия восходящей диффузии остаточные напряжения $\sigma_{дискл}$ значительно превосходят напряжения, необходимые для зарождения дислокаций. В результате осуществляется их движение со скоростью $V_{дискл}$ и последующее дислокационное упрочнение вследствие торможения дислокаций. При этом в диапазоне исследуемых скоростей трения $V_{тр}=(3 \dots 10)$ м/с скорости деформаций $\dot{\epsilon}=(10^8 \dots 10^9)$ 1/с, что значительно превосходит пороговые значения ($\dot{\epsilon} \approx 10^3 \dots 10^4$) 1/с действующих при формировании дислокаций скоростей деформации. Следовательно, речь следует вести о высокоскоростном нагружении исследуемых сталей. Действующих напряжений оказывается достаточно для динамического преодоления препятствия типа барьера Пайерлса-Набарро без дополнительного вклада тепловых флуктуаций. Доминирующим механизмом торможения дислокаций становится перекачка энергии дислокаций в колебания кристаллической решетки или в электронную подсистему. Скорость дислокаций в динамической области падает с ростом температуры.

Другой особенностью моделирования дислокационного упрочнения является необходимость учета масштабных факторов – пространственных и временных. Дело в том, что модельные представления физико-механических свойств кристаллов отличны от аналогичных свойств натуральных образцов. Поэтому использование при моделировании высокоскоростного нагружения и необходимость учета масштабных факторов не позволяет автоматически учитывать особенности пластического течения в используемых феноменологических моделях пластичности. В этой связи становится актуальной разработка моделей, опирающихся на рассмотрение зарождения и движения дислокаций – элементарных носителей пластичности, адекватных аналогичным процессам в натуральных образцах.

4.2.1 Моделирование процесса формирования краевых дислокаций

Результаты моделирования базируются на данных основополагающей работы [69]. Моделируется действие твердого сферического индентора посредством сильно отталкивающего потенциала

$$V(r) = A\theta(R-r)(R-r)^3, \quad (4.6)$$

где $A = 56 \frac{nN}{A^2}$ – модель сферического индентора с радиусом $R=10 \text{ \AA}$; $\theta(R-r)=1\dot{A}$

– стандартный шаг индентирования; r – расстояние от атома до центра сферы.

Энергия отталкивания атомов изменяется от максимальной в центре сферы ($r=0$) $V(r)=2,8 \cdot 10^4$ эВ до $V(r)=0$ на сферической поверхности ($r=R$). При этом отталкивающая сила изменяется от $F=1,75 \cdot 10^{-6}$ Н ($r=0$) до $F=0$ ($r=R$). Для α -Fe сила взаимодействия атомов $F \approx 5 \cdot 10^{-9}$ Н при использовании ПМВ Д. Фаркаш. Следовательно, большинство атомов в сферическом инденторе будут перемещаться с кристаллической решеткой или разрывать межатомные связи.

После каждого шага индентирования $\theta(R-r)=1\dot{A}$ осуществлялось снятие напряжений (релаксация) путем уменьшения температуры до $T=0$ К с дальнейшим

выходом на заданные температуру и давление. В результате описанной процедуры происходит процесс расщепления полной дислокации, энергетически менее выгодной для ОЦК-решетки, на две частичные краевые дислокации

$$\frac{a}{2} [1\bar{1}1] \rightarrow \frac{a}{4} [1\bar{1}2] + \frac{a}{4} [1\bar{1}0], \quad (4.7)$$

где a – постоянная решетки.

Так как атомы в ядре дислокации, а также в промежутках между разбежавшимися частичными дислокациями образуют дефекты в упаковке решетки, их можно выделить на основании параметров, характеризующих ближайшее окружение частиц.

Анализ положения атомов (рис. 4.6) производился на основании расчета координационного числа K_i и параметра центральной симметрии для каждого атома P

$$P = \sum_{i=1,4} [R_i + R_{i+4}]^2, \quad (4.8)$$

где R_i и R_{i+4} – векторы, характеризующие четыре пары атомных связей в ОЦК-решетке.

Для моделирования был сформирован кристаллит из $3,1 \cdot 10^4$ атомов. Значения параметра P приведены на рис. 4.6 а-в. Красным цветом обозначены атомы, находящиеся в районе границы дислокации, желтым – внутри дислокации (ядро), синим – атомы решетки, находящиеся в равновесном состоянии.

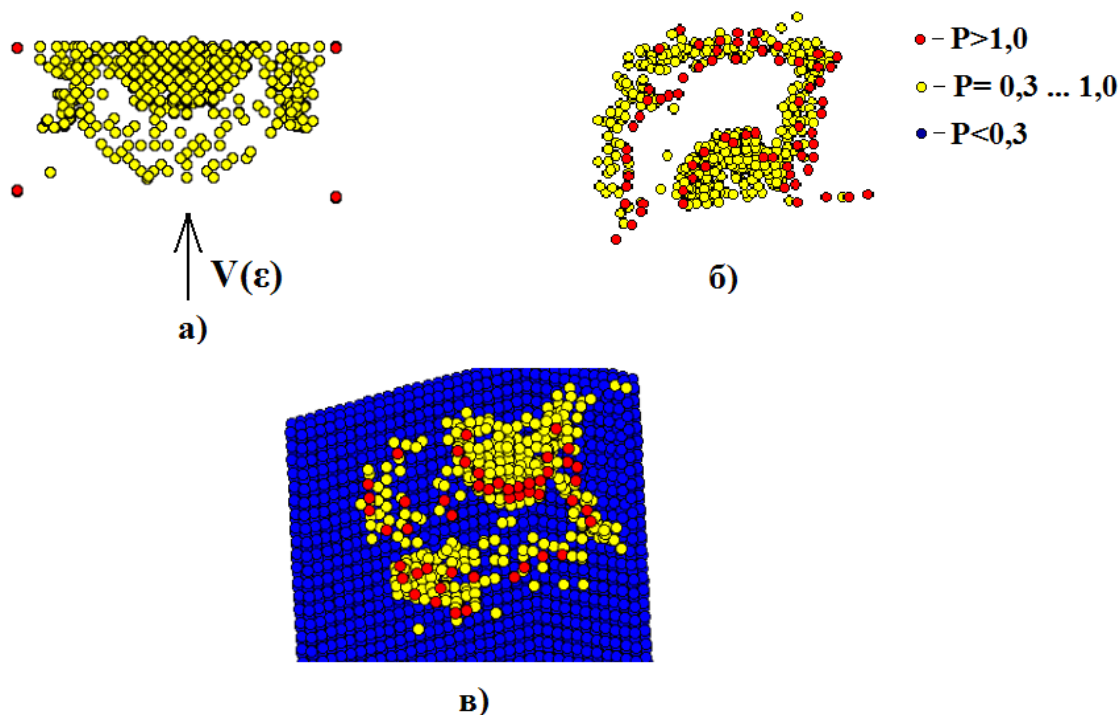


Рисунок 4.6. – Моделирование процесса формирования краевой дислокации в α -Fe: а – начальная стадия формирования дислокации; б – начало процесса раздвоения дислокации; в – раздвоенная дислокация

4.2.2 Исследование процесса перемещения краевых дислокаций под действием ударного дислокационного напряжения $\sigma_{\text{дисл}}$

Для исследования скорости перемещения дислокаций $V_{\text{дисл}}$ и дислокационного упрочнения используются два подхода. В работе [72] основное внимание уделяется масштабному фактору: степени соответствия результатов моделирования ММД

результатам теоретических и экспериментальных исследований в континуальном приближении.

В статье [70] используется другой подход: результаты моделирования ММД используются при решении системы дифференциальных уравнений механики сплошных сред. Согласно работе [72] с учетом влияния поверхности трения и исключения релятивистского фактора уравнение для скорости дислокаций в континуальном приближении имеет вид

$$\frac{m_0}{1 - \left(\frac{V}{c}\right)^2} \frac{dV}{d\tau} = \sigma_{эфф} b - \alpha \frac{3kT}{10b^2} \left(\frac{V}{c}\right), \quad (4.9)$$

где $m_0 = 0,25 \cdot 10^{-16}$ Н/м – погонный вес дислокаций для α -Fe; $c = \sqrt{\frac{G}{\rho}}$ – скорость звука,

соответствующая касательным напряжениям; $G = 0,83 \cdot 10^{11}$ Па – напряжение сдвига; $\rho = (7,58 \dots 7,38) \cdot 10^3$ Н·с²/м⁴ – плотность стали в диапазоне $T = 500 \dots 1000$ К; $b = 2,25 \cdot 10^{-10}$ м – вектор Бюргерса; k – постоянная Больцмана; $\alpha = 0,98$ – безразмерная градуирующая константа.

Первый член в правой части уравнения (4.9) – это движущая сила для дислокаций, второй член отражает диссипацию энергии вследствие дислокационно-фононной деформации.

Эффективная деформация $\sigma_{эфф}$ определяется следующим образом

$$\sigma_{эфф} = \begin{cases} 0 & \sigma \leq \sigma_1 + \frac{\sigma_0}{M} \\ M(\sigma - \sigma_1) - \frac{\sigma_0}{M} & \sigma > \sigma_1 + \frac{\sigma_0}{M} \end{cases}, \quad (4.10)$$

где $\sigma_0 = 0,04$ ГПа – напряжение, которое определяет начало процесса образования дислокаций для стали [10]; $M = \cos\theta = \frac{1}{\sqrt{3}} = 0,578$ – коэффициент ориентации

плоскостей скольжения [71]; σ_1 – напряжение, зависящее от напряжения σ_* , которое определяет устойчивость ядра дислокации. Величина σ_* является тензором напряжений в континуальном приближении (глобальный тензор напряжений)

$$\sigma_* = \frac{1}{M} \sum_{ij}^{N_*} \beta'_{mk}, \quad (4.11)$$

где N – общее количество атомов в исследуемом кристаллите при моделировании; N_* – число активных атомов; β'_{mk} – тензор дипольной силы для каждого атома (локальный тензор напряжений)

$$\beta'_{mk} = \frac{1}{\Omega'} \sum_{(j \neq 0)}^N f_k^{ij} r_k^{ij}, \quad (4.12)$$

где f_k – вектор силы между атомами; r_k – смещение вектора между атомами i и j ; N – число соседних атомов; Ω' – атомный объем.

Уравнения (4.11) и (4.12) используются для определения скорости перемещения дислокаций, учитывая масштабный фактор σ_* . Масштабный временной фактор

учитывается с помощью изменения скорости деформации $\dot{\varepsilon} = \frac{\varepsilon}{\tau}$.

$$\sigma_1 = \frac{x_0}{x} \sigma_*, \quad (4.13)$$

где x_0 – глубина зарождения дислокаций от поверхности трения. Согласно работе [71] $x_0 = \bar{S}$, где $\bar{S}$ – средний шаг между вершинами шероховатости поверхности.

Для субшероховатости поверхности трения $\bar{S} = 0,39 \cdot 10^{-9}$ м [97]. Этому значению соответствует глубина действия термического удара, вызывающего движение дислокаций и дислокационное упрочнение: $h = (0,1 \dots 0,3) \cdot 10^{-6}$ м [131]. Таким образом, варьируя размерным (N) и временным ($\dot{\epsilon}$) факторами, можно для моделирования получить значения $\sigma_{эфф}$, идентичным по своему действию значениям в континуальном приближении.

Рассмотрим решение уравнения (4.9) для α -Fe: $\beta'_{mk} = 7,05 \cdot 10^{10}$ Па, $\sigma_I = 1,06 \cdot 10^9$ Па (при $\frac{x_0}{\chi} = 0,625$), $\sigma_{эфф} = 1,45 \cdot 10^3$ Па, $c = 3,26 \cdot 10^3$ м/с. Уравнение (4.8) решалось численным методом Рунге-Кутты, результаты приведены на рис. 4.7. Анализ графиков, приведенных на рис. 4.7 показывает, что с увеличением величины $\sigma_{дисл}$ скорости дислокаций сближаются, стремясь к предельному значению $V_{зв} = 3,26 \cdot 10^3$ м/с.

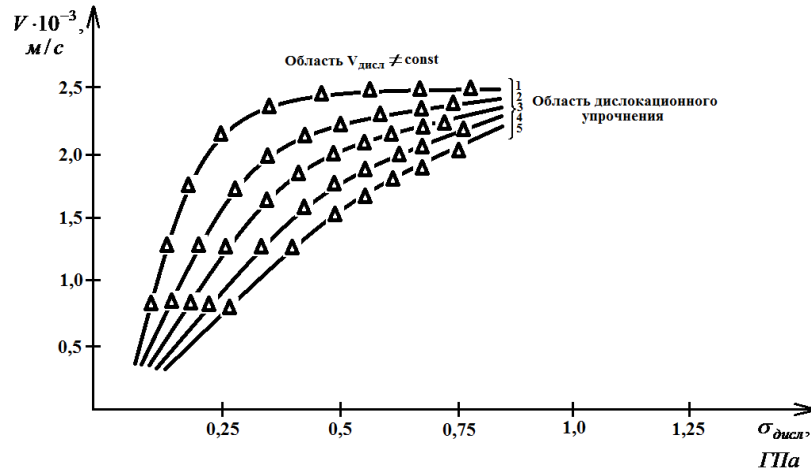


Рисунок 4.7. – Зависимость скорости дислокаций V от касательного (сдвигового) напряжения $\sigma_{дисл}$ для различных температур T ($\dot{\epsilon} = 10^9$ 1/с):
1 – $T = 100$ К; 2 – $T = 300$ К; 3 – $T = 500$ К; 4 – $T = 800$ К; 5 – $T = 1000$ К;
——— – расчетные скорости; Δ – результаты моделирования

Помимо аналитического определения $V_{дисл}$ осуществлялось модельное определение данного параметра с помощью ММД. Схема моделирования предложена в работе [72] и модифицирована в работе [70]. Периодические граничные условия применяются не только вдоль оси краевой дислокации (ось x), но и вдоль направления вектора Бюргерса. В этом случае систему можно рассматривать как массив дислокаций, повторяющихся во времени. Схема предложенной расчетной ячейки представлена на рис. 4.8. Вырезанный из идеального кристалла α -Fe блок размером $L_b(H+R+F)L$ делится на три части: неподвижную F , подвижную R и расчетную $M(H)$. Положения атомов в области F фиксируются (замораживаются); атомы в области R перемещаются по оси x ; атомы в области M находятся в свободном состоянии.

Создание единичной дислокации происходит по схеме, рассмотренной в п.4.2.1 путем сжатия атомных плоскостей по оси z . Затем осуществляется снятие ограничений на движение частиц блока M по оси x со скоростью V_R с последующей релаксацией с выводом на заданные температуру и давление (по оси z).

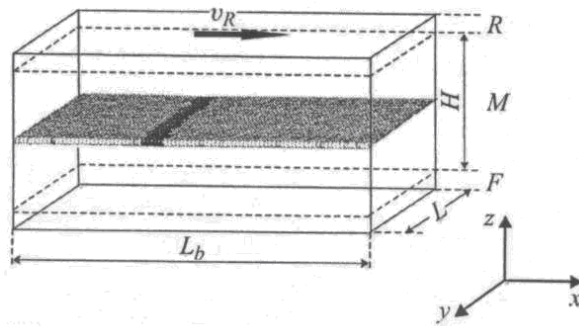


Рисунок 4.8. – Схема модели для расчета поведения дислокации в ОЦК-кристалле под действием сдвига. Показаны только атомы, находящиеся в плоскости скольжения дислокаций. Темные атомы – дефект упаковки между двумя частичными дислокациями.

M – часть ячейки со свободными атомами, F – область с фиксированными атомами, R – область атомов в виде абсолютно твердого тела, которая движется в направлении оси x с заданной скоростью V_R .

При моделировании основным управляющим фактором является количество атомов в моделируемом кристалле n (масштабный фактор). Согласно данным, приведенным в работе [72] при увеличении n параметры кривой Гука при сдвиге ведут себя разнонаправленно: модельные напряжения $\sigma_{\text{мод}}$ уменьшаются, стремясь к континуальным значениям ($\sigma_{\text{мод}} \rightarrow \sigma_{\text{конт}}$), модельные деформации $\varepsilon_{\text{мод}}$ увеличиваются, стремясь к континуальным значениям ($\varepsilon_{\text{мод}} \rightarrow \varepsilon_{\text{конт}}$). Данное обстоятельство следует учитывать при моделировании. В диссертационной работе $N=3 \cdot 10^4$ атомов, размеры моделируемого кристаллита $(23 \times 5 \times 10)a$. Для ОЦК-решеток расчеты по формулам (4.10) и (4.11) дают следующие результаты: $\beta_{mk}' = 7,05 \cdot 10^{10}$ Па, $\sigma_* = 4,7 \cdot 10^{10}$ Па.

В таком случае деформационная скорость дислокаций определяется скоростью деформирования

$$V_{\text{дисл}} = V_R \frac{L_b}{b} \frac{\sigma_*}{\sigma_T}. \quad (4.14)$$

Параметр $V_R = V_{mp} = (3 \dots 10)$ м/с. Предел текучести σ_T в данных условиях изменяется в пределах $\sigma_T = (0,8 \dots 2,4)$ ГПа [72].

Результаты моделирования, отмеченные на рис. 4.7, совпадают с расчетными значениями $V_{\text{дисл}}$.

Для исследования движения дислокаций в стационарном режиме исследовались изменения сдвиговых (касательных) контактных напряжений σ_{xy} и скорости от времени (рис. 4.9 а). На этом же рисунке приведена диаграмма “сдвиговые напряжения-деформации” для α -Fe (по аналогии с работой [72] для никеля) (рис. 4.9 б).

Разброс скоростей атомов на графике (рис. 4.9 а) свидетельствует о колебаниях сдвиговых напряжений при моделировании. Диаграмма “ σ_{xy} - ε ” (рис. 4.9 б) показывает, что процесс дислокационного упрочнения происходит в пластической зоне при одновременном падении значений σ_{xy} .

Если обратиться к напряжениям $\sigma_{\text{дисл}}$, возникающим в процессе действия восходящей диффузии, то в диапазоне температур $T = 500 \dots 1000$ К они, являясь сдвиговыми, превосходят значения $\sigma_{xy} = 2,5 \cdot 10^9$ Па. Следовательно, в рассматриваемом температурном диапазоне процесс дислокационного упрочнения неизбежен.

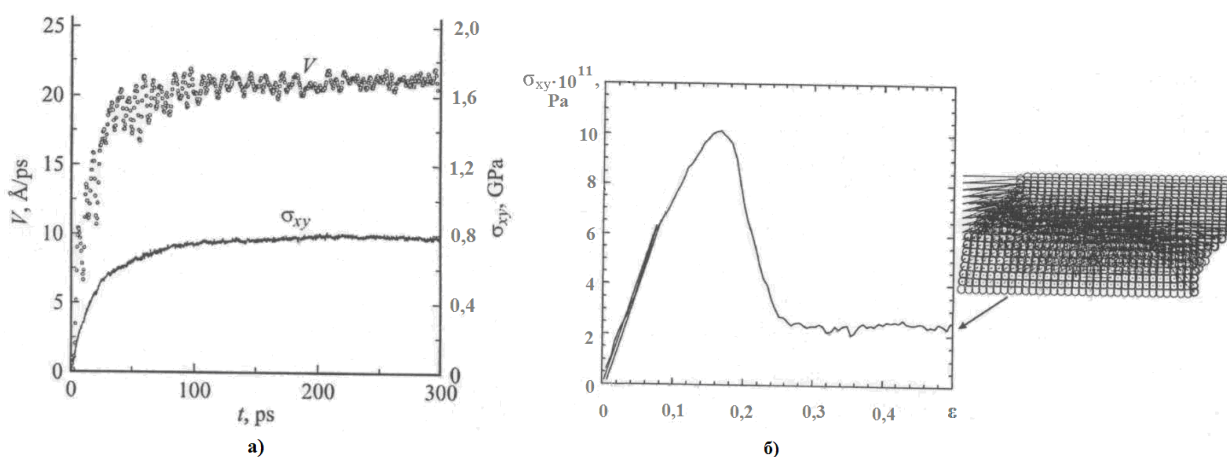


Рисунок 4.9. – Зависимость скорости дислокации (точки) и сдвиговых напряжений (сплошная линия) от времени в процессе деформирования с постоянной скоростью. Температура $T=600$ К [77]. Скорость верхней части атомов $V_R=0,105$ $\text{\AA}/\text{пс}$ ($V_{тр}=10$ м/с):
 а – моделирование движения дислокаций в стационарном режиме;
 б – диаграмма “контактные напряжения-деформация”

Для уточнения особенностей возникновения данного механизма промоделируем процесс динамики раздвоенной дислокации при ее перемещении со скоростью $V_{дисл}$ (рис. 4.10 а,б).

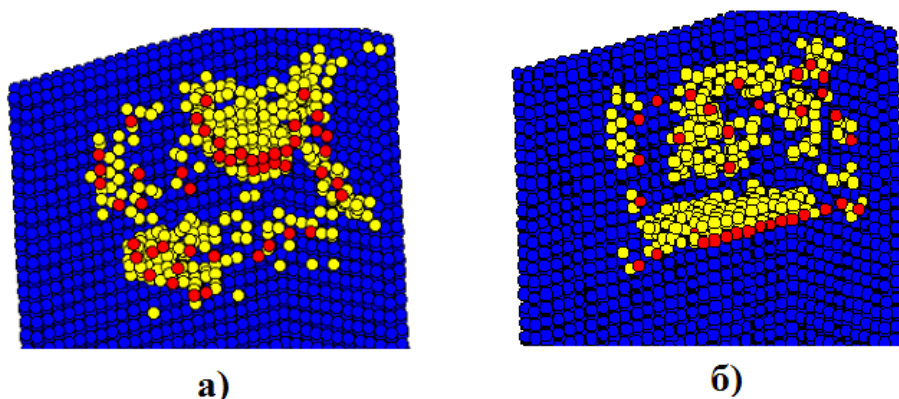


Рисунок 4.10. – Кинетика краевой дислокации под действием напряжения $\sigma_{дисл}$:
 а – исходная конфигурация краевой дислокации; б – промежуточная конфигурация краевой дислокации после 1000 шагов моделирования ($T=600$ К)

Для исследования динамики дислокации по схеме, предложенной на рис. 4.8 был сформирован кристаллит α -Fe из $3 \cdot 10^3$ атомов. Перемещение верхней части осуществляется со скоростью, соответствующей скорости трения $V_{тр}=10$ м/с. После 100 шагов моделирования следует расслабление кристаллита ($T=300$ К). Динамика краевой дислокации заключается в изменении ее формы, в частности, уплотнении ее нижней части. При этом количество атомов в дислокации уменьшается с 1012 до 752 с одновременным увеличением плотности дислокаций от $\rho=1,05 \cdot 10^{12}$ $1/\text{см}^2$ до $\rho=2,54 \cdot 10^{12}$ $1/\text{см}^2$. Отметим, что данная плотность дислокаций на порядок выше исходной плотности в никотированной стали – $\rho=4,5 \cdot 10^{11}$ $1/\text{см}^2$ [10].

Сопоставим полученные результаты моделирования с теоретическими данными, приведенными в работе [153], в которой рассматривается проблема переноса междоузельных атомов упругим полем движущейся дислокации (безактивационный перенос). В диссертационной работе предполагается, что дислокация формируется на базе дислокационных петель, образованных собственными междоузельными атомами, которые затем создают ядро дислокации. При перемещении часть собственных междоузельных

атомов покидает дислокацию. Согласно работе [153] эти атомы уходят в стоки (вакансионные пустоты и другие дефекты решетки). Следовательно, можно предположить, что и в нашем случае подобная причина ухода собственных междоузельных атомов имеет место. Нашли подтверждение и теоретические данные о том, что максимальное увлечение атомов имеет место при низких значениях $V_{диск}$, то есть при высоких температурах в нашем случае.

4.2.3 Исследование процесса дислокационного упрочнения

Дислокационное упрочнение определяется сопротивлением движению дислокаций поверхностного слоя и складывается из двух слагаемых [71]. Первое из них – это сопротивление, связанное с рельефом Пайерлса, с наличием точечных дефектов и других дислокаций, фактически являющимся силой трения покоя. Величина этой силы

$$F_{пок} = \frac{\sigma_T}{2}, \quad (4.15)$$

где σ_T – фиксированный предел текучести.

Величину σ_T можно описать тейлоровским законом упрочнения [146]

$$\sigma_T = \sigma_0 + \alpha G b \sqrt{\rho_D}, \quad (4.16)$$

где $\alpha=0,4$ – постоянная междислокационного взаимодействия [154]; $\rho_D=4,5 \cdot 10^{15} \text{ 1/м}^2$ – плотность дислокаций [14]. $\sigma_T=0,6 \cdot 10^9 \text{ Па}$.

Второе слагаемое представляет собой силу вязкого трения B_v , связанную с рассеиванием фононов и электронов на движущихся дислокациях. Коэффициент фононного трения зависит от температуры и определяется зависимостью

$$B_0(T) = \frac{(\sigma_T - \sigma_0)b}{V} \left(1 - \frac{V}{c_{зв}}\right)^4. \quad (4.17)$$

Так как $c_{зв}$ зависит от температуры T , то зависимость (4.17) определяет температурную зависимость B_0 от T [155]. Среднее значение данного коэффициента для $\alpha\text{-Fe}$ $\bar{B}_0(T)=4,8 \cdot 10^{-5} \text{ Па} \cdot \text{с}$. Суммарная величина торможения составляет $F_{торм}=0,19 \text{ Н/м}$. В области умеренных температур зависимость $F_{торм} \sim f(T)$ и практически линейна. Из решения уравнения (4.9) следует, что дислокационное упрочнение начинается со значения $\sigma_{эфф}=0,85 \cdot 10^9 \text{ Па}$.

В заключение, следуя работе [72], приведем графики функций “сдвиговое напряжение-деформация” для четырех размерных шкал кристаллитов, отражающих процесс образования дислокаций и дислокационного упрочнения (рис. 4.11).

При $N < 10^4$ атомов ($\sigma_{xy} > 10^{10} \text{ Па}$) местные атомные колебания играют важную роль для характеристики напряженно-деформированного состояния. Модель пластичности сплошной среды в данной пространственной зоне аналогична вибрациям.

При $10^4 < N < 10^8$ атомов ($\sigma_{xy} \approx 10^{10} \text{ Па}$) высокочастотные колебания напряжений практически исчезают из-за процедуры усреднения и наблюдаются глобальные значения напряжений. Данная область удачно описывает действие термического удара, восходящей диффузии. Для модели сплошной среды целесообразно использовать значения $\sigma_{диск}$.

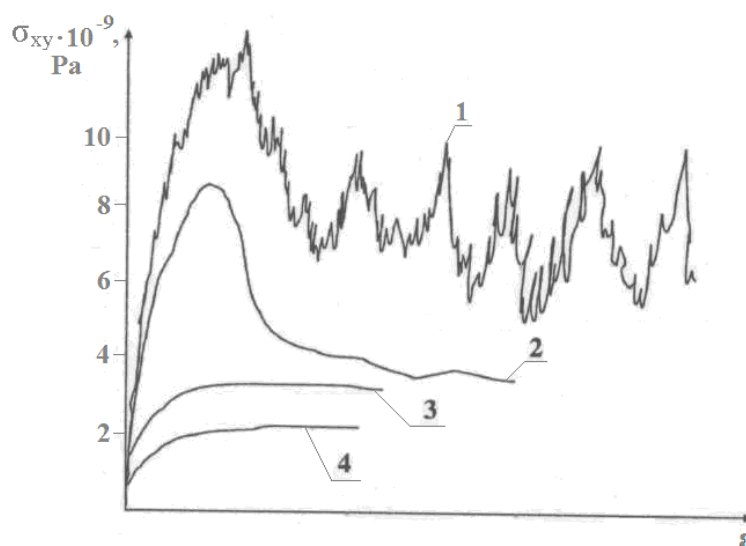


Рисунок 4.11. – Схемы деформационно-напряженного состояния для четырех различных шкал: 1 – кривая колебаний атомов при $N < 10^4$ атомов – наноуровень;
 2 – кривая при $N > 10^4$ атомов – субшероховатость;
 3 – кривая при $N \approx 10^8$ атомов – микрошероховатость;
 4 – кривая для натурального образца ($N > 10^8$ атомов).

В третьей размерной области $N \approx 10^8$ атомов ($\sigma_{xy} = 4 \cdot 10^9$ Па) полученная кривая пригодна для исследования пластичности поликристаллов.

При $N > 10^8$ атомов ($\sigma_{xy} < 2 \cdot 10^9$ Па) модельные результаты могут быть использованы для решения инженерных задач. В этом плане уместно привести значения контактного напряжения $\sigma_{xy} = \sigma_{\text{конт}} = 0,5 \cdot 10^9$ Па, приведенного в п.1.5, полученного в результате решения задачи Уфлянда.

4.3 Моделирование процессов зарождения и роста трещин и пор во вторичных структурах поверхностной зоны

Классификация физических моделей зарождения трещин и пор приведена в работе [156]. Полученные в диссертационной работе результаты указывают, что при трении механизмы зарождения трещин и пор носят термофлуктуационный характер: под действием восходящей диффузии, источником которой являются термические удары, создаются циклические $\sigma_{\text{цикл}}$ и диффузионные $\sigma_{\text{диф}}$ напряжения. Диффузионные процессы, во-первых, способствуют залечиванию пор и трещин, во-вторых, с их помощью реализуется процесс образования вторичных структур, в-третьих, они участвуют в процессе трещино- и порообразования. Кинетически данные процессы практически совпадают.

Источником процесса порообразования служат вакансионные кластеры. Под действием напряжения $\sigma_{\text{диф}}$ вакансионные кластеры расширяются, образуя поры. При этом процесс порообразования, носящий вакансионный характер, перемещается к поверхности трения снизу вверх.

Микромеханизмы и кинетика развития пор рассмотрены в работе [157], в которой подчеркивается, что механизм роста носит вязкий характер и конечным этапом их развития служит слияние с магистральной трещиной. Из работ, в которых вопросы развития пор анализировались с помощью ММД, следует отметить работу [73].

Для исследования процесса порообразования в диссертационной работе был сформирован кристаллит из α -Fe с количеством атомов $N=3 \cdot 10^4$. «При вводе в программу диффузионного воздействия $\sigma_{\text{диф}}$ атомы вначале проходят фазу термического возбуждения, а затем реализуется непосредственно диффузионный процесс.

Рассмотрим влияние кооперативного механизма самодиффузии Fe на структуру α -Fe, содержащую дефект в виде вакансии. Для более наглядного представления на рисунке 4.12 приведены траектории диффундирующих атомов Fe, спроектированных на плоскость $\langle 101 \rangle$.

Из приведенного рисунка следует, что в процессе диффузии образуется вакансионный кластер, перерастающий затем в вакансионную пору.

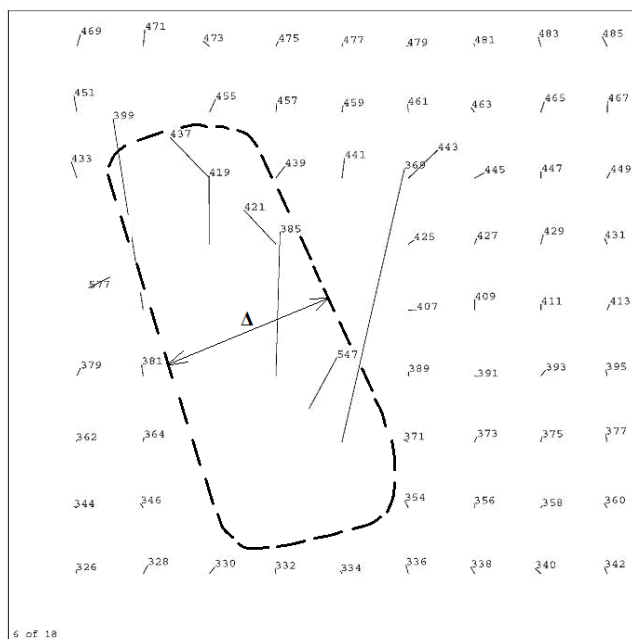


Рисунок 4.12. – Изменение структуры исходного кристаллита α -Fe с одной вакансией при кооперативном механизме диффузии ($T=900$ K, $n=10^4$ шагов)» [187].

Для анализа процесса образования и развития коротких трещин к кристаллиту прикладывалось напряжение $\sigma_{\text{цикл}}$, параллельное плоскости трения в зоне дислокационного упрочнения. Программа моделирования считывает следующую информацию: позиции атомов, упругие постоянные решетки, ориентация решетки, энергия поверхности и желаемая интенсивность напряжений (в единицах интенсивности критического напряжения Гриффитса, которое вычисляет программа).

Моделирование проводилось на массивах образцов, состоящих из примерно 25000 атомов с несколькими различными ориентациями. В этих массивах начальная трещина была создана при нормальной нагрузке на разрыв к трещине по направлению оси z , взятой параллельно краю трещины. Были использованы периодические граничные условия, наружные поверхности решетки были свободны. Результаты моделирования приведены на рис. 4.13.

Трещина длиной $a=25 \text{ \AA}$ была создана за 2000 шагов при заданном значении $\sigma=5$ ГПа. Для предотвращения трещины от захлопывания два наружных слоя атомов на верхней и нижней поверхностях рабочих (по оси z) и свободных поверхностях впереди трещины (по оси x) были застabilизированы. Так как эти неподвижные атомы неспособны поглощать тепловую энергию, они не влияют на внутреннюю температуру, которая будет по существу однородной после релаксации. В зависимости от ориентации плоскостей трещины и нагрузки на разрыв наблюдались различные типы поведения в кристаллографических направлениях. В направлениях $[100]$, $[010]$, $[001]$ имеют место различные дефекты в решетке (рис. 4.14 а-в).

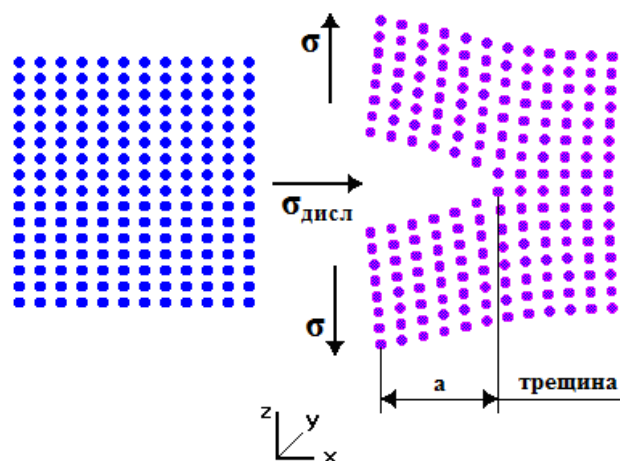


Рисунок 4.13. – Изменения в кристаллите, созданные программой трещинообразования [77]

На рис. 4.14 а показан вариант притупления трещины, когда массив атомов ориентирован нормально к направлению повторяющихся границ. При этом трещина не распространяется. На рис. 4.14 б показаны дефекты упаковок в виде переноса связей по всей плоскости разреза. Напряженная область в виде трехлопастной дислокации способна к пластичному разрушению. На рис. 4.14 в использована процедура фильтрации от перемещений атомов и деформаций, которые локально распределены. Такая симуляция позволяет эффективно визуализировать динамику явлений. “Хвосты” представляют собой смещения атомов (по отношению к исходному положению) за вычетом средних перемещений своих соседей. В этом случае трещина распространяется параллельно поверхности трения, разрушение хрупкое. Теоретические исследования [76] показали, что проявления хрупкого и пластического разрушения имеют место в диапазоне $T=600 \dots 700$ К [158]. Большой интерес вызывают результаты исследований, проведенные в аналогичных условиях, но в других кристаллографических направлениях [159].

В данной работе исследован процесс трещинообразования в α -Fe в кристаллографических направлениях $[110]$ и $[211]$. Был сформирован кристаллит из 25000 атомов размерами 10,4 нм x 28,7 нм x 11,5 нм (x, y, z). Шаг моделирования $\Delta t = 4,5 \cdot 10^{-11}$ с. Так как трещина наиболее эффективно развивалась в направлении $[110]$, то далее приводятся результаты моделирования в данном направлении (рис. 4.15 а-в) [159].

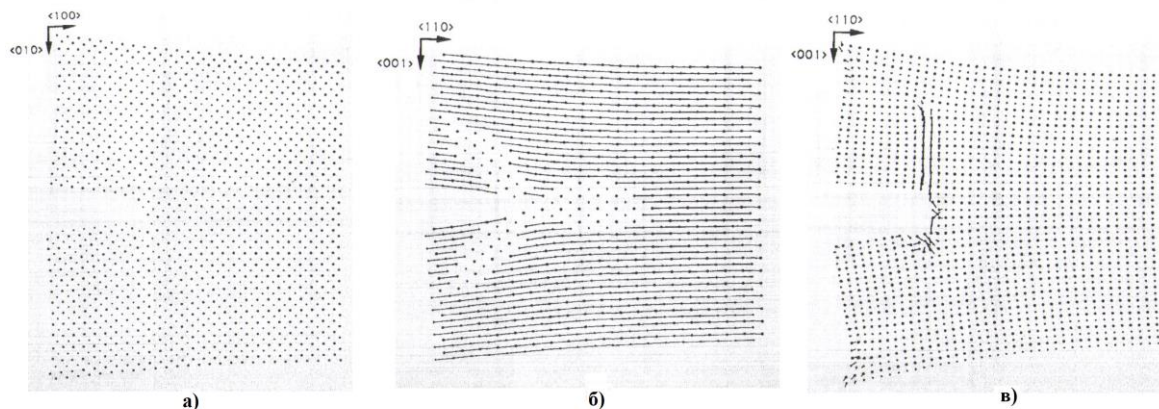


Рисунок 4.14. – Типы дефектов в вершине трещины [160]:

а – притупление вершины трещины в виде изгиба (после 5000 шагов);

б – трехлопастная дислокация (после 7000 шагов);

в – появление горизонтальной трещины из-за эмиссии дислокаций (после 10000 шагов)

Основным фактором, влияющим на распространение трещин, служит критическое напряжение, определяемое по формуле

$$K = Q\sigma_f \sqrt{\pi a_f}, \quad (4.18)$$

где Q – отношение глубины и ширины трещины – корректирующий фактор ($Q=1,12$); σ_f и a_f – соответственно напряжение и развитие трещины в направлении перемещения.

На рис. 4.15 а показан инициированный размер трещины $a_f=11,4 \text{ \AA}$ ($N=5000$ шагов), после которого начинается процесс распространения трещины. Следовательно, до момента достижения $N=5000$ шагов имеет место латентный период в процессе распространения трещины. При этом значение параметра $K_{Ic}=0,77 \text{ МПа}\sqrt{\text{м}}$. При моделировании вокруг области распространения трещины создана транзитная область с 10-20 атомных слоев. При $N<6000$ шагов вершина трещины перемещается с трудом, совершая при этом колебательное движение. На рис. 4.15 а можно видеть острие трещины, двойникование, дефекты упаковки и поры. При $N>5000$ шагов (рис. 4.15 б) фронт вершины трещины представляет пояс наподобие сферического элемента и небольшие области, содержащие атомы с высокими напряжениями. Это означает, что данные атомы более активированы и способны перемещаться коллективно. В этой связи трещина развивается среди этих небольших областей в высокоактивированные районы. При $N>7000$ шагов значения напряжений достигают критических значений и распространение трещины идет ускоренно, при этом желобная область, удлиняясь, принимает более определенную форму. При $N>9000$ шагов трещина пересекает всю конфигурационную область, напряжение падает и энергия диссипирует в форму длинной свободной поверхности. Приведенные результаты моделирования показывают, что критическим с точки зрения образования и распространения трещин является направление $[110]$, в котором реализуется косой скол. Расчеты показывают, что максимальная скорость распространения трещин $V_{mp}=1,2\cdot 10^{-9} \text{ мм/цикл}$.

В дальнейшем под действием внешних нагрузок малые трещины увеличиваются в размерах и перемыкаются между собой, образуя крупную трещину.

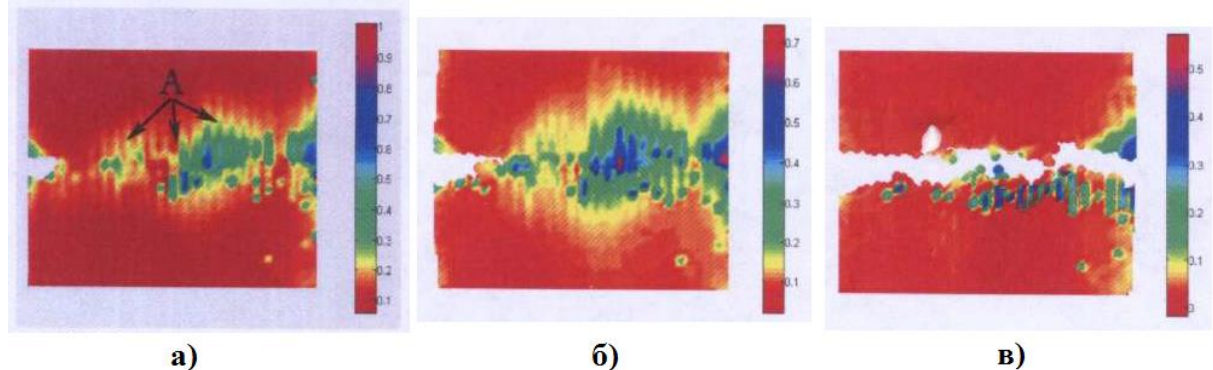


Рисунок 4.15. – Распределение напряжений при моделировании процесса образования трещины в направлении $[110]$:
а – 5000 шагов; б – 7000 шагов; в – 9000 шагов моделирования

С другой стороны крупные трещины могут возникать и по другим механизмам. Для исследования данных механизмов из-за увеличения масштаба области исследований применяется крупномасштабное моделирование с числом атомов $N>10^8$ [161-166]. В данных работах доказано, что в районе вершины трещины возникает сверхупругость, исключающих применение линейной теории упругости для установления механизмов разрушения под действием динамических нагрузок. Теоретические основы явления сверхупругости исследовались в работе [76]. Однако, расхождения в значениях экспериментальных скоростей распространения трещин и скоростями, полученными в теории и моделировании, достигают 90 %. Причины данных расхождений до сих пор окончательно не установлены. Результаты исследований, приведенных в работе [167],

позволяют максимально приблизиться к решению данной проблемы. В данной работе вводится понятие характерного масштаба длины для потока энергии вблизи вершины трещины. Утверждается, что локальная скорость сверхупругой волны регулирует скорость роста трещины при приближении сверхупругой зоны к длине характерной энергетической шкалы. Сверхупругая теория полностью меняет концепцию максимальной скорости роста трещины в классической теории. Модель моделирования сверхупругой области основана на бигармоническом потенциале, состоящем из двух констант. Один из потенциалов действует с малыми деформациями, другой – с большими деформациями. В результате получена упрощенная модель материала для сверхупругой зоны, что позволяет исследовать общие черты сверхупругости для широкого класса реальных материалов. Схема модели представлена на рис. 4.16.

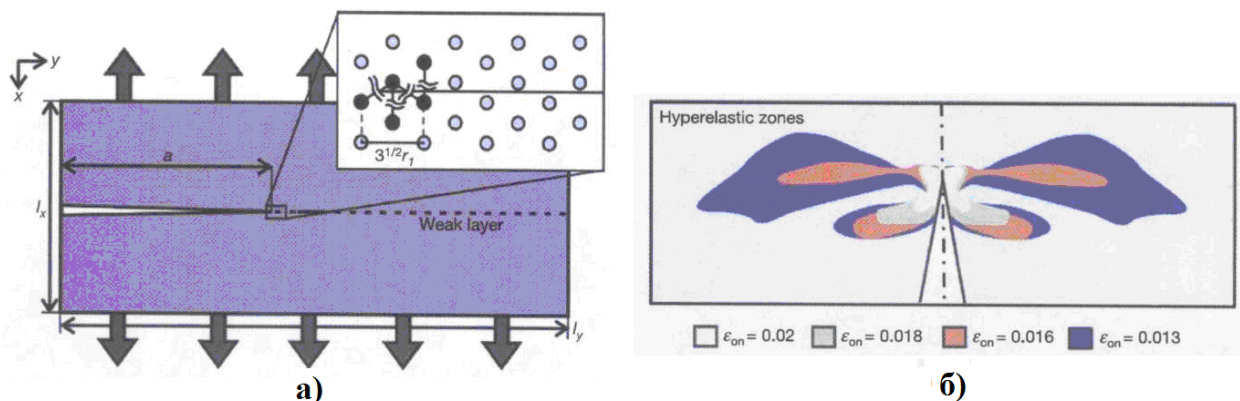


Рисунок 4.16. – Модельные представления (а) и результат моделирования (б) процесса образования и развития длинных трещин

Модель представляет собой кристаллит, состоящий из $7 \cdot 10^7$ атомов. Длина трещины $a=10^{-8}$ м – латентная стадия трещинообразования. Результаты моделирования представлены в относительных единицах. Гиперупругая зона характеризуется размером χ

$$\chi = \beta \frac{\gamma E_1}{\sigma^2}, \quad (4.19)$$

где $\chi \approx 750$; $\beta=87$ – отношение, характеризующее отношение между сверхупругими и упругими свойствами; E – модуль упругости; γ – поверхностная энергия трещины $\gamma = \frac{G}{2}$, где G – динамическая энергия хрупкого разрушения, для стали $G=4 \cdot 10^3$ Дж/м²; σ – приложенная динамическая нагрузка.

Установленная независимость действия параметров в формуле (4.19) позволяет получить значения критического напряжения $\sigma_{крит}$ для реализации механизма сверхупругости. В расчетах использовали значения модуля в сверхупругой зоне $E=4E_{упр}$ ($E_{упр}=2,15 \cdot 10^{11}$ Па). $\sigma_{крит}=2 \cdot 10^7$ Па $< \sigma_T=8 \cdot 10^7$ Па. Таким образом, сверхупругость в районе вершины трещины будет иметь место при трении во всем диапазоне исследованных температур, расширяя трещины, расположенные перпендикулярно поверхности трения.

Скорость распространения трещины U определяется величиной деформации ε и величиной сверхупругой зоны h . Значения относительной скорости $\frac{U}{C_R}$ от деформации и

отношения $\alpha = \frac{h}{\chi}$ приведены на рис. 4.17 а-б.

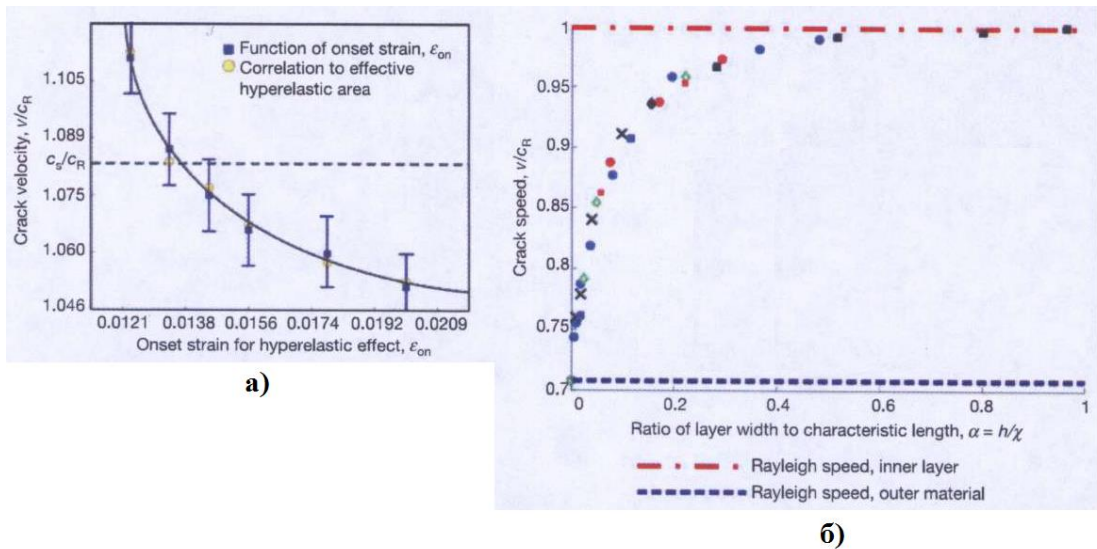


Рисунок 4.17. – Зависимость относительной скорости распространения трещины $\frac{U}{C_R}$ от деформации (а) и относительной длины $\alpha = \frac{h}{\chi}$ (б) (U – продольная скорость упругой волны, C_R – сферическая скорость гиперупругой волны, $C_R=0,9225U$) [167]

Скорость упругой волны приближается к скорости тепловой волны. Согласно проведенным в диссертации расчетам $U \approx 10^3$ м/с. Феномен сверхупругости играет большую роль для наноматериалов и высокоскоростного ударного нагружения, имеющему место в поверхностной зоне при трении.

С металловедческой точки зрения явление сверхупругости имеет место при превращении аустенита (γ -Fe) в мартенсит (α -Fe). Приведенные в главе 3 экспериментальные данные показывают, что подобные превращения имеют место при более высоких давлениях ($\sigma \sim 10$ ГПа) и температурах ($T \sim 800$ К), чем при моделировании. Эти различия можно объяснить действием масштабного фактора: число атомов в трещине при моделировании составляет несколько сотен.

Приведенные результаты показывают, что крупные трещины возникают при напряжениях $\sigma_{diff} < \sigma_T$, распространяются перпендикулярно поверхности трения со скоростью $V_{mp} \approx V_{36} = 6 \cdot 10^3$ м/с. Перемикаясь с другими трещинами, образованными в дислокационно-упрочненной зоне, они образуют ячейки усталостного износа.

4.4 Моделирование процессов усталостного разрушения и износа поверхностной зоны

В зависимости от величины характеристического масштаба структуры под разрушением можно понимать процессы образования в кристаллическом теле суб-, микро- и макронесплошностей. Даже с учетом литературных данных, освещающих различные аспекты механического поведения сталей при самых разнообразных условиях нагружения [168-170], решение проблемы установления основных закономерностей трансформации микронесплошностей в магистральные трещины является сложной задачей.

Во-первых, в процессе деформации и действия восходящей диффузии в поверхностной зоне появляются вторичные структуры, играющие определяющую роль в физической картине разрушения. В этом плане представляется важным отделить собственно диффузионные процессы от процессов разрушения. Приведенные в главе 4 данные по моделированию механизмов кооперативной и резонансной диффузии позволяют это реализовать. В процессе моделирования были установлены мгновенные температуры в области выхода диффундирующего атома из кристаллической решетки, превышающие температуру плавления. Полученные результаты, подтвержденные расчетами прочности межатомных связей в данной области, позволяют утверждать, что эти связи не разрываются, а термически ослабевают и в дальнейшем восстанавливаются.

Во-вторых, попытки свести все многообразие реально наблюдаемых проявлений разрушения поликристаллических материалов к немногим теоретическим моделям зарождения и роста трещин не увенчались полным успехом [171, 172]. Экспериментальным исследованиям, проведенным с целью проверки применимости определенных теоретических моделей к описанию реальных случаев разрушения в микроскопическом материале, присущ общий методический недостаток: динамическим по своему характеру характеристикам прочности материалов ставятся в соответствие параметры микроструктурного состояния, определяемые в статическом состоянии на микрообъектах, вырезанных случайным образом из разрушенных макрообразцов. Наилучшим методом изучения микромеханизмов разрушения материалов, практически свободным от этого недостатка, является проведение экспериментов по разрушению микрообразцов непосредственно в колонне высоковольтного электронного микроскопа [156].

В теоретическом отношении наибольший интерес представляют работы, в которых наблюдаемым микроскопическим проявлениям разрушения придается достаточно общее значение и делаются попытки оценить их на основе макроскопических характеристик разрушения для реальных тел [142, 173].

Из представленного в диссертационной работе материала следует, что узлы стрелково-пушечного вооружения эксплуатируются в температурном диапазоне 500 ... 800 К, то есть в зоне преимущественного действия усталостного механизма. Анализ данного механизма требует одновременного рассмотрения разномасштабных проявлений данного процесса: от разрыва межатомных связей до раздела поверхностной зоны на части. Шкала пространственных интервалов, в которых протекают акты разрушения, даже в лабораторных условиях охватывает расстояние от 10^{-9} до 10^{-3} м. При этом не исключается их взаимное влияние. Моделирование в пределах указанных масштабно-временных интервалов с помощью ММД представляет собой сложную задачу. В настоящее время имеющиеся программы моделирования оперируют с кристаллитами, содержащими 10^8 атомов, что в линейном измерении составляет ~ 300 мкм, а время моделирования составляет десятки часов [72].

Экспериментальные результаты натурных испытаний основаны на континуальном подходе с размерно-временными параметрами, несоизмеримыми с параметрами, рассматриваемыми в ММД [174]. Определенный компромисс в решении проблемы пространственно-временных масштабных факторов дает кинетическая теория прочности [175] в сочетании с термофлуктуационной моделью зарождения микропустот [176]. Согласно кинетической теории прочности в течение определенного времени при заданных температурно-силовых условиях в твердом теле происходит накопление рассеянных микроскопических повреждений – микротрещин и микропор. В некоторой критической концентрации, соответствующей моменту, когда начинает проявляться их силовое взаимодействие, происходит лавинообразное объединение микропустот в магистральную трещину.

Термофлуктуационная модель уточняет ряд положений кинетической теории прочности [177]. В частности, данная модель рассматривает в качестве элементарных

актов разрушения термофлуктуационные разрывы напряженных межатомных связей, а сам процесс разрушения – как кинетический процесс накопления в материале необратимых повреждений – разорванных межатомных связей. Важным фактором в кинетическом процессе накопления повреждений является направленность действия термофлуктуационного фактора: расширение или сжатие кристаллита. При расширении используется дилатонная модель расширения [178]. По определению дилатон – флуктуация плотности с деформированными межатомными связями. В диссертационной работе предполагается, что термический удар является следствием температурных флуктуаций на уровне суб- и микрошероховатостей. Трансформация термического удара в восходящую диффузию не меняет его физической природы. В этой связи действие напряжения диффузии $\sigma_{диф}$, приводящее к появлению микропор, следует рассматривать как проявление дилатонного механизма разрушения.

В свою очередь циклические напряжения $\pm\sigma_{цикл}$, носящие также термофлуктуационный характер, приводят к сжатию материала и появлению микротрещин. Вместе с тем следует отметить и существенный недостаток термофлуктуационной модели разрушения: процесс перехода от разрыва межатомных связей к разрушению, в принципе, постулируется. В этой связи представляет интерес энергетическая теория разрушения, рассматривая данные процессы в континуальном приближении [148, 21]. Основные моменты данной теории связаны с определением значений вводимой, запасаемой и диссипируемой энергий и определением скорости роста трещин. Конечной целью данной теории является нахождение циклической долговечности натуральных образцов.

4.4.1 Дилатонный механизм разрушения при порообразовании

Дилатонный механизм разрушения, рассматривая твердое тело как совокупность взаимосвязанных колеблющихся атомов, отождествляет элементарные повреждения не с разрывами единичных межатомных связей, а с разрушением дилатонов (пор). В отсутствие диффузионного процесса напряжения восходящей диффузии $\sigma_{диф}$ продолжают действовать, разрывая межатомные связи. При этом в объеме поверхностной зоны после окончания диффузионного процесса остаются “начальные” дилатоны. При исследовании размеров дилатонов использовались результаты работы К.Н. Войнова [179]. После окончания действия кооперативного механизма начальный размер дилатона $\Delta_1 \approx 1,5 \cdot 10^{-9}$ м, после окончания действия резонансного механизма начальный размер дилатона $\Delta_2 = n\Delta_1$, где $n=6 \dots 9$, что связано с действием амплитуды A резонансной диффузии.

Интерес представляет критический размер дилатона $\Delta_{кр}$, вызывающий взрывоподобное разрушение в поверхностной зоне. Согласно работам [142, 178] разрушение дилатонов следует отнести к ударно-тепловому типу

$$\Delta_{кр} = \alpha T \varepsilon_0 \frac{\sigma_{дис}}{E} \frac{1 + \omega\tau}{[1 + (\omega\tau)^2]^2} \cdot 10^{-2} \cdot \Delta_{нач}, \quad (4.20)$$

где $\alpha = 1,4 \cdot 10^{-5}$ 1/град – коэффициент теплового расширения; $\varepsilon_0 \approx 0,6$ – предельное значение относительной деформации; $\omega = 2,5 \cdot 10^{12}$ 1/с – максимальное значение частоты

фононного спектра; $\tau = \frac{Fo \cdot a}{V_{36}^2}$ – время расширяющего термического удара, где $Fo=5$ –

критерий Фурье; a – коэффициент температуропроводности; $V_{36} = 5 \cdot 10^3$ м/с – скорость звука стали.

Значения $\Delta_{кр}$ по температурным зонам приведены в таблице 4.2.

Таблица 4.2 – Параметры дилатонного механизма разрушения

T, K	500	600	700	800	900
$\sigma_{диф}, ГПа$	4,22	4,83	5,19	5,52	5,95
$10^2 \frac{1 + \omega\tau}{[1 + (\omega\tau)^2]^2}$	0,57	0,62	0,72	0,82	1,00
$\Delta_{кр} \cdot 10^{-7}, м$	1,03	1,34	1,62	1,9	2,2
Γ	7,0	5,2	3,7	2,3	4,1
$U \cdot 10^{20}, Дж$	5,7	7,7	10,9	17,3	36,7
$U_{уд} \cdot 10^6, Дж/м^2$	6,7	6,12	4,9	6,0	10,8
$E_{погл} \cdot 10^7, Дж/м^2$	4,86	9,2	15,6	22,0	31,8
$P \cdot 10^{-3}$	7,25	6,0	5,25	4,9	4,3
$V \cdot 10^{15}, м^3$	3,3				
$\sigma_{ту} \cdot 10^{-9}, Па$	7,8	9,2	10,8	12,6	14,2
$\Sigma V^{(i)} \cdot P \cdot 10^{17}, м^3$	4,13	7,0	11,7	17,5	35,0
$i \cdot 10^{-2}, цикл$	0,8	0,4	0,3	0,1	0,1
$50i \cdot 10^{-3}, цикл$	4,6	2,3	1,44	1,08	0,6

Энергия активации разрушения дилатона, что равносильно зарождению микроповреждений, равны

$$U = \frac{3k}{G\beta} - \frac{a^3 E \varepsilon}{G}, \quad (4.21)$$

где G – параметр Грюнайзена; $\beta = 3\alpha$ – объемный коэффициент теплового расширения; ε – относительная деформация; $k = 1,38 \cdot 10^{-23}$ Дж/град – постоянная Больцмана.

Значения U приведены в таблице 4.2. Энергия поглощения напряжений $\sigma_{диф}$ будет вычисляться по зависимости [173]

$$E_{погл} = \frac{\sigma_{диф}^2}{E} \frac{1 + \omega\tau}{[1 + (\omega\tau)^2]^2}. \quad (4.22)$$

Объем одного дилатона характеризуется его размером $V_{дил} = 4,189 \left(\frac{\Delta}{2}\right)^3$.

Количество разрушенных дилатонов за один цикл (шаг моделирования)

$$P = \frac{E_{погл}}{U}. \quad (4.23)$$

Суммарный объем разрушенных дилатонов

$$\sum_{i=1}^P V_{дил}^{(1)} P. \quad (4.24)$$

Количество циклов разрушения для разрушения некоторого объема поверхностной зоны

$$i = \frac{V}{PV_{дил}}. \quad (4.25)$$

Принимая во внимание, что полученное значение, приводящее к зарождению разрушения, составляет 2 % числа циклов, вызывающих полное разрушение поверхностной зоны [178], продолжительность разрушения должна увеличиваться в 50 раз, то есть

$$i_{max} = 50i. \quad (4.26)$$

Приведем численные значения параметров, входящих в вышеприведенные формулы $\Delta_{кр}=1,1 \cdot 10^{-7}$ м. Отметим, что количество циклов повреждений i определялось для α -Fe. Для определения количества циклов для стали 25Х3М3НБЦА с сформировавшимися структурами вторичных фаз воспользуемся результатами исследований, приведенными в работе [18]. Усталостная долговечность диффузионных зон теплостойких сталей предлагается оценивать по распределению микротвердости $H_\diamond$ по глубине. Установлено, что параметр $H_\diamond$ пропорционален гетерогенности структуры. Для α -Fe $H_\diamond=1300$, для гетерогенных зон $H_\diamond=7800$. Отношение $7800/1300=6$. Следовательно, для теплостойких сталей количество циклов I нужно уменьшить в 6 раз.

4.4.2 Механизмы разрушения при трещинообразовании

Механизмы разрушения коротких (горизонтальных) и длинных (вертикальных) трещин различны. Так как короткие трещины зарождаются в объеме поверхностной зоны, то для длинных трещин характерно наличие латентного периода до раскрытия трещины. Согласно работе [14] длительность латентной стадии оценивается с учетом критерия R_w

$$i_{лат} = N_0 R_w \exp\left(-10^2 \frac{\sigma_{цикл}}{E}\right), \quad (4.27)$$

где $N_0=2,5 \cdot 10^{-4}$ циклов для теплостойких сталей, соответствующее минимальному напряжению $\sigma_{цикл}=0,5$ ГПа, при котором в α -твердом растворе начинается размножение дислокаций.

Значения $i_{лат}$ приведены в таблице 4.3.

Таблица 4.3 – Параметры механизмов разрушения для коротких трещин

Период	T, K	500	600	700	800	900
латентный	R_w	0,78	0,52	0,36	0,27	0,15
	$h_\epsilon \cdot 10^6, м$	4,8	4,2	4,0	3,7	2,2
	$\sigma_{цикл}, ГПа$	5,8	7,2	8,5	9,8	11,0
	$i_{лат} \cdot 10^{-3}, цикл$	1,45	0,75	0,17	0,1	0,02
	$i_{откр} = \frac{h_\epsilon}{V_{тр}}$					
разрушение	$V_{тр} \cdot 10^9, м$	1,7	2,7	3,15	3,3	3,8
	$i_{откр} \cdot 10^{-3}, цикл$	2,83	1,88	1,27	0,98	0,58
	$i_\Sigma \cdot 10^{-3}, цикл$	4,28	2,33	1,44	1,08	0,60

Для определения длительности процесса “открытой” стадии образования трещины использовались результаты моделирования соответствующего процесса в фазе α -Fe, приведенные ранее. Пересчет данных значений на фактический фазовый состав ВС осуществлялся через их микротвердость. Фактическая скорость распространения коротких трещин вычислялась по зависимости

$$V_{кор}^{факт} = V_{кор}^{(\alpha-Fe)} \frac{\bar{H}_\diamond}{H_\diamond(\alpha-Fe)}, \quad (4.28)$$

где $\bar{H}_{\diamond}$ – приведенное (среднее) значение микротвердости ВС по температурным зонам

$$\bar{H}_{\diamond} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N H_{\diamond}^{(i)} \% \text{ содержание.} \quad (4.29)$$

Значение % содержания фаз ВС по температурным зонам определялось по данным, приведенным на рис. 2.18.

Значения микротвердости $\bar{H}_{\diamond}$ фаз ВС по температурным зонам приведены в таблице 4.4.

Таблица 4.4 – Значения микротвердости $\bar{H}_{\diamond}$ фаз ВС

T, K	400	500	600	700	800	900
$\bar{H}_{\diamond}, \text{ ГПа}$	4,15	4,9	4,42	8,3	7,14	7,0
$\frac{\bar{H}_{\diamond}}{H_{\diamond}(\alpha - Fe)}$	1,66	1,96	1,8	3,3	2,85	2,8

Расчеты циклической долговечности для коротких трещин по приведенным зависимостям даны в таблице 4.3.

Схема разрушения поверхностной зоны вследствие трещинообразования приведена на рис. 4.18.

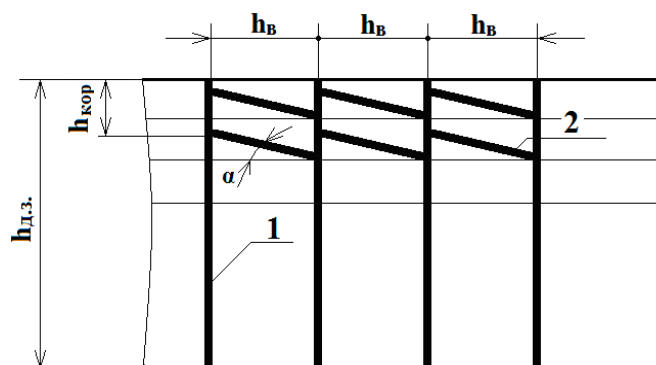


Рисунок 4.18. – Схема разрушения поверхностной зоны вследствие трещинообразования: 1 – длинные трещины; 2 – короткие трещины; $h_{д.з.}=5 \cdot 10^{-5}$ мм – длина диффузионной зоны

Длинные (магистральные) трещины распространяются в сверхупругой зоне (зоне мартенситных превращений). В этой связи нет необходимости пересчета значений скоростей трещин, полученных в результате моделирования ММД. Циклическая долговечность длинных трещин определяется по зависимости

$$i_{дл} = \frac{h_{д.з.}}{V_{mp}}, \quad (4.30)$$

где $h_{д.з.}=5 \cdot 10^{-5}$ м – толщина диффузионной зоны.

Результаты расчетов приведены в таблице 4.5.

Результаты моделирования показывают, что лимитирующими по времени разрушения являются дислокационные (короткие) трещины. Тем не менее, различия по времени между короткими и длинными трещинами невелики и согласно рис. 4.19 магистральная трещина будет иметь поверхность с многочисленными уступами, вызванных распространением трещины по межфазным границам. Экспериментально данное предположение подтверждено фотографиями трещин, полученных в колонне растрового электронного микроскопа и в колонне высоковольтного электронного микроскопа (рис. 4.19) [156].

Таблица 4.5. – Параметры механизмов разрушения трещинообразованием

Тип трещин	T, K	500	600	700	800	900
Сверхупругие (длинные)	$\sigma_{зан} \cdot 10^{-9}, Н/м^2$	4,22	5,73	6,70	7,36	8,49
	$l_{mp} \cdot 10^6, м$	1,0	0,8	0,6	0,3	0,2
	$10^2 \frac{1 + \omega\tau}{[1 + (\omega\tau)^2]^2}$	0,77	0,98	1,50	2,90	4,00
	$\Delta W_{зан}, Дж/м^2$	0,62				
	$\Delta W_{д.у.}, Дж/м^2$	0,21				
	$h, мм$	$5 \cdot 10^{-5}$				
	$V_{mp}, мм/цикл$	$6,5 \cdot 10^{-9}$				
	$i \cdot 10^{-3}, цикл$	6,00	4,00	2,76	2,00	1,10

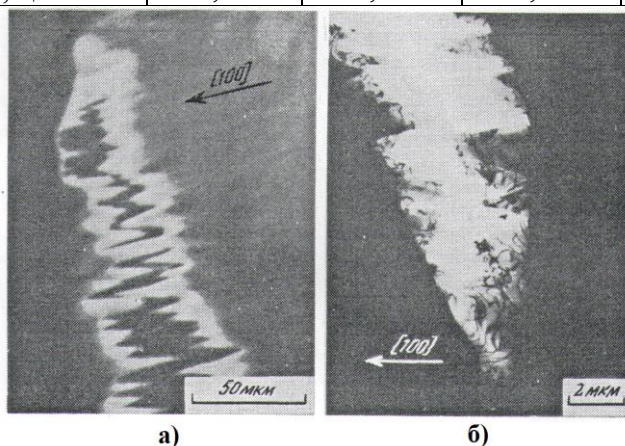


Рисунок 4.19. – Разрушение микроскопического образца в колонне растрового электронного микроскопа (а) и в колонне высоковольтного электронного микроскопа (б)

Полученные результаты подтверждает и анализ продуктов износа в результате действия механизма разрушения трещинообразованием (рис. 4.20).



Рисунок 4.20. – Типовая форма частицы износа при разрушении трещин

Длина частицы формируется действием длинных трещин, ширина – коротких трещин. Средний размер частицы $l=4 \cdot 10^{-8}$ м. Формы частицы износа приведены на рис. 4.21.

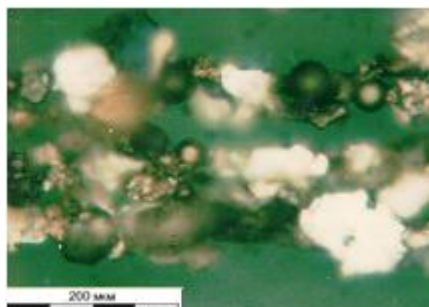


Рисунок 4.21. – Формы частицы износа при разрушении пор

Полученные результаты по оценке ресурсной долговечности теплостойких сталей с покрытием в виде «Методика оценки процессов эволюции пор и трещин теплостойких сталей с покрытием при трении скольжения с ресурсным смазыванием» поэтапно внедрены в ООО «Эксперт СВ» для экспертной оценки состояния узлов и агрегатов сосудов под давлением, оборудования черной металлургии и подъемно-транспортных механизмов, в виде «Методика оценки ресурсной долговечности теплостойких сталей с покрытием при фрикционном нагреве в условиях трения скольжения с ресурсным смазыванием» поэтапно внедрены в АО «Тулаточмаш» с целью совершенствования методик проведения стендовых испытаний изделий и выдаче рекомендаций по эффективной диагностике ресурсной долговечности изделий в условиях фрикционного нагрева, а также внедрены и используются в учебном процессе кафедры ФММ в виде методики моделирования структурообразования на основе метода молекулярной динамики «Влияние импульсных температурных процессов на структурообразование в теплостойких сталях с покрытием» по дисциплине «Математическое моделирование в металлургии» для магистров, обучающихся по направлению 22.04.02 «Металлургия», профиль «Металловедение и термическая обработка металлов и сплавов» (Приложение Г).

Заключение

1. Показано, что конструктивная прочность узлов технологических машин специального назначения обеспечивается теплостойкими сталями с легирующими элементами (хром, молибден, никель, ванадий) и микролегирующими добавками (ниобий, цирконий) и для получения требуемой ресурсной долговечности используется метод упрочняющей технологии – низкотемпературная нитроцементация (процесс нитотрирования) с рациональными с точки зрения обеспечения заданного ресурса режимами.

2. В континуальном приближении исследованы поэлементный и фазовый состав карбонитридного слоя и диффузионной зоны, её гетерогенная структура и кинетика образования пор и трещин.

3. Установлено, что под влиянием фрикционного нагрева в поверхностной зоне возникает восходящая диффузия (упругие напряжения) и дислокационное упрочнение (пластические напряжения). Показано, что восходящая диффузия приводит к разрушению исходных фаз в карбонитридной и диффузионной зонах и с помощью соответствующих ингредиентов (окружающая среда и поверхностная зона) образуются вторичные структуры. Процесс дислокационного упрочнения зависит от аддитивной суммы сопротивления, связанного с наличием дефектов в движущейся среде и силой вязкого трения, определяемого рассеиванием фононов и электронов на движущихся дислокациях, причем дислокационное упрочнение начинается со значений $\sigma_{дисл}=0,85$ ГПа.

4. Предложено использование моделирования для оценки быстропротекающих процессов диффузии и дислокационного упрочнения в поверхностной зоне трения с помощью метода молекулярной динамики, реализация которого связана с программным обеспечением решения дифференциальных уравнений и создания потенциалов межатомного взаимодействия, описывающих физико-механические свойства реальных прототипов. Показано, что сущность компьютерного моделирования состоит в изучении изменения положения атомных конфигураций под действием напряжений $\sigma_{диф}$ и $\sigma_{дисл}$, возникающих в поверхностной зоне при трансформации термических ударов.

5. Проведенный анализ показал, что в результате диссипации энергии и релаксации внутренних напряжений происходит уменьшение энергии, что соответствует процессу залечивания пор и трещин. В процессе моделирования установлено, что изнашивание поверхностной зоны вследствие процесса расширения пор происходит по дилатонному механизму, в то время как изнашивание вследствие роста коротких и длинных трещин носит усталостный характер.

6. Установлено, что при взаимодействии трущихся поверхностей выделение тепла при трении происходит в отдельных точках контакта шероховатых поверхностей и в течение короткого времени, причем нагрев, производимый точечными источниками, формирует тепловой фронт, распространение которого имеет волновой характер. Неоднородное температурное поле вызывает появление термических напряжений. Наложение волн термических напряжений, создаваемых различными тепловыми источниками, может приводить к росту напряжений в отдельных микрообъемах и, как следствие, к развитию в локальных зонах фазовых превращений и формированию структурных дефектов, стимулирующих разрушение по дилатонному (поры) и усталостному (трещины) механизмам. Показано, что пульсирующее температурное поле создает поле внутренних напряжений, превосходящее распределение внутренних напряжений контактного происхождения и вносит самостоятельный дополнительный вклад в развитие вторичных физических процессов.

7. Определена ресурсная долговечность поверхностной зоны трения в диапазоне температур от 500 до 900 К и показано, что количество i циклов составляет: от $6,90 \cdot 10^{-3}$

циклов до $0,40 \cdot 10^{-3}$ циклов при дилатонном механизме (процесс порообразования); от $4,28 \cdot 10^{-3}$ циклов до $0,6 \cdot 10^{-3}$ циклов при процессе формирования коротких трещин; от $6 \cdot 10^{-3}$ циклов до $1,1 \cdot 10^{-3}$ циклов при процессе формирования длинных трещин.

8. Выполненные разработки нашли практическую реализацию в виде соответствующих методик: в ООО “Эксперт СВ” поэтапно внедрена методика для экспертной оценки оборудования черной металлургии; в АО “Тулаточмаш” внедрена соответствующая методика для ускоренного проведения стендовых испытаний; в учебном процессе кафедры ФММ для магистров внедрена и используется методика моделирования структурообразования на основе метода молекулярной динамики.

Список литературы

1. Дроздов, Ю.Н. Прикладная трибология (трение, износ, смазка)/ Ю.Н.Дроздов, Е.Г.Юдин, А.И.Белов; под ред. Ю.Н.Дроздова. – М.: Эко-Пресс, 2010. – 604 с.
2. Рыбакова, Л.М. Структура и износостойкость металла / Л.М.Рыбакова, Л.И.Куксенова. – М.: Машиностроение, 1982. – 212 с.
3. Ялышев, Р.Г. Рентгенографические исследования влияния смазочной среды на структурное состояние поверхностей трения / Р.Г.Ялышев // Трение и смазка в машинах и механизмах. – 2007. – № 10. – С. 19–22.
4. Рыбакова, Л.М. Металловедение в науке о трении и изнашивании / Л.М.Рыбакова, Л.И.Куксенова // Металловедение и термическая обработка металлов. – 1985. – № 5. – С. 16–23.
5. Шаповалов, В.В. Прогнозирование изнашивания смазываемых узлов трения на базе корректного трибомоделирования / В.В.Шаповалов, В.Т.Костыгов // Вестник машиностроения. – 2002. – № 9. – С. 32–36.
6. Костыгов, В.Т. Прогнозирование трибохарактеристик смазываемых узлов трения по состоянию субструктуры приповерхностных слоев моделей / В.Т.Костыгов, В.А.Кохановский // Трение и смазка в машинах и механизмах. – 2006. – № 7. – С. 3–8.
7. Трибология: Международная энциклопедия. Т. XI: Компьютерные программы и примеры расчётов в трибологии и триботехнике / Под общей ред. д.т.н., профессора, академика Санкт-Петербургской Инженерной академии К.Н.Войнова. – СПб.: Нестор-История, 2016. – 240 с.
8. Чичинадзе, А.В. Расчет и исследование внешнего трения при торможении / А.В.Чичинадзе. – М.: Наука, 1967. – 231 с.
9. Block, H. Measurement of temperature flashes on gear teeth under extreme pressure conditions / H.Block // Proceedings of the general discussion on lubrication and lubricants. – London: Institution of Mechanical Engineers, 1937. – Vol. 2. – P. 14.
10. Маленко, П.И. Температурные поля и эксплуатационные свойства пар трения скольжения со смазочным материалом / П.И.Маленко, В.К.Зеленко, Д.М.Левин; под ред. Ю.Н.Дроздова. – М.: Машиностроение, 2011. – 239 с.
11. Боуден, Ф.П. Трение и смазка твердых тел / Ф.П.Боуден, Д.Тейбор. – М.: Машиностроение, 1968. – 544 с.
12. Мур, Д. Трение и смазка эластомеров / Д.Мур. – М.: Химия, 1977. – 264 с.
13. Adirovich, E. On the forces of dry friction / E.Adirovich, D.I.Blokhinzev // Journal of Physics. – 1943. – Vol. 7. – № 1. – P. 29–36.
14. Зеленко В.К. Структурообразование диффузионных зон никотрированных теплостойких конструкционных сталей и критерии оценки их усталостной долговечности: автореф. дис. ... канд. техн. наук: 05.16.01 / Зеленко Виктор Кириллович. – Тула, 1998. – 27 с.
15. Гордей, А.Э. Технология химико-термической обработки: карбонитрация. Структура и эксплуатационные свойства карбонитридных слоев стали 25Х2М1Ф / А.Э. Гордей // Сборник статей Всероссийской научно-технической конференции студентов “Студенческая научная весна 2012: Машиностроительные технологии” 4–7 апреля 2012 г. – М.: МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2012. – 422 с.
16. Симиновский, И.М. Структура и свойства никотрированных слоев на микролегированных конструкционных сталях и методы оценки их износостойкости: автореф. дис. ... канд. техн. наук: 05.16.01 / Симиновский Игорь Михайлович. – Тула, 1996. – 24 с.

17. Жигунов, К.В. Кинетика и механизмы структурообразования поверхностных слоев предварительно деформированных никотрированных теплостойких сталей: автореф. дис. ... канд. техн. наук: 05.16.01 / Жигунов Константин Викторович. – Тула, 2000. – 20 с.
18. Иванькин, И.С. Структурообразование и оптимизация технологических режимов никотрирования поверхностных слоев трущихся деталей автомобилей: автореф. дис. ... канд. техн. наук: 05.16.01 / Иванькин Илья Сергеевич. – Тула, 2004. – 20 с.
19. Мышкин, Н.К. Масштабный фактор в контактных задачах трибологии / Н.К.Мышкин [и др.] // Трение и износ. – 2005. – Т. 26. – № 1. – С. 5–14.
20. Мышкин, Н.К. Морфология: текстура, форма и цвет поверхностей трения и частиц износа в задачах трибологии / Н.К.Мышкин, А.Я.Григорьев // Трение и износ. – 2008. – Т. 29. – № 3. – С. 251–260.
21. Демкин, Н.Б. Контактное взаимодействие шероховатых поверхностей / Н.Б.Демкин. – М.: Наука, 1970. – 227 с.
22. Вентцель, Е.С. Теория вероятностей / Е.С.Вентцель. – М.: Наука, 1969. – 572 с.
23. Хусу, А.П. Шероховатость поверхности (теоретико-вероятностный подход) / А.П.Хусу, Ю.Р.Виттенберг, В.А.Пальмов. – М.: Наука, 1976. – 264 с.
24. Тигетов, Д.Г. Марковская модель механического взаимодействия шероховатых поверхностей в процессе трения / Д.Г.Тигетов, Ю.А.Горицкий // Трение и смазка в машинах и механизмах. – 2010. – № 3. – С. 3–12.
25. Горицкий, Ю.А. Уравнения и их решение для марковской модели упругопластического взаимодействия шероховатых поверхностей / Ю.А.Горицкий, Ю.С.Бражникова // Вестник МЭИ. – 2013. – № 6. – С. 154–165.
26. Рудзит, Я.А. Микрогеометрия и контактное взаимодействие / Я.А.Рудзит. – Рига: Зинатне, 1975. – 210 с.
27. Яковлев, А.Н. Введение в вейвлет-преобразования / А.Н.Яковлев. – Новосибирск: Изд-во НГТУ, 2003. – 104 с.
28. Лыков, А.В. Теория тепло- и массопереноса / А.В.Лыков, Ю.А.Михайлов. – М.;Л.: Гос. энергетич. изд-во иностр. лит., 1963. – 535 с.
29. Гурский, Б.Э. Тепловая задача трения и ее развитие. Часть I. Модель Блока и ее совершенствование / Б.Э.Гурский, А.В.Чичинадзе // Трение и износ. – 2007. – Т. 28. – № 3. – С. 311–324.
30. Charron, F. Publications scientifiques et techniques du secretariat d'état à l'aviation 182, partage de la chaleur entre deux corps frottants, 2e partie / F.Charron. – Paris: Ed. Blondel La Rougery – Gauthier-Villars, 1943. – 31 p.
31. Block, H. Theoretical study of temperature rise at surfaces of actual contact under oiliness lubricating condishions / H.Block // Proceedings of the general discussion on lubrication and lubricants. – London: Institution of Mechanical Engineers, 1937. – Vol. 2. – P. 222–235.
32. Гребер, Г. Основы учения о теплообмене / Г.Гребер, С.Эрк, У.Григуль. – М.: Изд-во иностр. лит., 1958. – 566 с.
33. Гончаров, О.Ю. Термодинамическое моделирование высокотемпературного окисления сплавов системы Fe-Cr на воздухе / О.Ю.Гончаров // Неорганические материалы. – 2004. – Т. 40. – № 12. – С. 1–7.
34. Ватолин, Н.А. Термодинамическое моделирование в высокотемпературных неорганических системах / Н.А.Ватолин, Г.К.Моисеев, Б.Г.Трусов. – М.: Металлургия, 1994. – 352 с.
35. Термодинамические свойства индивидуальных веществ: справочное издание: в 4 т. / Л.В.Гурвич [и др.]; отв. ред. В.П. Глушко. Изд. 3-е, перераб. и расш. – М.: Наука, 1978–1982. – Т. 1–4.
36. Журавлев, В.А. Термодинамика необратимых процессов в задачах и решениях / В.А.Журавлев. – М.: Наука, 1979. – 130 с.

37. Гуров, К.П. Феноменологическая термодинамика необратимых процессов (физические основы) / К.П.Гуров. – М.: Наука, 1978. – 128 с.
38. Коровчинский, М.В. Основы теории термического контакта при локальном трении / М.В.Коровчинский // В кн.: Новое в теории трения. – М.: Наука, 1966. – С. 98–145.
39. Лисовский, А.Ф. Некоторые особенности термодинамического исследования систем, состоящих из малых объемов / А.Ф.Лисовский // Материаловедение. – 2008. – № 7. – С. 2–7.
40. Hill, T.L. Thermodynamic of small system / T.L.Hill // The Journal of Chemical Physics. – 1962. – Vol. 36. – № 12. – P. 3183–3190.
41. Носко, А.Л. Решение контактной тепловой задачи с учетом теплопередачи между элементами трибосопряжения / А.Л.Носко, А.П.Носко // Трение и износ. – 2006. – Т. 27. – № 3. – С. 279–284.
42. Костыгов, В.Т. Дислокационные процессы в механизме разрушения смазываемых поверхностей трения / В.Т.Костыгов // Трение и износ. – 2001. – Т. 22. – № 2. – С. 186–189.
43. Рубцов, В.Е. Исследование сдвиговой пластической деформации в поверхностном слое при трении. Результаты моделирования. Часть 1. Описание модели / В.Е.Рубцов, А.В.Колубаев // Трение и износ. – 2007. – Т. 28. – № 1. – С. 64–76.
44. Рубцов, В.Е. Исследование сдвиговой пластической деформации в поверхностном слое при трении. Результаты моделирования. Часть 1. Описание модели / В.Е.Рубцов, А.В.Колубаев // Трение и износ. – 2007. – Т. 28. – № 1. – С. 169–177.
45. Рубцов, В.Е. Пластическая деформация и квазипериодические колебания в трибологической системе / В.Е.Рубцов, А.В.Колубаев // Журнал технической физики. – 2004. – Т. 74, вып. 11. – С. 63–69.
46. Попов, В.Л. Анализ механизмов формирования поверхностных слоев при трении / В.Л.Попов, А.В.Колубаев // Трение и износ. – 1997. – Т. 18. – № 6. – С. 818–826.
47. Тарасов, С.Ю. Развитие деформации на различных масштабных уровнях в поверхностных слоях при трении / С.Ю.Тарасов, А.В.Колубаев // Деформация и разрушение материалов. – 2008. – № 1. – С. 21–27.
48. Тарасов, С.Ю. Формирование полос локализованного сдвига в поверхностных слоях металлов при трении / С.Ю.Тарасов, А.В.Колубаев // Физика твердого тела. – 2008. – Т. 50, вып. 5. – С. 811–814.
49. Тарасов, С.Ю. Локализация деформации при трении / С.Ю.Тарасов // Металловедение и термическая обработка металлов. – 2006. – № 5. – С. 38–42.
50. Тарасов, С.Ю. Применение фракталов к анализу процессов трения / С.Ю.Тарасов, А.В.Колубаев, А.Г.Липницкий // Письма в ЖТФ. – 1999. – Т. 25. – № 3. – С. 82–88.
51. Пинчук, В.Г. Структурные аспекты микропластической деформации и разрушения металлов при трении / В.Г.Пинчук, С.В.Короткевич, С.О.Бобович // Деформация и разрушение материалов. – 2007. – № 9. – С. 23–28.
52. Платт, Дж. Метод строгих выводов / Дж.Платт // Вопросы философии. – 1965. – № 9. – С. 68–78.
53. Дедков, Г.В. Нанотрибология: экспериментальные факты и теоретические модели / Г.В.Дедков // Успехи физических наук. – 2000. – Т. 170. – № 1. – С. 585–618.
54. Браун, О.М. Нанотрибология: механизмы трения на атомном уровне / О.М.Браун // Актуальные проблемы современного материаловедения: в 2 т. – Киев: ИД “Академперіодика”, 2008. – Т. 2. – С. 253–268.
55. Бутенко, В.И. Научные основы нанотрибологии / В.И.Бутенко. – Таганрог: Изд-во ТТИ ЮФУ, 2010. – 275 с.

56. Мышкин, Н.К. Тенденции в развитии трибологии / Н.К. Мышкин, Д.В.Ткачук, А.И.Свириденко // Трение и смазка в машинах и механизмах. – 2009. – № 1. – С. 3–10.
57. Виньярд, Дж. Динамика радиационного повреждения / Дж.Виньярд // Успехи физических наук. – 1961. – Т. 74. – Вып. 3. – С. 435–459.
58. Alder, B.J. Studies in molecular dynamics. I. General method / B.J.Alder, T.E.Wainwright // The Journal of Chemical Physics. – 1959. – Vol. 31. – № 2. – P. 459–466.
59. Alder, B.J. Studies in molecular dynamics. II. Behaviour of a small number of elastic spheres / B.J.Alder, T.E.Wainwright // The Journal of Chemical Physics. – 1960. – Vol. 33. – № 6. – P. 1439–1451.
60. Rahman, A. Correlations in the motion of atoms in liquid argon / A.Rahman // Physical Review. – 1964. – Vol. 136. – № 2A. – P. A405–A411.
61. Verlet, L. Computer “experiments” on classical fluids. I. Thermodynamical properties of Lennard-Jones molecules / L.Verlet // Physical Review. – 1967. – Vol. 159. – № 1. – P. 98–103.
62. Хеерман, Д.В. Методы компьютерного эксперимента в теоретической физике / Д.В.Хеерман; под ред. С.А.Ахманова. – М.: Наука, 1990. – 176 с.
63. Крайнов, В.П. Качественные методы в физической кинетике и гидрогазодинамике / В.П.Крайнов. – М.: Высшая школа, 1989. – 224 с.
64. Daw, M.S. Embedded-atom method: Derivation and application to impurities, surfaces, and other defects in metals / M.S.Daw, M.I.Baskes // Physical Review B: Condensed Matter and Materials Physics. – 1984. – Vol. 29. – № 12. – P. 6443–6453.
65. Daw, M.S. The embedded-atom method: a review of theory and applications / M.S.Daw, S.M. Foiles, M.I.Baskes // Materials Science Reports. – 1993. – Vol. 9. – № 7–8. – P. 251–310.
66. Прудников, В.В. Фазовые переходы и методы их компьютерного моделирования / В.В.Прудников, А.Н.Вакилов, П.В.Прудников. – М.: ФИЗМАТЛИТ, 2009. – 224 с.
67. Чудинов, В.Г. Кооперативный механизм самодиффузии в металлах / В.Г.Чудинов // Журнал технической физики. – 2000. – Т. 70. – Вып. 7. – С. 133–135.
68. Кузнецов, С.А. Компьютерное моделирование молекулярной динамики граничного смазочного слоя / С.А.Кузнецов [и др.] // Физика, химия и механика трибосистем. – 2010. – № 9. – С. 14–20.
69. Kelchner, C.L. Dislocation nucleation and defect structure during surface indentation / C.L.Kelchner, S.J.Plimpton, J.C.Hamilton // Physical Review B. – 1998. – Vol. 58. – № 17. – P. 11085–11088.
70. Куксин, А.Ю. Молекулярно-динамическое моделирование динамики краевой дислокации в алюминии / А.Ю.Куксин, В.В.Стегайлов, А.В.Янилкин // Доклады Академии наук. – 2008. – Т. 420. – № 4. – С. 467–471.
71. Красников, В.С. Пластическая деформация при высокоскоростном нагружении алюминия: многомасштабный подход / В.С.Красников [и др.] // Физика твердого тела. – 2010. – Т. 52. – Вып. 7. – С. 1295–1304.
72. Horstemeyer, M.F. Length scale and time scale effects on the plastic flow of FCC metals / M.F.Horstemeyer, M.I.Baskes, S.J.Plimpton // Acta Materialia. – 2001. – Vol. 49. – № 20. – P. 4363–4374.
73. Лексовский, А.М. Кинетика термофлуктуационного роста магистральной трещины в поликристаллической фольге пластичного материала / А.М.Лексовский, А.Н.Орлов // Физика металлов и металловедение. – 1982. – Т. 54. – № 3. – С. 553–559.
74. Becquart, C.S. Fracture properties of metals and alloys from molecular dynamics simulations / C.S.Becquart [и др.] // Materials Science and Engineering: A. – 1993. – Vol. 170. – № 1–2. – P. 87–94.

75. Becquart, C.S. Molecular dynamics simulations of surface reconstruction at the edges of a crack in ruthenium aluminum / C.S.Becquart, P.C.Clapp, J.A.Rifkin // *Journal of Materials Research*. – 1993. – Vol. 9. – № 3. – P. 548–552.
76. Rice, J.R. Dislocation nucleation from a crack tip: An analysis based on the Peierls concept / J.R.Rice // *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. – 1992. – Vol. 40. – № 2. – P. 239–271.
77. Rifkin, J. XMD Molecular Dynamics Program [Electronic resource] / J.Rifkin // University of Connecticut, Center for Materials Simulation, Storrs, CT, 2002. 104 P. URL: <http://xmd.SourceForge.net/> (accessed: 18.02.2011).
78. Любарский, И.М. *Металлофизика трения* / И.М.Любарский, Л.С.Палатник. – М.: Металлургия, 1976. – 176 с.
79. Трибология: Международная энциклопедия. Т. VI: Технологические методы повышения надёжности работы подвижных трибосопряжений / Под общей ред. д.т.н., профессора, академика Санкт-Петербургской Инженерной академии К.Н.Войнова. – СПб.: Нестор-История, 2013. – 404 с.
80. Войнов, К.Н. Проблемы и решения в вопросах трения/изнашивания / К.Н.Войнов. – СПб.: Нестор-История, 2015. – 500 с.
81. Власов, В.М. Комбинированная низкотемпературная химико-термическая обработка конструкционных легированных сталей / В.М.Власов, В.К.Зеленко, П.И.Маленко // *Металловедение и термическая обработка металлов*. – 2002. – № 6. – С. 37–41.
82. Лахтин, Ю.М. Структура и прочность азотированных сплавов / Ю.М.Лахтин, Я.Д.Коган. – М.: Металлургия, 1982. – 240 с.
83. Mei Yang. Nitriding – fundamentals, modeling and process optimization. A Dissertation for the Degree of Doctor of Philosophy in Material Science and Engineering. Faculty of the Worcester polytechnic institute. – April 2012. – P. 134.
84. Thomas Wöhrle. Thermodynamics and kinetics of phase transformations in the Fe-N-C system. Dissertation Doktors der Naturwissenschaften (Dr. rer. nat.). Max-Planck-Institut für Metallforschung. Stuttgart. – März 2012. – P. 141.
85. Woehrle, T. Multicomponent Interstitial Diffusion in and Thermodynamic Characteristics of the Interstitial Solid Solution $\varepsilon\text{-Fe}_3(\text{N,C})_{1+x}$: Nitriding and Nitrocarburizing of Pure α -Iron / T.Woehrle, A.Leineweber, E.J.Mittemeijer // *Metallurgical and materials transactions A*. – 2013. – Vol. 44A. – P. 2548–2562.
86. Srikanth, S. Surface Modification of Commercial Low-Carbon Steel using Glow Discharge Nitrogen Plasma and its Characterization / S.Srikanth, P.Saravanan, Alphonsa Joseph, K.Ravi // *Journal of Materials Engineering and Performance*. – 2013. – Vol. 22. – № 9. – P. 2610–2622.
87. Hong, D. Theory of processes of a nitriding and carbonitriding / D.Hong, A.Lohn // *Metallurgical and Materials Transactions A: Physical Metallurgy and Materials Science*. – 1996. – Vol. 27. – № 4. – P. 1073–1080.
88. Власов, В.М. Работоспособность упрочненных трущихся поверхностей / В.М.Власов. – М.: Машиностроение, 1987. – 304 с.
89. Власов, В.М. Работоспособность высокопрочных термодиффузионных покрытий в узлах трения машин / В.М.Власов, Л.М.Нечаев. – Тула: Приокское книжное издательство, 1994. – 237 с.
90. Drozdov, Yu.N. Structural and Phase Transformations in Surface Layers of Steels under Sliding Friction / Yu.N.Drozdov, P.I.Malenko // *Journal of Friction and Wear*. – 2014. – Vol. 35. – № 1. – P. 67–75.
91. Ладьянов, В. И. Образование вторичных структур в теплостойких сталях при трении скольжения / В. И. Ладьянов, О. Ю. Гончаров, П. И. Маленко, Р. М. Никонова, Ф. З. Гильмутдинов, М. И. Мокрушина, С. А. Терешкина, А. Ю. Леонов, К. Д. Релмасира // *Физика металлов и металловедение*. – 2015. – Т. 116, № 12. – С. 1304–1312.

92. Миркин, Л.И. Рентгеноструктурный контроль машиностроительных материалов: справочник / Л.И.Миркин. – М.: Машиностроение, 1979. – 134 с.
93. Избранные методы исследования в металловедении / Под ред. Хунгера Г.-Й. – М.: Металлургия, 1985. – 416 с.
94. Тонков, Е.Ю. Фазовые превращения соединений при высоком давлении / Е.Ю.Тонков. – М.: Металлургия, 1988. – 464 с.
95. Еремеев, В.С. Диффузия и напряжения / В.С.Еремеев. – М.: Энергоиздат, 1984. – 181 с.
96. Маленко, П.И. Исследование взаимосвязи фазового состава вторичных структур и адгезионных свойств пар трения скольжения со смазочным материалом / П.И.Маленко // Трение и смазка в машинах и механизмах. – 2011. – № 1. – С. 37–45.
97. Маленко, П.И. Исследование температур на дискретных субшероховатых поверхностях при трении скольжения со смазочным материалом / П.И.Маленко // Вестник машиностроения. – 2011. – № 7. – С. 38–42.
98. Маленко, П.И. Исследование температур на дискретных контактах при трении скольжения со смазочным материалом / И.П.Маленко, П.И.Маленко // Вестник машиностроения. – 2009. – № 1. – С. 38–44.
99. Маленко, П.И. Исследования влияния температур на дискретных множественных контактах на триботехнические свойства пар трения скольжения со смазочным материалом / П.И.Маленко // Вестник машиностроения. – 2009. – № 10. – С. 33–42.
100. Малла, С. Вейвлеты в обработке сигналов / С.Малла. – М.: Мир, 2005. – 671 с.
101. Смоленцев, Н.К. Основы теории вейвлетов. Вейвлеты в MATLAB / Н.К.Смоленцев. – М.: ДМК Пресс, 2005. – 304 с.
102. Дьяконов, В.П. MATLAB. Обработка сигналов и изображений / В.П.Дьяконов, И.В.Абраменкова. – СПб.: Питер, 2002. – 608 с.
103. Сычев, В.В. Вычисление корреляционной размерности, корреляционной энтропии и показателя Херста по временному ряду данных / В.В.Сычев // Институт математических проблем биологии РАН. – Пущино. – 2002. <http://impb.psn.ru/~sychyov>.
104. Кузнецов, С.П. динамический хаос (курс лекций) / С.П.Кузнецов – М.: Физматлит, 2001. – 296 с.
105. Bekrenev, A.N. Features of phase transformations passing abd mass transport in metals under intensive external reactions / A.N.Bekrenev, A.V.Kamashev // Journal of Physics and Chemistry of Solids. – 2001. – Vol. 62. – P. 647–651.
106. Дроздов, Ю.Н. Исследование резонансных процессов в поверхностных слоях пар трения скольжения со смазочным материалом, вызванных термическими ударами / Ю.Н.Дроздов, И.П.Маленко, П.И.Маленко // Вестник машиностроения. – 2015. – № 2. – С. 44–52.
107. Дерибас, А.А. Физика упрочнения и сварки взрывом / А.А.Дерибас. – Новосибирск: Наука, 1980. – 219 с.
108. Киттель, Ч. Введение в физику твердого тела / Ч.Киттель. – М.: Наука, 1978. – 791 с.
109. Новик, А. Релаксационные явления в кристаллах / А.Новик, Б.Берри. – М.: Атомиздат, 1975. – 472 с.
110. Учаев, А.Я. Особенности процесса динамического разрушения металлов при воздействии теплового удара, вызываемого импульсами проникающих излучений и мощных импульсов лазерного излучения / А.Я.Учаев [и др.] // VII Забабахинские научные чтения. – Снежинск. – 2003. – С. 1–5.
111. Беломестных, В.Н. Коэффициент Пуассона и параметр Грюнайзена твердых тел / В.Н.Беломестных, Е.П.Теслева // Известия Томского политехнического университета. – 2003. – Т. 306. – № 5. – С. 8–12.

112. Банщиков, А.Г. Изучение поверхности твердых тел методом поляритонной спектроскопии / А.Г.Банщиков, В.Е.Корсуков // Физика твердого тела. – 1980. – Т. 22. – Вып. 8. – С. 2368–2373.
113. Гегузин, Я.Е. Восходящая диффузия и диффузионное последствие / Я.Е.Гегузин // Успехи физических наук. – 1986. – Т. 149. – Вып. 1. – С. 149–159.
114. Скрипов, В.И. Спинодальный распад (Фазовый переход с участием неустойчивых состояний) / В.И.Скрипов, А.В.Скрипов // Успехи физических наук. – 1979. – Т. 128. – Вып. 2. – С. 193–231.
115. Дроздов, Ю.Н. Структурно-фазовые превращения в поверхностных слоях сталей при трении скольжения / Ю.Н.Дроздов, П.И.Маленко // Трение и износ. – 2014. – Т. 35, № 1. – С. 87–98.
116. Новацкий, В.К. Волновые задачи теории пластичности / В.К.Новацкий. – М.: Мир, 1978. – 309 с.
117. Кутателадзе, С.С. Основы теории теплообмена / С.С.Кутателадзе. – М.: Атомиздат, 1979. – 415 с.
118. Борн, М. Динамическая теория кристаллических решеток / М.Борн, Хуан Кунь. – М.: Изд-во иностр. лит., 1958. – 488 с.
119. Термически активированные процессы в кристаллах: сб. статей: пер. с англ. / Под ред. А.Н.Орлова. – М.: Мир, 1973. – 212 с.
120. Диаграммы состояния двойных металлических систем: Справочник в 3 т. / Под общ. ред. Н.П.Лякишева. – М.: Машиностроение, 1996-2001. – Т. 1–3.
121. Хансен, М. Структуры двойных сплавов: в 2 т. / М.Хансен, К.Андерко. – М.: Металлургиздат, 1962. – Т. 1–2.
122. Pearson, W.B. A Handbook of Lattice Spacings and Structures of Metals and Alloys / W.B.Pearson. – London-New York-Paris-Los Angeles: Pergamon Press, 1967. – 1448 p.
123. Greßmann, T. Fe-C and Fe-N compound layers: growth kinetics and microstructure. Dissertation an der Universität Stuttgart. Institut für metallkunde der Universität Stuttgart. – Stuttgart, 2007. – 119 p.
124. Jack, K.H. The Iron-Nitrogen System: The Crystal Structures of ϵ -Phase Iron Nitrides / K.H.Jack // Journal of Acta Crystallographica. – 1952. – Vol. 5. – Part 4. – P. 404–411.
125. Hendricks, S.B. The Crystal Structure of Fe_2P , Fe_2N , Fe_3N and FeB / S.B.Hendricks, P.R.Kosting // Zeitschrift für Kristallographie-Crystalline Materials. – 1930. – Vol. 74. – Issue 1. – P. 511–533.
126. Okamoto, H. The C-Fe (Carbon-Iron) System / H.Okamoto // Journal of Phase Equilibria. – 1992. – Vol. 13. – № 5. – P. 543–565.
127. Clair, T.P.St. Surface characterization of $\alpha\text{-Mo}_2\text{C}$ (0001) / T.P.St.Clair, S.T.Oyama, D.F.Cox, S.Otani, Y.Ishizawa, R.-L.Lo, K.Fukui, Y.Iwasawa // Surface Science. – 1999. – Vol. 426. – Issue 2. – P. 187–198.
128. Юрьев, А.А. Модельный потенциал для простых и переходных металлов: дис. ... канд. физ.-мат. наук: 02.00.04 / Юрьев Анатолий Аркадьевич. – Свердловск, 1985. – 198 с.
129. Гончаров, П.П. Дискретные бризеры в нелинейных моноатомных цепочках / П.П.Гончаров, Г.С.Джелаухова, Г.М.Чечин // Известия вузов. Прикладная нелинейная динамика. – 2007. – Т. 15. – № 6. – С. 57–74.
130. Романов, В.А. Кристаллографические, энергетические и кинетические свойства собственных точечных дефектов и их кластеров в ОЦК железе: дис. ... канд. физ.-мат. наук: 01.04.07 / Романов Владимир Александрович. – Обнинск, 2008. – 162 с.
131. Tersoff, J. Modeling solid-state chemistry interatomic potentials for multicomponent systems / J.Tersoff // Physical Review B: Condensed Matter and Materials Physics. – 1989. – Vol. 39. – № 8. – P. 5566–5568.

132. Baskes, M.I. Modified embedded-atom potentials for cubic materials and impurities / M.I.Baskes // *Journal of Physics: Condensed Matter*. – 2004. – Vol. 46. – № 5. – P. 2727–2742.
133. Baskes, M.I. Atomistic potentials for the molybdenum-silicon system/ M.I.Baskes // *Materials Science and Engineering: A*. – 1999. – Vol. 261. – № 1–2. – P. 165–168.
134. Лейбфрид, Г. Точечные дефекты в металлах / Г.Лейбфрид, Н.Бройер. – М.: Мир, 1981. – 439 с.
135. Зализняк, В.Е. Универсальный потенциал взаимодействия для чистых металлов / В.Е.Зализняк, О.А.Золотов // *Наносистемы: физика, химия, математика*. – 2012. – Т. 3. – № 1. – С. 76–86.
136. Чудинов, В.Г. Влияние особенностей сил межчастичного взаимодействия на кристаллическую структуру и температуру $\alpha \rightarrow \gamma$ -превращения в сплавах на основе железа / В.Г.Чудинов, В.Е.Шудегов, В.А.Журавлев // *Журнал технической физики*. – 1996. – Т. 66. – № 4. – С. 84–91.
137. Дубовский, О.А. Колебательные спектры металл-металлоидных кристаллитов Fe_3P , Fe_2P : фононные и брзерные возбуждения / О.А.Дубовский, А.В.Орлов, В.А.Семенов // *Физика твердого тела*. – 2003. – Т. 45. – № 2. – С. 309–316.
138. Бокштейн, Б.С. Диффузия атомов и ионов в твердых телах / Б.С.Бокштейн, А.Б.Ярославцев. – М.: МИСИС, 2005. – 362 с.
139. Захаров, А.Ю. Обобщенная решеточная модель и ее применение к прогнозированию термодинамических свойств многокомпонентных растворов / А.Ю.Захаров, А.Л.Удовский // *Физика и химия обработки материалов*. – 2005. – № 1. – С. 5–14.
140. Назаров, А.А. Атомистическое моделирование материалов, наноструктур и процессов нанотехнологии / А.А.Назаров, Р.Р.Мулюков. – Уфа, РИО БашГУ, 2010. – 156 с.
141. Останин, С.А. Простая модель для исследования динамической устойчивости решетки железа / С.А.Останин, Е.И.Саламатов, В.Г.Чудинов // *Физика твердого тела*. – 1995. – Т. 37. – № 7. – С. 2002–2009.
142. Власов, В.М. Структурообразование термодиффузионных покрытий на конструкционных сталях и критерии оценки их триботехнической работоспособности: дис. ... д-ра техн. наук: 05.02.01; 05.02.04 / Власов Виктор Михайлович. – М., 1990. – 382 с.
143. Гегузин, Я.Е. Диффузионно-дислокационный механизм залечивания изолированных пор / Я.Е.Гегузин, В.Г.Кононенко // *Физика и химия обработки материалов*. – 1982. – № 2. – С. 60–75.
144. Бетехтин, В.И. Особенности импульсного МГД воздействия на микронесплошности в меди / В.И.Бетехтин [и др.] // *Журнал технической физики*. – 1989. – Т. 59. – Вып. 6. – С. 136–139.
145. Петров, А.И. Влияние статического и динамического сжатия на залечивание пор в меди / А.И.Петров [и др.] // *Журнал технической физики*. – 1998. – Т. 68. – Вып. 11. – С. 125–127.
146. Ударные волны и явления высокоскоростной деформации металлов / Под ред. М.А.Мейерса, Л.Е.Мурра. – М.: Металлургия, 1984. – 512 с.
147. Петров, А.И. Локализация пластической деформации при ударно-волновом нагружении титанового сплава с трещиной / А.И.Петров, М.В.Разуваева // *Журнал технической физики*. – 2003. – Т. 73. – Вып. 6. – С. 53–55.
148. Евтеев, А.В. Фазовые превращения в молекулярно-динамической модели нитевидного нанокристалла железа при одноосном растяжении / А.В.Евтеев, К.В.Жуков, А.Т.Косилов // *Вестник Воронежского государственного технического университета. Серия “Материаловедение”*. – 1999. – № 4. – С. 279–284.
149. Zhou, G. Atomic simulation of microcrack healing in aluminium / G.Zhou [et al.] // *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*. – 2000. – Vol. 8. – № 4. – P. 603–609.

150. Лобастов, А.И. Пластическая деформация монокристаллов алюминия в компьютерном эксперименте / А.И.Лобастов, В.Е.Шудегов, В.Г.Чудинов // Журнал технической физики. – 2000. – Т. 70. – Вып. 4. – С. 123–127.
151. Дроздов, А.Ю. Исследование эволюции микротрещины в модельных металлах при ионной имплантации. Компьютерный эксперимент / А.Ю.Дроздов, М.А.Баранов, В.Я.Баянкин // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. – 2004. – № 5. – С. 76–80.
152. Дроздов, А.Ю. Моделирование динамики развития нанодефектов в металлах при ионной имплантации и деформации: дис. ... канд. физ.-мат. наук: 01.04.01 / Дроздов, Александр Юрьевич. – Ижевск, 2007. – 160 с.
153. Карнаухов, И.Н. Увлечение междоузельного атома упругим полем движущейся дислокации / И.Н.Карнаухов, А.Е.Погорелов, М.С.Чернолевский // Металлофизика и новейшие технологии. – 2007. – Т. 29. – № 6. – С. 743–754.
154. Hikata, A. Interaction of dislocations with electrons and with phonons / A.Hikata, R.A.Johnson, C.Elbaum // Physical Review B: Condensed Matter and Materials Physics. – 1970. – Vol. 2. – № 12. – P. 4856–4863
155. Судзуки, Т. Динамика дислокаций и пластичность / Т.Судзуки, Х.Есианага, С.Такеути. – М.: Мир, 1989. – 296 с.
156. Новиков, И.И. Микромеханизмы разрушения металлов / И.И.Новиков, В.А.Ермишкин. – М.: Наука, 1991. – 368 с.
157. Ханнанов, Ш.Х. Микромеханизмы и кинетика развития пор в кристаллических материалах / Ш.Х.Ханнанов // Проблемы прочности. – 1982. – № 4. – С. 13–18.
158. Makaev, R.I. Atomic computer simulation of the structure of nanocrystals in a quasi-two-dimensional model / R.I.Makaev, A.A.Nazarov // Reviews on Advanced Materials Science. – 2006. – Vol. 11. – № 2. – P. 130–136.
159. Gao, Y. Molecular dynamics simulation of crack propagation on different slip planes of BCC iron / Y.Gao [et al.] // International Conference on Nanoscience and Nanotechnology, ICONN 2008, 25–29 February 2008. – Melbourne, 2008. – P. 226–229.
160. Becquart, C.S. Fracture properties of metals and alloys from molecular dynamics simulations / C.S.Becquart [et al.] // Materials Science and Engineering: A. – 1993. – Vol. 170. – № 1–2. – P. 87–94.
161. Abraham, F.F. Instability dynamics in three-dimensional fracture: An atomistic simulation / F.F.Abraham [et al.] // Journal of the Mechanics and Physics of Solids. – 1997. – Vol. 45. – № 9. – P. 1461–1471.
162. Rountree, C.L. Atomistic aspects of crack propagation in brittle materials: Multimillion atom molecular-dynamics simulations / C.L.Rountree [et al.] // Annual Review of Materials Research. – 2002. – Vol. 32. – P. 377–400.
163. Zhou, S.J. Dynamic crack processes via molecular dynamics / S.J.Zhou [et al.] // Physical Review Letters. – 1996. – Vol. 76. – № 13. – P. 2318–2321.
164. Heizler, S.I. Mode-I fracture in a nonlinear lattice with viscoelastic forces / S.I.Heizler, D.A.Kessler, H.Levine // Physical Review E: Statistical Physics, Plasmas, Fluids, and Related Interdisciplinary Topics. – 2002. – Vol. 66. – № 1. – P. 016126-1– 016126-10.
165. Abraham, F.F. Simulating materials failure by using up to one billion atoms and the world's fastest computer: Work-hardening / F.F.Abraham [et al.] // Proceedings of the National Academy of Sciences. – 2002. – Vol. 99. – № 9. – P. 5783–5787.
166. Swadener, J.G. Molecular dynamics simulation of brittle fracture in silicon / J.G.Swadener, M.I.Baskes, M.Nastasi // Physical Review Letters. – 2002. – Vol. 89. – № 8. – P. 085503-1.
167. Buehler, M.J. Hyperelasticity governs dynamic fracture at a critical length scale / M.J.Buehler, F.F.Abraham, H.Gao // Nature. – 2003. – Vol. 426. – № 6963. – P. 141–146.

168. Иванова, В.С. Разрушение металлов / В.С.Иванова. – М.: Металлургия, 1979. – 167 с.
169. Мешков, Ю.Я. Физические основы разрушения стальных конструкций / Ю.Я.Мешков. – Киев: Наукова думка, 1981. – 238 с.
170. Thompson, A.W. The relation between changes in ductility and in ductile fracture topography: Control by microvoid nucleation / A.W.Thompson // *Acta Metallurgica*. – 1983. – Vol. 31. – № 10. – P. 1517–1523.
171. Рыбин, В.В. Пересечение границ зерен полосами скольжения как механизм вязкого зернограницного разрушения / В.В.Рыбин, В.А.Лихачев, А.Н.Вергазов // *Физика металлов и металловедение*. – 1973. – Т. 36. – № 5. – С. 1071–1078.
172. Мартин, Дж.У. Микромеханизмы дисперсионного твердения сплавов / Дж.У.Мартин. – М.: Металлургия, 1983. – 167 с.
173. Журков, С.Н. К вопросу о физической основе прочности / С.Н.Журков // *Физика твердого тела*. – 1980. – Т. 22. – № 11. – С. 3444–3449.
174. Владимиров, В.И. Физическая природа разрушения металлов / В.И. Владимиров. – М.: Металлургия, 1984. – 280 с.
175. Регель, В.Р. Кинетическая природа прочности твердых тел / В.Р.Регель, А.И.Слуцкер, Э.Е.Томашевский. – М.: Наука, 1974. – 560 с.
176. Кусов, А.А. Фононная модель разрушения нагруженной атомной цепочки / А.А.Кусов // *Физика твердого тела*. – 1979. – Т. 21. – № 10. – С. 3095–3099.
177. Физика прочности и пластичности: сб. статей / Под ред. С.Н.Журкова. – Л.: Наука, 1986. – 152 с.
178. Виноградов, В.Н. Изнашивание при ударе / В.Н.Виноградов, Г.М.Сорокин, А.Ю.Албагачиев. – М.: Машиностроение, 1982. – 192 с.
179. Трибология: Международная энциклопедия. Т. XII: Особенности работы трибосопряжений в специфических условиях / Под общей ред. д.т.н., профессора, академика Санкт-Петербургской Инженерной академии К.Н.Войнова. – СПб.: Нестор-История, 2017. – 164 с.
180. Дроздов, Ю.Н. Континуальная и дискретная модели структурно-фазовых превращений в трущихся слоях материалов / Ю.Н. Дроздов, П.И. Маленко // *Проблемы машиностроения и автоматизации*. – 2013. – № 3. – С. 88–96.
181. Дроздов, Ю.Н. Континуальная и дискретная модели структурно-фазовых превращений в трущихся слоях материалов / Ю.Н. Дроздов, П.И. Маленко // *Информатизация и связь*. – 2013. – № 4. – С. 81–88.
182. Дроздов, Ю.Н. Структурно-фазовые превращения в контактирующих поверхностных слоях сталей с покрытиями при трении скольжения со смазочным материалом / Ю.Н. Дроздов, П.И. Маленко // *Вестник машиностроения*. – 2013. – № 10. – С. 38–45.
183. Маленко, П.И. Модельные представления термического удара при трении скольжения со смазочным материалом и оценка его влияния на структурно-фазовые превращения в поверхностных слоях сталей / П.И. Маленко, А.Ю. Леонов // *Известия ТулГУ. Серия: Технические науки*. – 2013. – Вып. 4. – С. 179–194.
184. Дроздов, Ю.Н. Модельные представления термического удара при трении скольжения с ресурсным смазыванием / Ю.Н. Дроздов, П.И. Маленко // *Инновации в науке, образовании и бизнесе–2013: тез. докл. XI Международ. науч. конф.* – Калининград, 2013. – Ч. 1. – С. 269–270.
185. Маленко, П.И. Анализ фазового состава никотрированных покрытий на конструкционных сталях / П.И. Маленко // *Известия ТулГУ. Серия: Технические науки*. – 2013. – Вып. 4. – С. 163–173.
186. Маленко, П.И. Анализ фазового состава никотрированных покрытий на теплостойких конструкционных сталях / П.И. Маленко, А.Ю. Леонов, К. Д. Релмасира

// Новые материалы и технологии в машиностроении: сб. науч. тр. – Брянск, 2016. – Вып. 23. – С. 12–16.

187. Моделирование кооперативного механизма диффузии методом молекулярной динамики / П.И. Маленко, К.Д. Релмасира, А.Ю. Леонов, О.В. Костыгова // Известия ТулГУ. Серия: Технические науки. – 2018. – Вып. 1. – С. 32–45.

188. Маленко, П.И. Термодинамическое моделирование взаимодействия стали 25Х3МЗНБЦА с газовыми средами в процессе трения скольжения с ресурсным смазыванием / П.И. Маленко, О.Ю. Гончаров // Известия ТулГУ. Серия: Технические науки. – 2014. – Вып. 11, ч. 1. – С. 125–132.

189. Маленко, П.И. Термодинамическое моделирование взаимодействия стали 25Х3МЗНБЦА с газовыми средами в процессе никотрирования / П.И. Маленко, О.Ю. Гончаров // Известия ТулГУ. Серия: Технические науки. – 2014. – Вып. 11, ч. 1. – С. 169–175.

190. Маленко, П.И. Обоснование выбора рациональных температурно-временных режимов никотрирования легированной конструкционной стали / П.И. Маленко // Физика и химия обработки материалов. – 2014. – № 1. – С. 77–80.

ПРИЛОЖЕНИЯ

ПРИЛОЖЕНИЕ А

ПА.1 Блок-схема программы моделирования $T_{всп}$

Корректировка программы компьютерного моделирования $T_{всп}$. Изменение программы моделирования температурных полей для дискретного контакта связано с учетом влияния случайных значений d_i и времен τ_i [1].

Блок-схема работы дополнительного оператора, введенного в программу моделирования температур, приведена на рисунке ПА.1. В оператор внесена стандартная подпрограмма выработки псевдослучайных чисел γ , равномерно распределенных в интервале $[0,1]$. С помощью преобразования $\chi = (-\ln \gamma)^{-\frac{1}{\beta}}$ производится формирование случайных чисел в интервале $[0,1]$, подчиняющихся некоторому $\varphi(d)$ распределению. Точность результатов моделирования Δ зависит от количества N сформированных значений d_i , которое обычно лимитируется объемом оперативной памяти компьютера, и может быть оценена зависимостью [2]

$$\Delta \leq 2 \sqrt{\frac{P_{np}(1 - P_{np})}{N}},$$

где P_{np} – оценка вероятности по частоте, определяемая в свою очередь из соотношения $N \cdot P_{np} \geq 10$ [3].

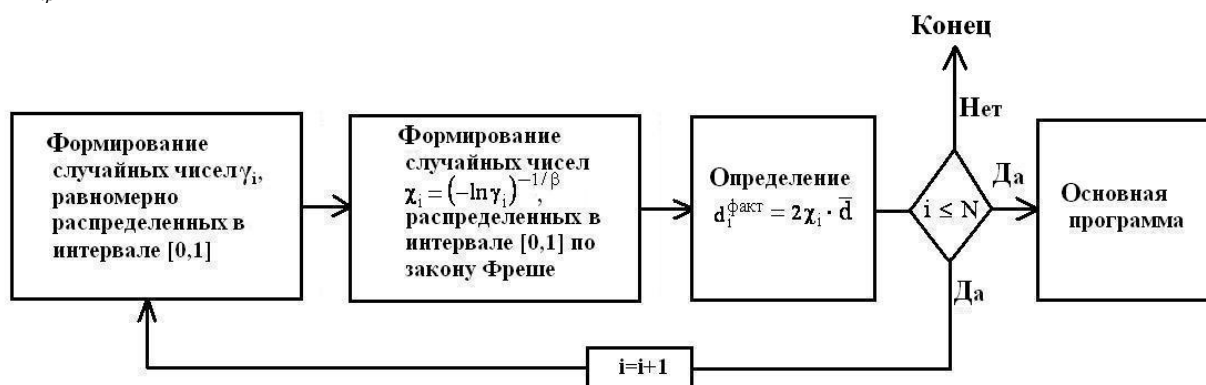


Рисунок ПА.1. – Моделирование температурных полей для трения со смазкой микровыступов шероховатых поверхностей: блок-схема подпрограммы формирования случайных значений длин контактов d_i

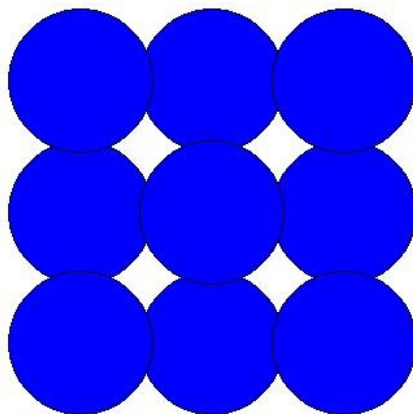
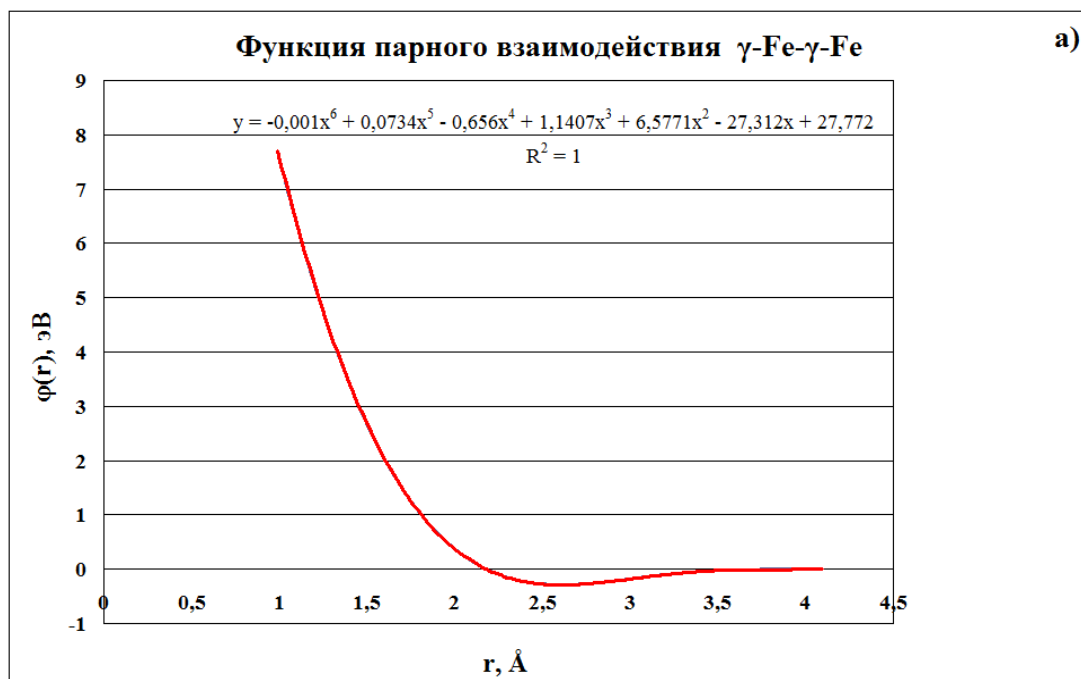
В программе были приняты значения $N=100$, $P_{np}=0,1$, тогда ошибка моделирования составила $\Delta \leq 0,06$, то есть $\Delta \leq 6\%$ с вероятностью $P=0,95$. Фактические значения $d_{факт}$ определялись из соотношения $d_{факт} = 2\chi \cdot \bar{d}$, где $\bar{d}$ – средние значения длин контактов, которые для классов шероховатости $\nabla 5 \dots \nabla 10$ ($R_a=2,5 \dots 0,08$) приведены в работе [4].

Полученная таким образом информация вводится в основную программу, которая и моделировала высокочастотные температурные колебания. Моделирование производилось при скоростях трения $1,5 \leq V \leq 10$ м/с и шероховатости поверхности $\nabla 7$ ($R_a=1,0 \dots 0,8$).

ПРИЛОЖЕНИЕ Б

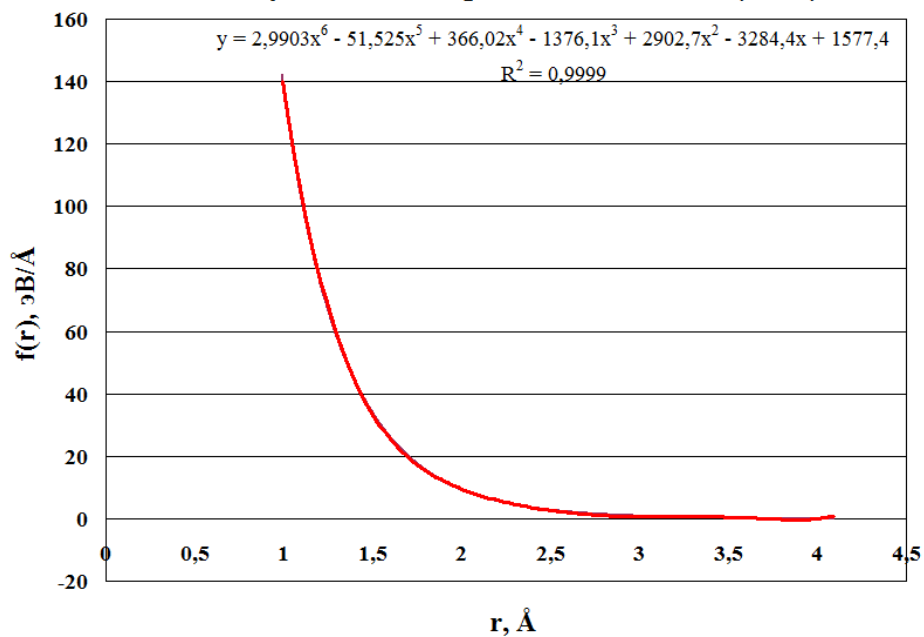
ПБ.1 Кристаллическая решетка и ПМВ для фазы γ' -Fe

Кристаллическая решетка γ' -Fe, построенная с помощью программы XMD, показана на рисунке ПБ.1, а на рисунке ПБ.2 а-г приведены графики потенциалов для γ' -Fe и их уравнений в виде полиномов.

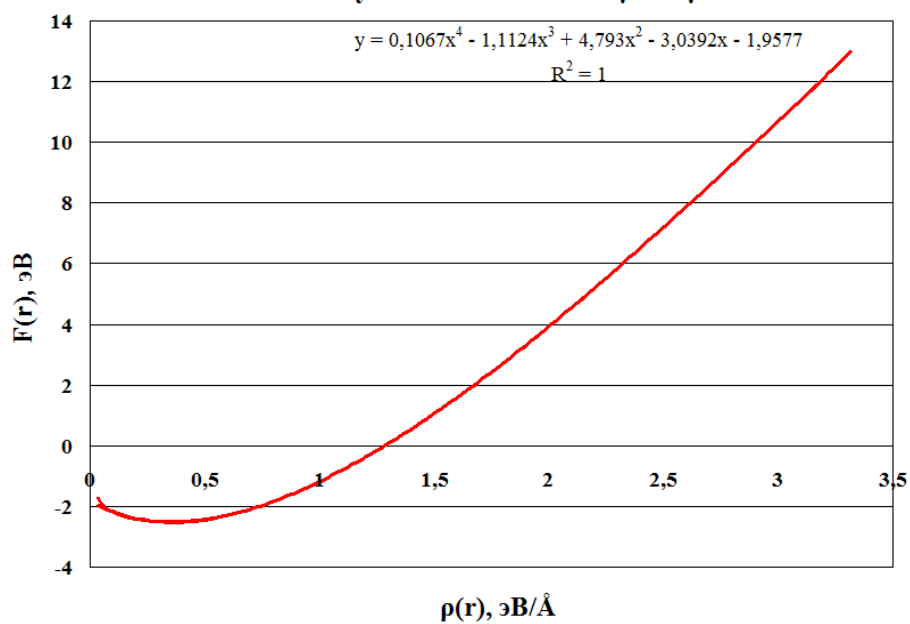
Рисунок ПБ.1. – Кристаллическая решетка γ' -Fe

Функция электронной плотности γ -Fe- γ -Fe

б)

Функция вложения γ -Fe- γ -Fe

в)



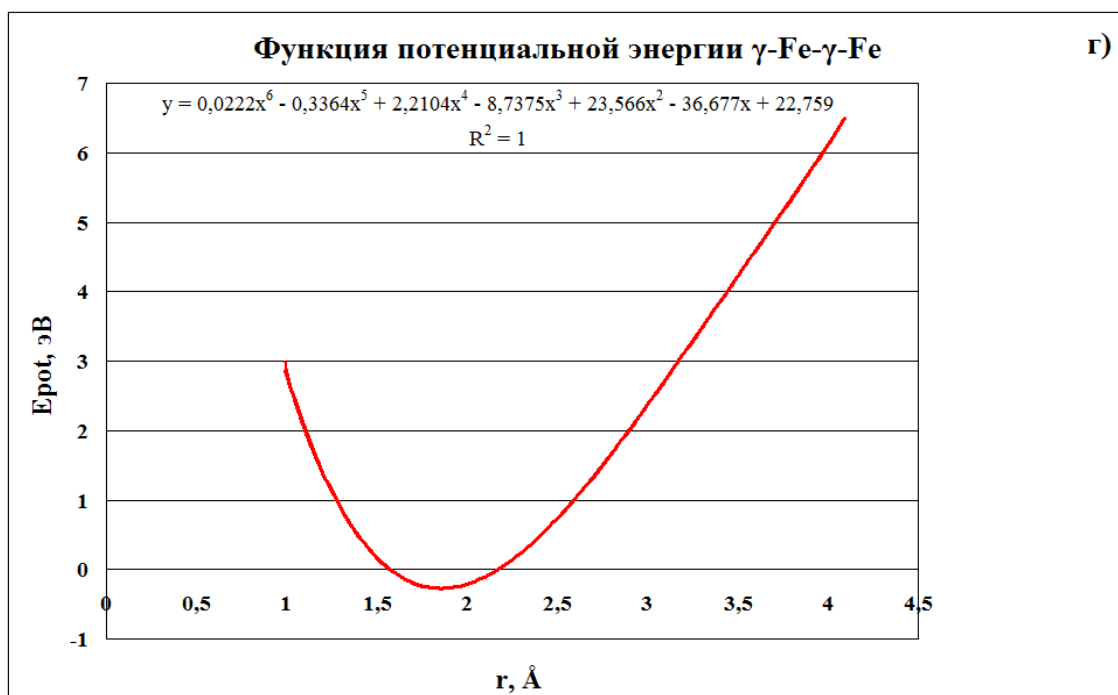


Рисунок ПБ.2. – Функции ПМВ для γ -Fe:

а – функция парного взаимодействия; б – функция электронной плотности;
в – функция вложения; г – функция потенциальной энергии

ПРИЛОЖЕНИЕ В

ПВ.1 Кристаллическая решетка и ПМВ для фазы ε -Fe

Разработанные потенциалы для ε -Fe базировались на основополагающих положениях работ [5, 6].

Парный потенциал рассчитывался по формуле

$$\varphi(r) = -E_i^0(1 + a^*)e^{-a^*} \psi\left(\frac{R - R_c}{h}\right), \quad (\text{ПВ.1})$$

где $E_i^0 = 0,117$ эВ; $a^* = \alpha_i \left(\frac{r}{R_i^0} - 1 \right)$; $R_i^0 = 2,38$ Å.

Таким образом, учитывалась отсечка $\psi(x)$ по работе [6].

Параметр α_i рассчитывался по формуле [7]

$$\alpha_i = \sqrt{\frac{9\Omega B}{E_{cg}}}, \quad (\text{ПВ.2})$$

где атомный объем $\Omega = 9,92 \cdot 10^{-30}$ м³; объемный модуль сжатия $B = 1,397 \cdot 10^{11}$ Н/м²; $E_{cg} = 4,213$ эВ $= 6,74 \cdot 10^{-19}$ Дж. $\alpha_i = 4,32$.

Радиус отсечки $r = 5,67337$ Å, $h = 0,59906$ Å [6].

$\psi\left(\frac{R - r_c}{h}\right) = \psi(x)$. При $x < 0$ $\psi(x) = \frac{x^4}{x^4 + 1}$, при $x > 0$ $\psi(x) = 0$.

Электронная плотность описывается формулой

$$\rho_i(r) = \sum_1^l \beta^{(l)} \left(\frac{r}{r_l} - 1 \right), \quad (\text{ПВ.3})$$

где $l = 0, 1, 2, 3$.

С учетом частных плотностей (весовых коэффициентов $t_i^{(l)}$) уравнение (ПВ.3) принимает вид

$$\bar{\rho}(r) = \sqrt{t_i^{(l)} [\rho_i(r)]^2}. \quad (\text{ПВ.4})$$

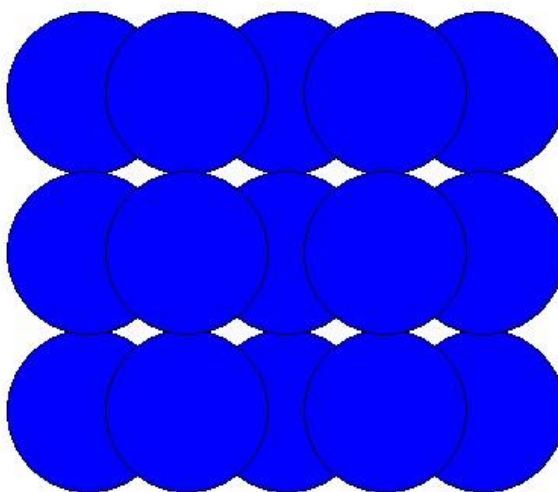
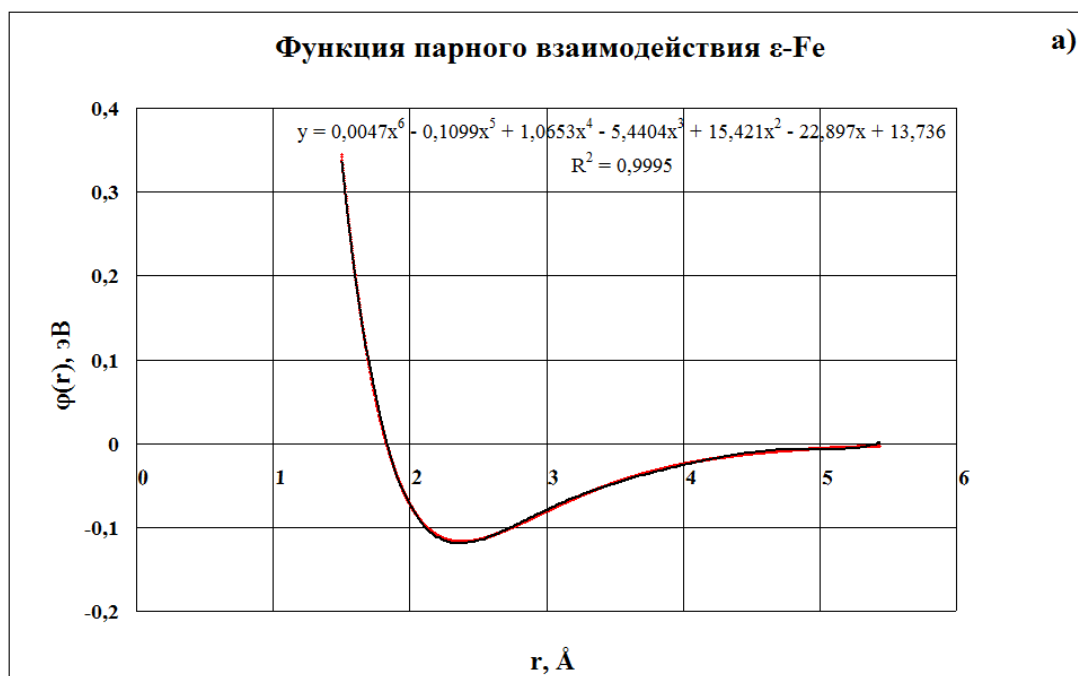
Энергия вложения атома определяется из следующей зависимости

$$F(\rho) = A E_{cg} \rho \ln \rho, \quad (\text{ПВ.5})$$

где $A_i = 0,81$;

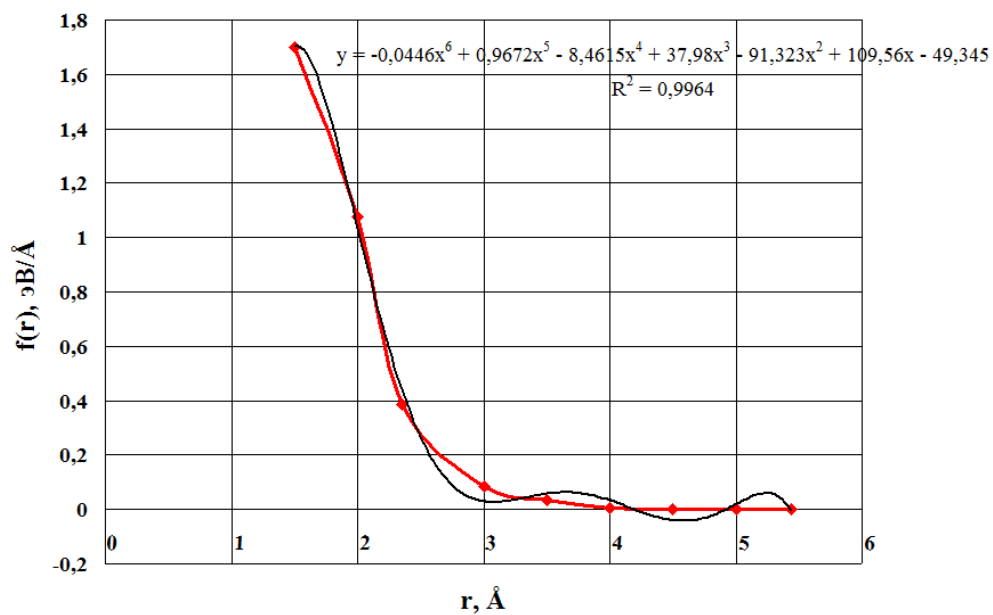
$E_{cg} = -4,213$ эВ.

Кристаллическая решетка ε -Fe, построенная с помощью программы XMD, показана на рисунке ПВ.1, а на рисунке ПВ.2 а-г приведены графики потенциалов для ε -Fe и их уравнений в виде полиномов.

Рисунок ПВ.1. – Кристаллическая решетка ε -Fe

Функция электронной плотности ε -Fe

б)

Функция вложения ε -Fe

в)

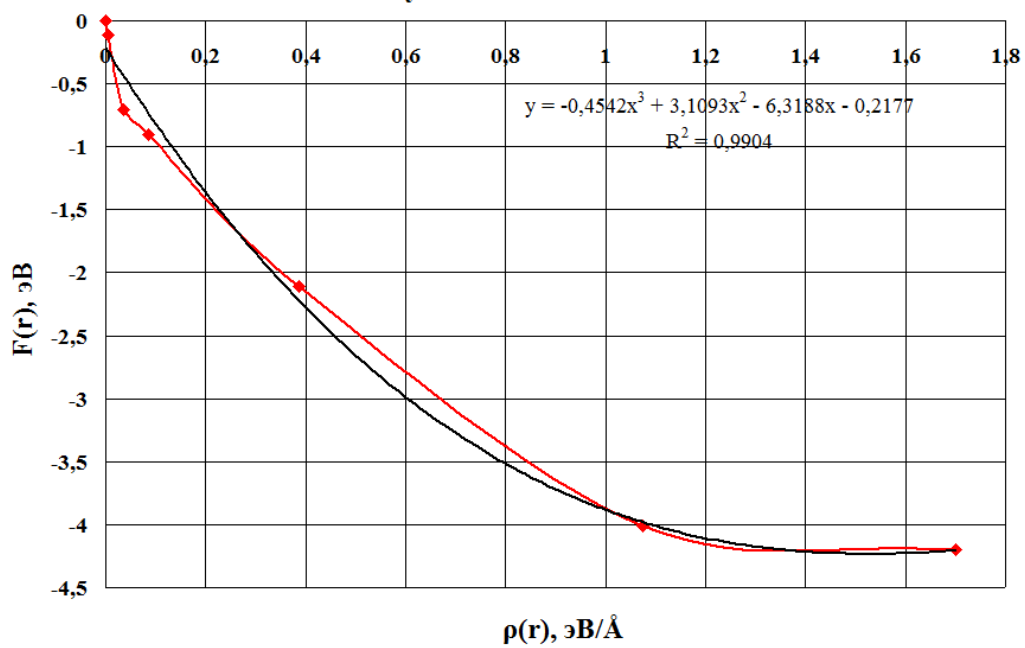




Рисунок ПВ.2. – Функции ПМВ для ε -Fe:
а – функция парного взаимодействия; б – функция электронной плотности;
в – функция вложения; г – функция потенциальной энергии

Список литературы

1. Маленко, И.П. Исследование температур на дискретных контактах при трении скольжения со смазочным материалом / И.П.Маленко, П.И.Маленко // Вестник машиностроения. – 2009. – № 1. – С. 38–44.
2. Яглом, А.М. Корреляционная теория стационарных случайных процессов / А.М.Яглом. – Л.: Гидрометеиздат, 1981. – 279 с.
3. Вентцель, Е.С. Теория вероятностей / Е.С.Вентцель. – М.: Наука, 1969. – 572 с.
4. Власов, В.М. Модель акустической диагностики поверхности трения в условиях смазывания / В.М.Власов, П.И.Маленко, В.К.Зеленко // Трение и износ. – 1999. – Т. 20. – № 5. – С. 489–495.
5. Baskes, M.I. Modified embedded-atom potentials for cubic materials and impurities / M.I.Baskes // Journal of Physics: Condensed Matter. – 2004. – Vol. 46. – № 5. – P. 2727–2742.
6. Chamati, H. Embedded-atom potential for Fe and its application to self-diffusion on Fe (100) / H.Chamati, N.I.Papanicolaou, Y.Mishin, D.A.Papaconstantopoulos // Surface Science. – 2006. – Vol. 600. – № 9. – P. 1793–1803.
7. Daw, M.S. Embedded-atom method: Derivation and application to impurities, surfaces, and other defects in metals / M.S.Daw, M.I.Baskes // Physical Review B: Condensed Matter and Materials Physics. – 1984. – Vol. 29. – № 12. – P. 6443–6453.

ПРИЛОЖЕНИЕ Г

ПГ.1 Акты о внедрении результатов научно-исследовательской работы

УТВЕРЖДАЮ
Генеральный директор ООО «Эксперт СВ»
Сорокина О.Г.
_____ г..

АКТ

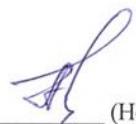
о внедрении научно-исследовательской работы

Разработка ФГБОУ ВО «Тульский государственный университет» «Методика оценки процессов эволюции пор и трещин теплостойких сталей с покрытием при трении скольжения с ресурсным смазыванием» поэтапно внедрена с 01.01.2016 г. в ООО «Эксперт СВ».

Назначение разработки заключается в совершенствовании методик оценки процессов эволюции пор и трещин в поверхностных слоях никотрированных покрытий на теплостойких сталях при трении с ресурсным смазыванием.

Организационно-технические преимущества внедрения заключаются в выдаче рекомендаций по критериальной оценке ресурсной износостойкости поверхностной зоны и залечиванию пор и трещин в результате диссипации энергии и релаксации внутренних напряжений.

Зам. генерального директора



(Новожилов А.Е.)

Аспирант кафедры ФММ



(Релмасира К.Д.)



Акционерное общество (АО)

"ТУЛАТОЧМАШ"

Коминтерна ул., д. 24, Тула, 300041
 Телефон: (4872) 32-92-70. Факс: (4872) 30-93-23, 32-93-23
<http://tulatochmash.ru> E-mail: info@tulatochmash.ru
 ОКПО 07540142, ОГРН 1027100738565, ИНН/КПП 7106002829/710150001

02.04.2019 № 924-08/76

На № _____ от _____

УТВЕРЖДАЮ

Генеральный директор
 АО "Тулаторчмаш"

В.Н. Филиппов

04 2019 г.

**АКТ****о внедрении научно-исследовательской работы**

Разработка ФГБОУ ВО "Тульский государственный университет" "Методика оценки ресурсной долговечности теплостойких сталей с покрытием при фрикционном нагреве в условиях трения скольжения с ресурсным смазыванием" поэтапно внедрена с 01.01.2018 г. на предприятии АО "Тулаторчмаш" в составе комплекса испытательной лаборатории.

Назначение разработки заключается в совершенствовании методик проведения стендовых испытаний изделий и выдаче рекомендаций по эффективной диагностике ресурсной долговечности изделий в условиях фрикционного нагрева.

Организационно-технические преимущества внедрения заключаются в замене традиционных методов проведения стендовых испытаний на ресурс на ускоренные и более эффективные, основанные на измерении температур в зоне контакта и их сопоставлении с результатами, предложенными в методике. Экономический эффект определяется сокращением трудоемкости проведения стендовых испытаний.

Расчет экономической эффективности находится на предприятии и рассылке не подлежит.

От предприятия:

Главный конструктор

А.А. Саулин

Начальник испытательной лаборатории

В.А. Кусый

От исполнителя:

Руководитель разработок:

к.т.н., доц. П.И. Маленко

Разработчики:

аспирант А.Ю. Леонов

аспирант К.Д. Релмасира

УТВЕРЖДАЮ
Проректор по учебной работе
В.В.Котов

« » 2017



АКТ

о внедрении результатов диссертации Релмасира Капреси Джолан
представленной на соискание ученой степени к.т.н. на тему «Влияние эволюции
пор и трещин на износостойкость теплостойких сталей с покрытием при
фрикционном нагреве в процессе трения скольжения с ресурсным смазыванием»
в учебный процесс кафедры Физика металлов и материаловедение
Политехнического института ФБГОУ ВО «ТулГУ»

Комиссия в составе:

Председатель: Г.В.Маркова, зав. каф. ФММ, д.т.н., профессор
Члены комиссии: И.В.Тихонова, к.т.н., доцент,
С.С.Гончаров, к.т.н., доцент.

составили настоящий акт о том, что результаты диссертации Релмасиры К.Д.
«Влияние эволюции пор и трещин на износостойкость теплостойких сталей с
покрытием при фрикционном нагреве в процессе трения скольжения с ресурсным
смазыванием» внедрены и используются в учебном процессе кафедры ФММ в
виде методики моделирования структурообразования на основе метода
молекулярной динамики «Влияние импульсных температурных процессов на
структурообразование в теплостойких сталях с покрытием» по дисциплине
«Математическое моделирование в металлургии» для магистров, обучающихся по
направлению 22.04.02 «Металлургия», профиль «Металловедение и термическая
обработка металлов и сплавов».

Председатель комиссии:

Г.В.Маркова

Члены комиссии:

И.В.Тихонова

С.С.Гончаров