

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

Релмасира Капреси Джолан

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

05.16.09 – Материаловедение (металлургия)

Автореферат диссертации
на соискание ученой степени кандидата технических наук

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

Москва – 2021

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы. В течение последних 30-^{ти} лет в Тульском государственном университете проводятся исследования, связанные с повышением ресурсной долговечности узлов технологических машин специального назначения (ТМСН). Конструктивная прочность данных изделий обеспечивается теплостойкими сталями с легирующими добавками ниобия, циркония и ванадия. Для получения требуемой ресурсной долговечности используется процесс низкотемпературной нитроцементации (никотрирование). Были установлены оптимальные с точки зрения обеспечения заданного ресурса режимы никотрирования, определены механизмы изнашивания никотрированных покрытий и диффузионной зоны. Стендовые испытания подтвердили результаты проведенных исследований. Однако полученные результаты относились к изделиям, в процессе эксплуатации которых фрикционный нагрев не является доминирующим. Вместе с тем для современных ТМСН характерно ужесточение режимов эксплуатации (удельных давлений и скоростей трения), приводящих, в конечном счете, к увеличению роли температурного фактора. В работах П.И. Маленко экспериментально установлено, что в результате фрикционного нагрева в поверхностном слое происходят структурно-фазовые изменения, переменные по температурным зонам. Однако, влияние фрикционного нагрева на процесс эволюции пор и трещин, которое определяет механизмы изнашивания и ресурс узлов ТМСН оставалось не исследованным. В результате не установлены как особенности фрикционного нагрева, так и специфика механизмов разрушения поверхностной зоны трущихся деталей. Решение данных проблем в рамках науки о трении (термотрибология) и науки о разрушении металлов не учитывает особенностей процесса трения и во многих случаях является недостаточно корректным. Следует отметить, что в значительной степени устранить отмеченные недостатки позволяет исследование с применением компьютерного моделирования – метода молекулярной динамики (ММД), посредством которого определяются параметры процесса эволюции пор и трещин и механизмов разрушения.

Степень разработанности темы. Эволюция пор и трещин в процессе эксплуатации определяется дислокационными и диффузионными процессами. Результаты исследований дислокационных процессов при трении, проведенные Л.М. Рыбаковой, позволили заложить основы научного направления, названного автором «динамическое металловедение». Дальнейшее развитие данного направления связано с учетом фактора фрикционного нагрева. Влияние фрикционного нагрева на ресурсную долговечность пар трения обычно оценивается с помощью измерения объемных температур $T_{об}$. Однако объемные температуры $T_{об}$ лишь опосредованно подчеркивают влияние температурного фактора на структурно-фазовые изменения – образование вторичных структур (ВС) в поверхностной зоне. 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. Цель работы: установление влияния эволюции пор и трещин при фрикционном нагреве на ресурсную долговечность теплостойких сталей с покрытием.

В этой связи возникает необходимость решения следующих задач:

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.

Практическая значимость результатов работы состоит в разработке и внедрении 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 ММД.

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 ВС осуществляли на оптическом Neophot-21 и электронном микроскопе УМВ-100В; напряженное состояние, характеристики субструктуры и фазовый состав ВС 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 осуществлялось на основе количественных методов теории диффузии. Исследования на атомном уровне производились на основе ММД. Для этих целей была произведена корректировка программы моделирования ХМД 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.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении отмечается актуальность темы, определена цель и задачи, решаемые в диссертации. Выделены основные результаты, показана научная новизна работы, практическая значимость и реализация результатов работы в производстве и в учебном процессе, методология и методы исследований, положения, выносимые на защиту, степень достоверности и апробация результатов, публикации, структура и объем работы.

Первая глава содержит обзор отечественной и зарубежной литературы, посвященный теоретическим и экспериментальным исследованиям, а также моделированию эволюции пор и трещин в металлах при внешних воздействиях. К особенностям эксплуатации рассматриваемого класса изделий, носящим циклический характер, следует отнести наличие ресурсного смазывания. В данном случае после окончания каждого цикла узел изделия подвергается чистке с последующим смазыванием. Следовательно, при изучении изнашивания поверхностной зоны влияние частиц износа в смазке на ресурс следует исключить. С учетом диапазона зазоров в соединениях $h=(0,5 \dots 4) \cdot 10^{-5}$ м эксплуатация изделий будет происходить в условиях полужидкостного и граничного трения.

Вопросы триботехнического (динамического) металловедения решались на основе работ Ю.М. Лахтина, Л.М. Рыбаковой, Л.И. Куксеновой, Л.Г. Ворошнина, В.М. Власова и других. Большой вклад в изучение структуры и свойств поверхностного слоя и его связи с эксплуатационными характеристиками внесли Ю.Н. Дроздов, Д.Н. Гаркунов, И.Г. Горячева, И.А. Буяновский, М.Н. Добычин, Б.И. Костецкий, Н.К. Мышкин, К.Н. Войнов, С.Н. Журков, В.Н. Виноградов. При изучении параметров фрикционного нагрева автор основывался на работах как зарубежных: Ф.П. Боудена, Д.Тейбора, Н. Блока, Ф. Шаррона, Г. Гребера, Д. Егера, так и отечественных ученых: М.В. Коровчинского, В.С. Щедрова, А.В. Чичинадзе, Э.М. Карташова.

Применительно к теплостойким сталям с покрытием влияние температурного фактора на структурно-фазовые изменения в поверхностной зоне рассматривалось только в работах П.И. Маленко. Приведенные в этих работах экспериментальные результаты касались узлов автоматики ТМСН. Оказалось, что в температурных диапазонах от 450 до 900 К происходят структурно-фазовые изменения с образованием ВС, которые и определяют ресурс узлов. Для более детального анализа целесообразно произвести исследования, связанные с определением параметров фрикционного нагрева. Для этих целей необходимо, во-первых, осуществить корректную постановку ТЗТ. В термотрибологии постановка задачи фрикционного нагрева, осуществленная Ф. Шарроном (США), базировалась на гипотезе разделения тепловых потоков между контактирующими телами согласно им физико-механическим свойствам. Конечным этапом являлось раздельное решение тепловых задач для контактирующих тел.

Между тем в термодинамике необратимых процессов (ТНП) в качестве исходных параметров для исследования (температура, давление, объем) теплота отсутствует. В этой связи в качестве исходной принята гипотеза о разделении температурных потоков (как

основных) и тепловых потоков (как вторичных). Следовательно, первоначально следует определить температуру смазки, максимальное значение которой будет на подвижной детали. Тепловой же поток возникает вследствие температурного градиента между подвижной и неподвижной деталями в узле.

Вторая гипотеза, положенная в предполагаемые исследования, состоит в том, что температурные процессы на гладких и шероховатых поверхностях имеют различную природу. Для гладких поверхностей температуры трения носят плавный характер, в то время как на шероховатых отмечена пульсация температур – термоциклирование. Вследствие этого на поверхности трения возникает ТУ. Распространяясь по глубине поверхностной зоны, напряжения ТУ (термоупругие, упругие, обратимые и необратимые пластические) приводят к повышению напряжений, вызывающих диффузионные процессы (восходящая диффузия и дислокационное упрочнение).

Третья гипотеза состоит в том, что процесс повреждаемости поверхностной зоны носит многоступенчатый характер. Первый этап – это поверхностная повреждаемость за счет адгезии и схватывания, происходящая на шероховатой поверхности. Следующий этап относится к повреждаемости по глубине поверхностной зоны, связанный с эволюцией пор и трещин в поверхностной зоне. По своей физической природе данные процессы различны. Следовательно, для их исследования необходимы и различные подходы. Исходя из вышеизложенного, вытекает и тема предлагаемой диссертационной работы.

Во **второй главе** проанализированы причинно-следственные связи между температурными процессами и структурно-фазовыми изменениями в поверхностной зоне. Первоначально был произведен выбор оптимальных марок теплостойких сталей из семи марок, используемых в производстве (табл. 1).

Учитывая влияние пульсирующих ударных и температурных нагрузок, при эксплуатации были выбраны стали, имеющие наибольшую ударную вязкость: стали 25Х3М3НВЦА и 25Х3М3НБЦА, что обеспечивает наибольшую конструктивную прочность. Дальнейший выбор производился с учетом нанесенного защитного покрытия (никотрирование). Для стали 25Х3М3НВЦА характерно наличие в поверхностном слое магистральных разгарных трещин, что не допускается по техническим требованиям. В этой связи в качестве базовой была выбрана сталь 25Х3М3НБЦА, имеющая следующий химический состав (табл. 2).

Таблица 1 – Механические свойства конструкционных сталей

Номер марки стали	Марка стали	$\sigma_{н.ц.}$, МПа	$\sigma_{0,2}$, МПа	$\sigma_{в}$, МПа	δ , %	ψ , %	KCU, МДж/м ²	H ₀ , МПа
1	25Х3М3НБЦА	920	1060	1200	15	55	4,9	4800
2	25Х3М3Н5БЦА	960	1040	1200	13,5	42	2,9	3500
3	25Х3М3Н5ВБЦА	940	1030	1220	11	50	3,1	4300
4	25Х3М3НЦА	850	930	970	-	-	3,1	4300
5	25Х3М3НФЦА	1100	1180	1330	10,5	48	2,4	3200
6	25Х3М3НВЦА	880	960	1120	10	48	4,8	3300
7	25Х3МНЦА	880	970	1110	12	48	3,3	4400

Таблица 2 – Химический состав стали 25Х3М3НБЦА

	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

Помимо ударной вязкости к стали предъявляются требования обеспечения ее механической обрабатываемости. Для реализации данного требования заготовки подвергались термической обработке по схеме нормализации, высокого отпуска, закалки

и трех стадий отпуска (предварительного, промежуточного и окончательного). В результате в стали исходная структура – сорбит трансформировалась в троостит. При этом микротвердость стали уменьшалась до $H_0=1970$ МПа.

При выборе метода упрочнения поверхностной зоны с целью повышения ее ресурсной долговечности, учитывая сложнoleгированный состав базовой стали, использовалось сочетание термодинамического и экспериментального методов. Анализ литературных источников и собственные исследования показали, что наиболее рациональным является процесс низкотемпературной нитроцементации (никотрирование). В никотрированном слое присутствуют фазы Fe_3N , Fe_4N , Fe_3C и $Fe_3(CN)$. 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 (рис. 1 а). Процесс трещинообразования в поверхностной зоне стали 25Х3М3НБЦА представлен на рисунке 1 б. Металлографический анализ гетерогенности никотрированных зон стали 25Х3М3НБЦА показал наличие в них пор различных размеров (рис. 1 в).

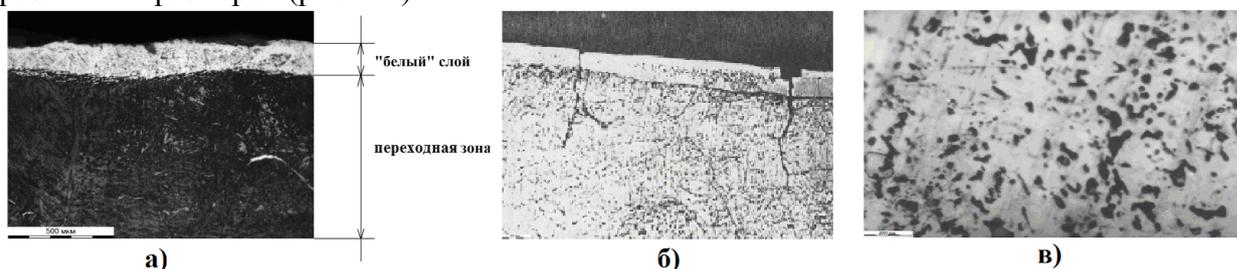


Рисунок 1. – Структура поверхностной зоны стали 25Х3М3НБЦА после никотрирования: а – микроструктура никотрированной стали 25Х3М3НБЦА; б – распространение трещин в поверхностных слоях никотрированной стали 25Х3М3НБЦА; в – характер распределения пористости на поверхности никотрированной стали 25Х3М3НБЦА

Процесс никотрирования осуществлялся в газовой среде (аммиак/эндогаз), температуре $T \leq 600$ °С, рациональном соотношении газов C/N и при постоянном давлении. 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. Итогом термодинамического анализа является определение толщины h карбонитридного слоя от соотношения $R=C/N$ и температуры насыщения.

Содержание элементов по глубине поверхностной зоны никотрированной стали 25Х3М3НБЦА приведено в таблице 3.

Таблица 3 – Содержание элементов в поверхностной зоне

	C	Cr	Mo	Ni	Si	Mn	Nb	Zr	V	Cu	Fe
Химический анализ	1,48788	3,21092	1,93824	0,59933	0,2386	0,10164	0,0902	0,008	0,1515	0,113	94,4408
Матрица	1,78	3,19	1,62	0,4	0,35	0,13	0,18	0,03	0,17	-	94,89

Кинетика образования основных фаз приведена на рисунке 2.

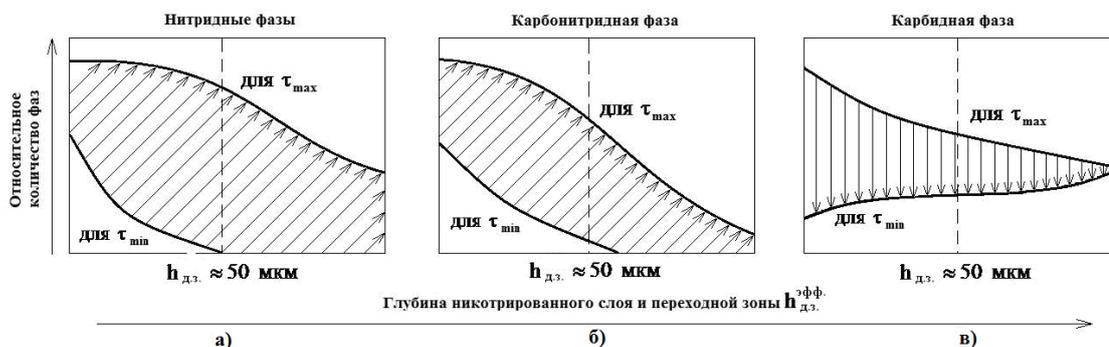


Рисунок 2. – Кинетическая схема формирования основных фаз в нитрированном слое и переходной зоне конструкционной стали 25X3M3NBЦ:

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

Исследование процессов структурно-фазовых превращений в поверхностной зоне в результате фрикционного нагрева производили на машине трения, работающей по схеме “штифт-диск”. В качестве смазки использовали индустриальное масло ИС-45. Фрикционный нагрев определяли с помощью термопары “хромель-капель”, зачеканенной в штифт на расстоянии 0,5 мм от поверхности трения. Величина фрикционного нагрева определялась в зависимости от принятых условий эксплуатации: $V_{mp}=1 \dots 10$ м/с, $\sigma=1 \dots 10$ МПа, $h=(5 \dots 40) \cdot 10^{-6}$ м.

Исследование элементного состава поверхностной зоны с помощью растрового микроскопа показало полное исчезновение углерода С и азота N и появление кислорода O. Для более детального представления о фазовом составе ВС были сняты рентгенограммы с поверхности образцов нитрированной стали 25X3M3NBЦ, испытанных на машине трения в течение времени $\tau_{изм}$, соответствующие условиям трения девяти исследуемых режимов (табл. 4).

Таблица 4 – Кинетические времена и температурные характеристики процесса образования ВС

$T_{изм}, K$	440	480	520	610	650	750	810	840	870
$\tau_{изм}, c$	1200	650	320	100	65	35	24	20	16

В результате получены распределения исходных (α -Fe; γ -Fe; ϵ -Fe) и триботехнических (Fe_3O_4 ; Fe_2O_3 ; $MoSi_{0,65}$; FeS_2 ; MoS_2 , а также $FeSi$ и Fe_2P) фаз в связи с изменением температуры $T_{изм}$. Ингредиентами для образования ВС служат окружающая среда (воздух и смазка) и элементы распада исходных структур в поверхностной зоне.

Характер распределения вторичных фаз по температурным зонам представлен на рисунке 3.

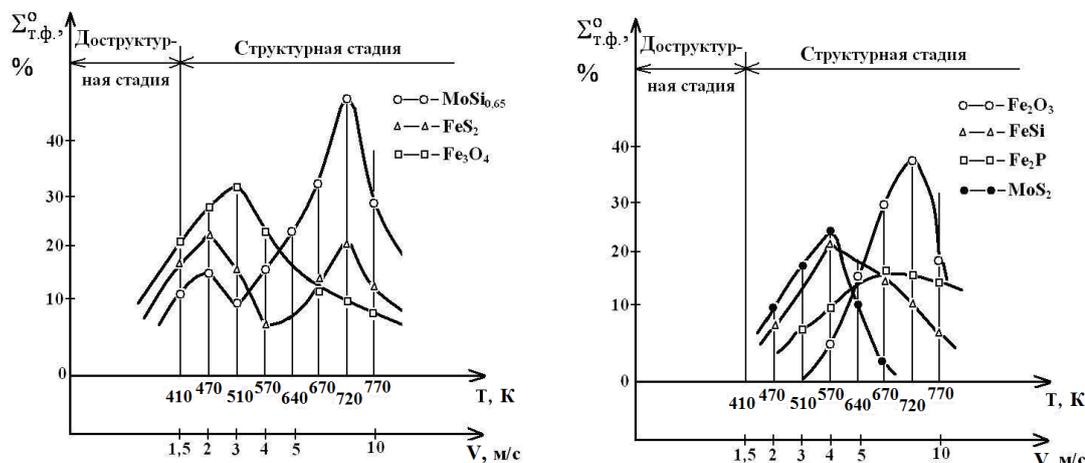


Рисунок 3. – Изменение объёмного содержания вторичных фаз в различных температурных зонах

Плотность дислокаций ρ определяли с помощью рентгеновского дифрактометра посредством измерения ширины рентгеновских линий β в исходном и деформированном

трением состоянии. В качестве критерия оценки состояния дислокаций использовали соотношение $\Delta\beta = \frac{\beta_0}{\beta_h}$, (β_0 – физическая ширина на минимальном расстоянии от поверхности трения; β_h – физическая ширина на расстоянии h от поверхности). При $\Delta\beta > 1,6$ имеет место неупорядоченное состояние в виде леса; при $\Delta\beta \leq 1,6$ – упорядоченное состояние в виде стенок (рис. 4).

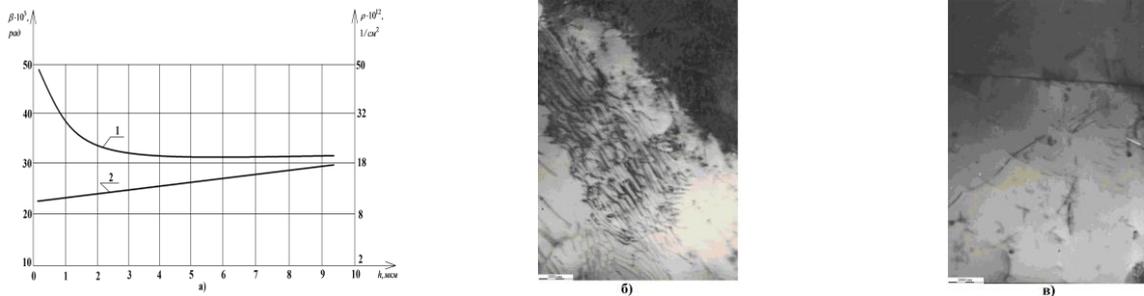


Рисунок 4. – Изменение состояния дислокационных построений:
 а – градиенты β и ρ по глубине трибослоя стали 25Х3МЗНБЦА;
 б – дислокационный лес; в – дислокационная стенка

Очевидно, что в результате трения происходит упорядочение дислокаций.

Постановка ТЗТ с учетом топографии поверхности трения

Для шероховатых поверхностей дифференциальные уравнения записываются следующим образом.

Смазочный материал

$$\frac{\partial T_1(x, z, \tau)}{\partial \tau} + W - T_{нач} = a_1 \nabla^2 T_1, \quad (1)$$

где $W = 0,565(c\rho)_2 \bar{T}_{нач} V_{тр}$ – плотность мощности теплового потока, [Вт/м²]; c_2 , ρ_2 , a_1 – соответственно теплоемкость, плотность и коэффициент температуропроводности смазки; $T_{нач}$ – начальная температура; $\nabla^2 T_1$ – оператор Лапласа.

Твердое тело

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

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

Начальные условия

$$T_1(x, y, z, 0) = T_2(x, y, z, 0) = const. \quad (3)$$

Граничные условия

$$\begin{aligned} \frac{\partial T(x, z, \tau)}{\partial z} &= Bi_1 \cdot Nu_1 [T(x, z, \tau) - T_{нач}] - \text{подвод тепла;} \\ \frac{\partial T(x, z, \tau)}{\partial z} &= Bi_2 \cdot Nu_2 [T(x, z, \tau) - T_{нач}] - \text{отвод тепла,} \end{aligned} \quad (4)$$

где Bi и Nu – соответственно критерии Био и Нуссельта.

В связи с невозможностью при такой постановке получить аналитическое решение задачи использовали моделирование процесса (метод конечных разностей). Временной шаг определялся по формуле $\partial\tau = \frac{dx}{12a}$, где $dx = 10^{-8}$ м; a – коэффициент температуропроводности смазки и твердого тела. На рисунке 5 а приведена схема контактирования, на рисунке 5 б – график $T = f(z, \tau)$. С учетом величины шага моделирования $dx = 10^{-8}$ м температура была исследована аналитически.

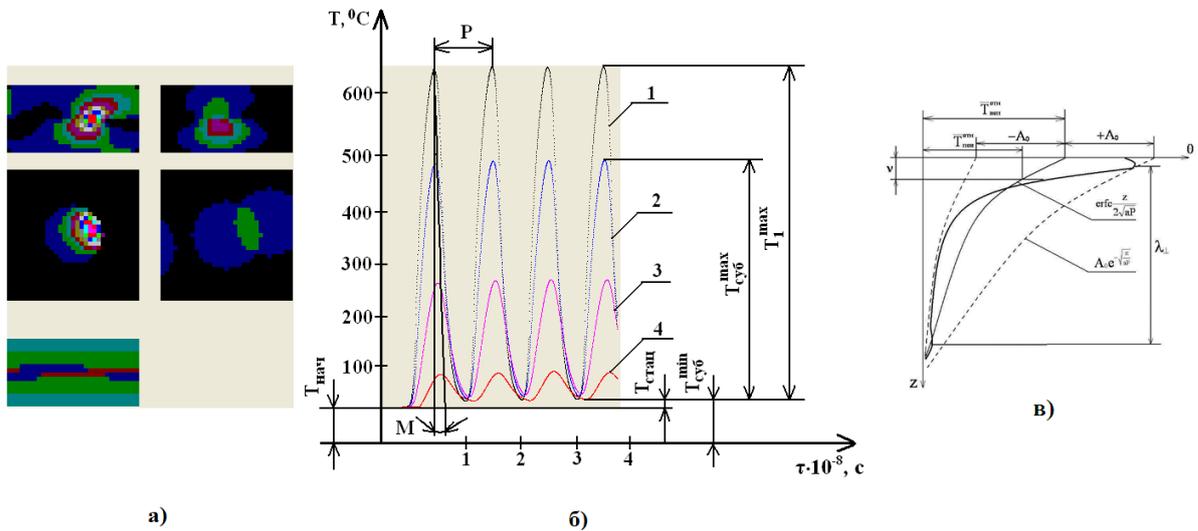


Рисунок 5. – Часть реализации результатов моделирования: а – схема контактирования; б – температурные поля в центре неподвижного контакта в зависимости от времени контактирования τ и глубины расположения z ($V_{mp}=10$ м/с): 1 – изменение температуры смазки, 2 – изменение температуры на субшероховатостях $T_{суб}$, 3 – изменение температуры на глубине $z=10^{-6}$ м, 4 – изменение температуры на глубине $z=3 \cdot 10^{-6}$ м; в – распределение относительной температуры $T_{отн}$

Используя теорию тепловых волн, разработанную Г. Гребером, запишем уравнение для колебательного процесса проникновения температур на глубине z стенки

$$T_{отн} = \frac{\bar{T}_{суб}}{T_{см}} \cdot \operatorname{erfc} \frac{z}{2\sqrt{a_2\tau}} + A_0 \cdot e^{-z\sqrt{\frac{\pi}{aP}}} \cos \left[\frac{2\pi}{P} \tau - \left(z\sqrt{\frac{\pi}{a_2P}} + M \right) \right], \quad (5)$$

где $a=0,119 \cdot 10^4$ м²/с – коэффициент температуропроводности стенки; $A_0=0,65$ – максимальная амплитуда температуры на контакте; $M=0,11\pi$ рад – смещение по фазе температур стенки относительно температуры смазки. Решение уравнения (5) представлено на рисунке 5 в.

Аналогично была получена температура вспышки $T_{всп}$ ($dx=10^{-6}$ м), относящаяся к микронеровностям. В результате процесс трансформации температур в поверхностной зоне происходит по следующей схеме:

$$T_{max} = T_{см} \rightarrow T_{суб} \rightarrow T_{всп} \rightarrow T_{нов} \rightarrow T_{об}, \quad (6)$$

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

Модельные представления термического удара и исследование его трансформации в поверхностной зоне

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: 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. Высокие значения темпа тепловвода позволяют говорить о существовании ТУ, инициированных на площадках контакта микронеровностей температурой трения.

Параметры ТУ исследованы в работах Ю.Н. Дроздова и П.И. Маленко (континуальное приближение) и сотрудников ФГУП “РФЯЦ–ВНИИТФ им. академика Е.И. Забабахина”, г. Снежинск, (дискретный подход).

Результаты решения задачи в континуальном приближении в графическом виде приведены на рисунке 6.

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

$$P = -\frac{\sigma_{zz} + \sigma_{xx} + \sigma_{yy}}{3}, [\text{Па}] \quad (7)$$

где $\sigma_{xx} = \sigma_{yy} = \frac{\nu}{1-\nu} \sigma_{zz}, [\text{Па}].$

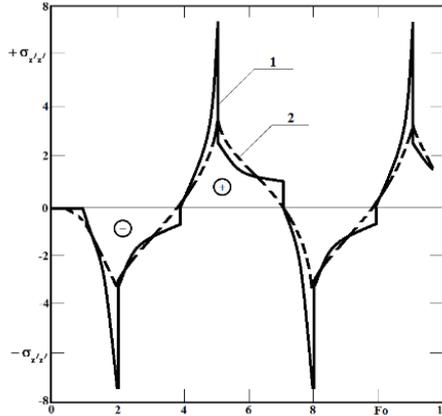


Рисунок 6. – Зависимость изменения напряжения σ_{zz} от времени Fo при температурах $T=870 \text{ К}$ (1) и $T=470 \text{ К}$ (2)

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

Таким образом, приповерхностный слой находится в вязкоупругом состоянии в течение времени релаксации $\tau=(1 \dots 2) \cdot 10^{-6} \text{ с}$ и в нем возникают вязкоупругие напряжения.

При дискретном подходе (А.Я. Учаев и другие) давление определяется по формуле

$$P \sim \int_{T_0}^{T_1} \Gamma c \rho dT, \quad (8)$$

где Γ – параметр Грюнаизена.

Конечной целью решения ТЗТ является исследование трансформации напряжений ТУ в поверхностной зоне. За основу исследований принята классическая диаграмма Гука “ σ - ε ”, позволяющая решать упругопластические задачи типа “сжатие-расширение” (рис. 7 а). Решение, осуществленное в качественном виде, представлено на рисунке 7 б. На диаграмме Гука выделен участок AA_1 , расположенный выше предела текучести σ_T – это обратимая часть пластических деформаций, когда после снятия напряжений (релаксации) металл возвращается в исходное состояние. Участок OA_1 носит название сверхупругости.

Оценка возникающих напряжений на качественном уровне состоит в определении изотропных σ_T ($\varepsilon=0$), упругих, обратимых пластических деформаций. В результате в дальнейшем в точках B и B_1 возникают напряжения $\sigma_{диф}$. Упругая разгрузка (релаксация) напряжений происходит за время $\tau \sim 10^{-6} \text{ с}$ и приводит к появлению необратимых пластических деформаций $\pm \sigma_{цикл}$ (точки R и R_1).

Восходящая диффузия возникает, когда напряжение $\sigma_{диф}$ создает в кристаллите силовое поле, определяющее действующую на диффундирующие атомы силу F_s . В этом случае на фоне фиковской энтропийной миграции атомов возникает направленное дрейфовое перемещение атомов. Тогда диффузионный поток определяется уравнением

$$J = -(D \nabla c - \xi c F_s) \omega^{-1}, \quad (9)$$

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.

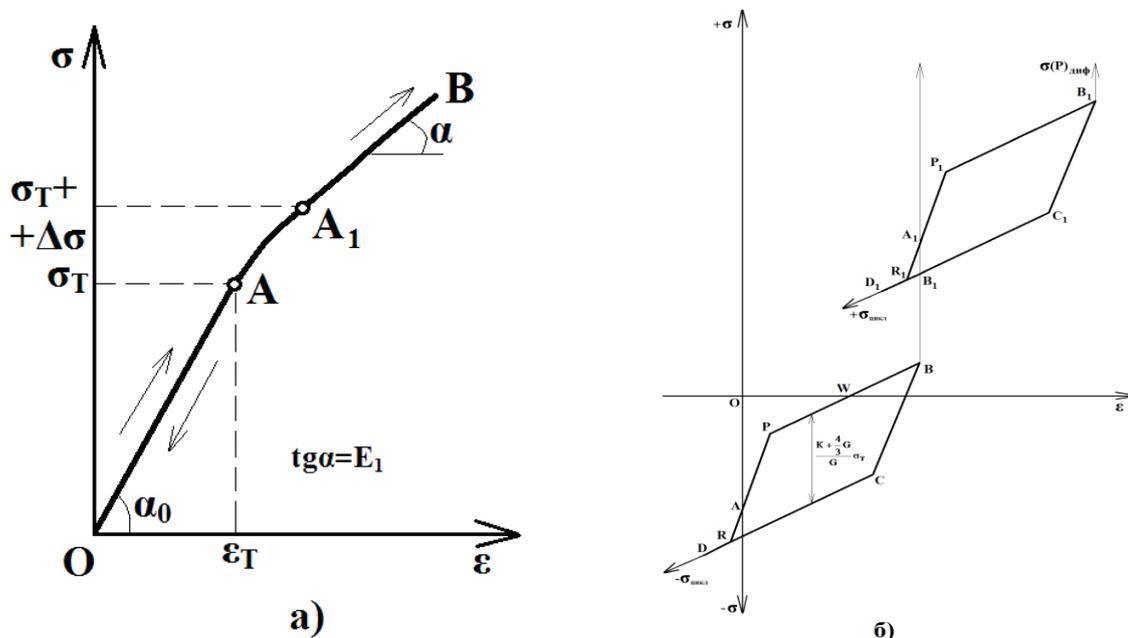


Рисунок 7. – Диаграмма “ σ - ε ” с частичной линейной аппроксимацией (а) и зависимость продольных напряжений от деформации (б)

В свою очередь напряжение $\sigma_{диф}$ приводит к дислокационному упрочнению поверхностной зоны.

В третьей главе рассматривается проблема применения компьютерного моделирования процессов эволюции пор и трещин при фрикционном нагреве, поскольку непосредственное наблюдение за этим процессом невозможно. В этом случае компьютерный анализ лимитируется лишь числом атомов, поведение которых нужно рассчитать, чтобы описать различные структурные уровни, то есть объемом памяти и быстродействием ЭВМ.

Краткая характеристика ММД

ММД является методом компьютерного эксперимента. Главный смысл ММД состоит в том, чтобы генерировать совокупность конфигураций атомов, то есть статистический ансамбль. В ММД численно решается система дифференциальных уравнений движения Ньютона. Реализация ММД связана с программным обеспечением решения дифференциальных уравнений и создания потенциалов межатомного взаимодействия (ПМВ), описывающих физико-механические свойства реальных прототипов. В качестве программного обеспечения использовалась программа XMD (J.A. Rifkin) с числом атомов $n \leq 10^5$. ПМВ разработаны для кристаллических решеток исходных фаз поверхностной зоны ($n=7$) на основе метода “погруженного” атома. Сущность компьютерного моделирования состоит в изучении изменения положения атомных конфигураций под действием напряжений $\sigma_{диф}$ и $\sigma_{дисл}$, возникающих в поверхностной зоне при трансформации ТУ.

В четвертой главе приводятся результаты моделирования ММД процессов эволюции пор и трещин и дается оценка ресурсной долговечности поверхностной зоны.

Процесс эволюции пор и трещин исследовался в следующей последовательности: залечивание технологических (“врожденных”) пор и трещин; исследование процесса дислокационного упрочнения поверхностной зоны; зарождение, рост и разрушение эксплуатационных пор и трещин.

Проведенные в диссертационной работе металлографические исследования показали, что имеющиеся в исходном состоянии в никотрированном слое трещины и поры исчезали в начальной стадии трения. Более детально процесс залечивания исследован с помощью ММД (рис. 8 а-в, 9 а-в). После определенного количества шагов моделирования поры и трещины исчезали. Проведенный анализ показал, что в результате диссипации

энергии и релаксации внутренних напряжений происходит уменьшение энергии, что соответствует процессу залечивания пор и трещин.

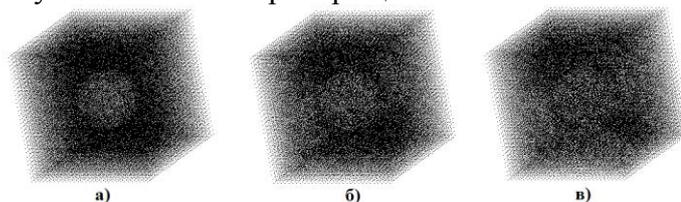


Рисунок 8. – Стадия залечивания пор: а – $\tau=0$; б – $\tau=1,5 \cdot 10^{-13}$ с; в – $\tau=2,5 \cdot 10^{-13}$ с

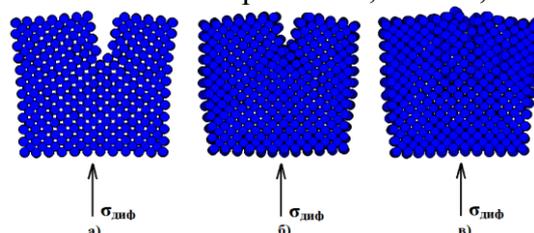


Рисунок 9. – Моделирование процесса залечивания трещин (аксонометрия): а – 1000 шагов; б – 5000 шагов; в – 10000 шагов моделирования

Механизмы зарождения эксплуатационных пор и трещин

Под воздействием температур трения тепловые колебания атомов, оцениваемые фононным спектром, приобретают флуктуационный характер. Данные колебания называются бризерными. Под их воздействием узловые атомы в кристаллической решетке перемещаются в междоузлия. Как показали исследования В.А. Романова, в кристаллите образуются два вида кластеров: вакансионные и собственных междоузельных атомов (СМА). В результате кристаллические решетки деформируются.

Механизмы роста вакансионных кластеров и кластеров СМА различны. Увеличение размеров вакансионных кластеров происходит за счет кооперативного механизма диффузии (рис. 10).

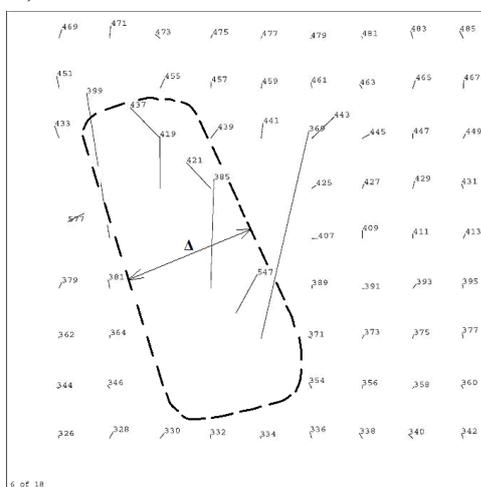


Рисунок 10. – Изменение структуры исходного кристаллита α -Fe с одной вакансией при кооперативном механизме диффузии ($T=900$ K, $n=10^4$ шагов)

В результате моделирования установлено, что вакансионный кластер превращается в пору (дилатон) при начальном размере дилатона $\Delta_{нач}=1,5 \cdot 10^{-9}$ м.

Кластеры СМА под действием $\sigma_{цикл}$ проходят стадию дислокационного упрочнения с последующим образованием короткой трещины. Образование коротких трещин имеет две стадии – латентную и стадию развития трещин.

Моделирование процесса дислокационного упрочнения поверхностной зоны

Процесс моделирования дислокационного упрочнения состоит из последовательных этапов: зарождения, движения и торможения дислокаций. Для моделирования процесса формирования краевой дислокации используется сильно отталкивающий потенциал, имитирующий действие твердого сферического индентора,

реализующего в реальном металле дислокацию. Под действием отталкивающего потенциала атомы будут перемещаться с кристаллической решеткой или разрывать межатомные связи. В результате происходит процесс образования и последующего расщепления краевой дислокации на две частичные (рис. 11 а-в). Анализ положения атомов производился на основании расчета координационного числа K_i и параметра центральной симметрии для каждого атома P

$$P = \sum_{i=1,4} [R_i + R_{i+4}]^2, \quad (10)$$

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

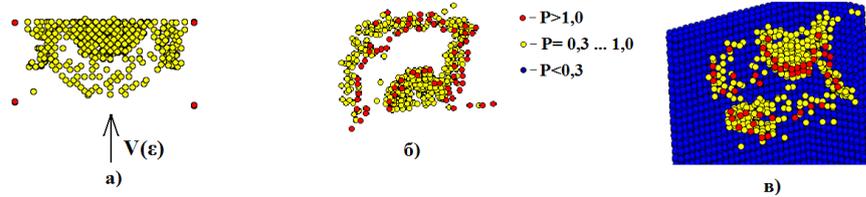


Рисунок 11. – Моделирование процесса формирования краевой дислокации в α -Fe:
а – начальная стадия формирования дислокации; б – начало процесса раздвоения дислокации; в – раздвоенная дислокация

При моделировании движения дислокаций основное внимание уделяется масштабному фактору: степени соответствия результатов моделирования результатам исследований в континуальном приближении. Масштабным фактором при моделировании служит количество атомов n в кристаллите. При увеличении n параметры диаграммы Гука ведут себя разнонаправлено: $\sigma_{\text{мод}} \rightarrow \sigma_{\text{конт}}$, то есть уменьшаются, $\epsilon_{\text{мод}} \rightarrow \epsilon_{\text{конт}}$, то есть увеличиваются. Учитывая данные обстоятельства, в диссертационной работе $n=3 \cdot 10^4$ атомов. В таком случае скорость дислокаций определяется скоростью деформирования

$$V_{\text{дисл}} = V_R \frac{L_b}{b} \frac{\sigma_*}{\sigma_T}, \quad (11)$$

где $V=0,105$ А/пс= $V_{\text{мп}}$; L_b – длина модельного кристаллита; b – вектор Бюргерса; $\sigma_*=47$ ГПа – напряжение, зависящее от масштабного фактора; $\sigma_T=(0,7 \dots 7,4)$ ГПа – переменный предел текучести.

Кинетика краевой дислокации представлена на рисунке 12.

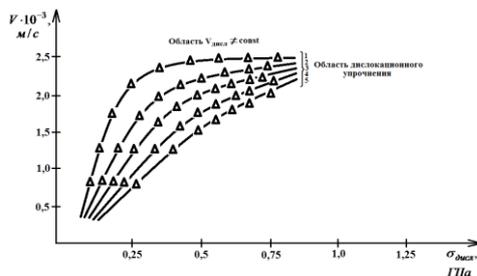


Рисунок 12. – Зависимость скорости дислокаций V от касательного (сдвигового)

напряжения $\sigma_{\text{дисл}}$ 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 – $T=900$ К;

_____ – расчетные скорости; Δ – результаты моделирования

Графики скоростей $V_{\text{дисл}}$, рассчитанные в континуальном приближении, корректно согласуются с $V_{\text{мод}}$. Дислокационное упрочнение определяется аддитивной суммой сопротивления, связанного с наличием дефектов в движущейся среде и силой вязкого трения, определяемого рассеиванием фононов и электронов на движущихся дислокациях. Суммарная погонная сила торможения составляет $F_{\text{торм}}=0,19$ Н/м, причем дислокационное упрочнение начинается со значений $\sigma_{\text{кин}}=0,85$ ГПа.

Процессы образования и роста коротких трещин

Процесс образования коротких трещин имеет латентную и открытую стадии.

Длительность латентной стадии согласно энергетической теории В.М. Власова

$$N_{кр} = N_0 R_W \exp \left[\frac{10^{-2} \sigma_{цикл} - 0,1 \sigma_{пр}}{E} \right], \quad (12)$$

где $\sigma_{пр}$ – предел пропорциональности стали; $N_0 \approx 2,5 \cdot 10^4$ циклов – соответствует минимальному напряжению $\sigma_T \approx 0,19$ ГПа, при котором в α -твердом растворе начнется процесс размножения дислокаций; $E = 21,5$ ГПа – модуль упругости; $N_{кр} = 1,6 \cdot 10^3$ циклов;

$$R_W = 1 - \frac{\Delta W_{зан} - \Delta W_{д.у.}}{F_S}, \quad (13)$$

где $\Delta W_{зан} = 0,97$ Дж/м² – запасаемая энергия; $\Delta W_{д.у.} = 0,4 \Delta W_{зан}$ – дислокационное упрочнение; $F_S = 1,82$ Дж/м² – свободная энергия стали.

Согласно результатам моделирования началу открытой стадии соответствует $N = 2 \cdot 10^2$ циклов.

На рисунках 13 а-в представлены результаты распространения трещины после латентного периода. При этом на рисунке 13 в можно отметить острие трещины, двойникование, дефекты упаковки и поры. В дальнейшем фронт вершины трещины представляет собой сферический пояс и области, содержащие атомы с высокими напряжениями. Далее напряжения достигают критических значений и трещина распространяется ускоренно со скоростью $V_{mp} = 710$ м/с. На последнем этапе короткие трещины перемыкаются между собой, образуя нормальную трещину (Y. Gao и др.).

Полученные значения параметров коротких трещин для α -Fe далее пересчитывались с помощью усредненной микротвердости H_\diamond на соответствующие параметры фаз ВС по температурным зонам. Короткие трещины распространяются по межзеренным границам.

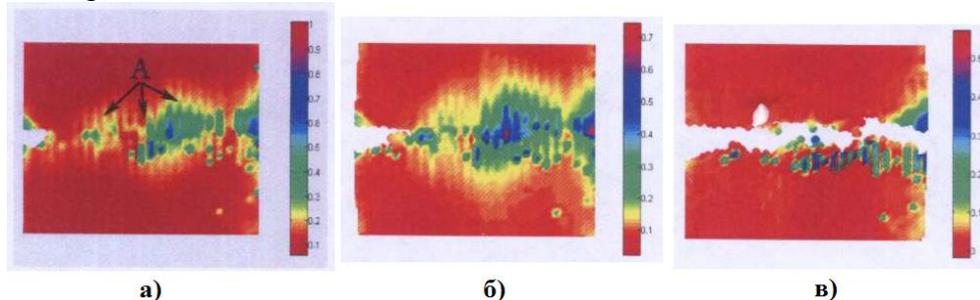


Рисунок 13. – Распределение напряжений при моделировании процесса образования трещины в направлении [110] для α -Fe: а – 5000 шагов; б – 7000 шагов; в – 9000 шагов моделирования

Моделирование образования длинных трещин

Для длинных трещин J.R. Rice предложил другую модель образования, предположив, что в районе вершины трещины возникает сверхупругость, исключая применение линейной теории упругости. С металловедческой точки зрения явление сверхупругости происходит при превращении аустенита (γ -Fe) в мартенсит (α -Fe). Данный подход связан с необходимостью рассмотрения процессов с разными масштабами (реальные детали и их модельные представления). Исследования в диссертации механизмов изнашивания, основанных на энергетическом подходе, позволяют нивелировать воздействие указанных недостатков.

Результаты моделирования, приведенные на рисунках 14 а,б, показывают, что длинные трещины возникают при напряжениях $\sigma < \sigma_T$, распространяясь перпендикулярно поверхности трения со скоростью $V_{mp} \approx V_{зв} = 6 \cdot 10^3$ м/с. Перемыкаясь с другими трещинами, образованными в дислокационно-упрочненной зоне, они образуют ячейки усталостного износа.

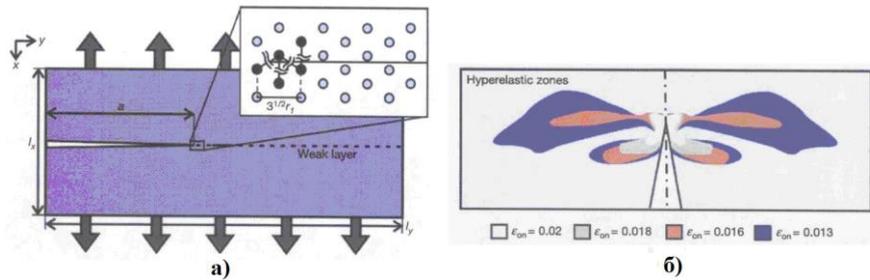


Рисунок 14. – Модельные представления (а) и результат моделирования (б) процесса образования и развития длинных трещин

Размер начальной трещины $a=200 \text{ \AA}$. Более затемненная зона относится к упругой области, светлая зона – к обратимой пластической деформации (сверхупругости). Наличие в вершине трещины области пластического течения предопределяет ускорение процесса распространения длинных (вертикальных) трещин. Схема, представленная в верхней части рисунка 14 а позволяет предположить, что трещина распространяется не по межзеренным границам, что характерно для коротких трещин, а по межфазовым границам, имеющим меньшую энергию связи.

Для автоматического режима работы ТМСН характерен диапазон температур $\Delta T=(450-835) \text{ К}$, где преобладает усталостный механизм. Сложность моделирования усталостного разрушения поверхностной зоны связана с разномасштабностью ее проявления. Шкала пространственных интервалов, в которых протекают акты разрушения $\Delta l=(10^{-9} \dots 10^{-3}) \text{ м}$. Экспериментальные результаты получены на образцах с размерно-временными параметрами, несоизмеримыми с аналогичными параметрами, рассматриваемыми в ММД.

В диссертационной работе разрушение при порообразовании связывается с дилатонным механизмом (Г.М. Сорокин). При воздействии напряжений $\sigma_{дисл}$ критический размер дилатона $\Delta_{кр}$ в условиях ударно-теплового воздействия определяется формулой

$$\Delta_{кр} = \alpha T \varepsilon_0 \frac{\sigma_{дисл}}{E} \frac{1 + \omega \tau}{[1 + (\omega \tau)^2]^2} \cdot 10^{-2} \cdot \Delta_{нач}, \quad (14)$$

где $\alpha = 1,14 \cdot 10^{-5} \text{ 1/град}$; $\varepsilon_0 \approx 0,6$ – предельное значение относительной деформации;

$\omega = 2,5 \cdot 10^{12} \text{ 1/с}$ – частота фонового спектра; $\tau = \frac{Fo \cdot a}{V_{зв}^2}$ – время термического удара, где

$Fo = 5$ – критерий Фурье; a – коэффициент температуропроводности; $V_{зв} = 5 \cdot 10^3 \text{ м/с}$.

Оценка разрушения дилатона с критическим размером $\Delta_{кр}$ по температурным зонам ($\Delta_{кр} = (0,1 \dots 0,4) \cdot 10^{-7} \text{ м}$) позволяет определить количество циклов разрушения до заданного объема $V = 3 \cdot 10^{-15} \text{ м}^3$

$$i = \frac{V}{\sum_1^P PV_{дил}}. \quad (15)$$

Полученное значение i , как следует из опытов, составляет 2 % числа циклов, вызывающих полное разрушение поверхностной зоны $i_{пов} = 50i$.

Для исследования процессов разрушения при трещинообразовании целесообразно использовать энергетическую теорию, разработанную В.М. Власовым. Так как данная теория не учитывает фактора фрикционного нагрева при трении, то требуется внести в нее соответствующие корректировки.

При исследовании процесса разрушения при трещинообразовании использовали рассмотренные ранее критерии энергетической теории $R_w, \Delta W_{д.у.}, \Delta W_{зан.}$

Схема разрушения поверхностной зоны вследствие трещинообразования приведена на рисунке 15.

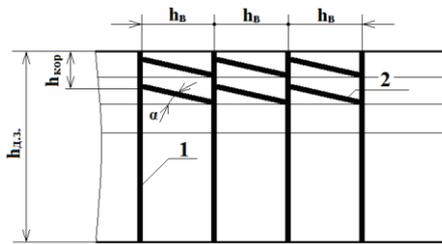


Рисунок 15. – Схема разрушения поверхностной зоны вследствие трещинообразования: 1 – длинные трещины; 2 – короткие трещины; $h_{д.з.}=5 \cdot 10^{-5}$ мм – длина диффузионной зоны
 Расстояние между вертикальными трещинами

$$h_v = \frac{F_s E}{\sigma_{кр}^2}. \quad (16)$$

Механизм разрушения коротких трещин состоит из латентной стадии и стадии развития. Для оценки циклической долговечности стадии развития коротких трещин используется зависимость

$$i_{цикл} = \frac{h_v}{V_{тр}^{кор}}. \quad (17)$$

В диапазоне температур $\Delta T=(500 \dots 900)$ К $V_{тр}^{кор}=(1,7 \dots 3,8) \cdot 10^{-9}$ м/цикл.

Для длинных трещин циклическая долговечность находилась по формуле

$$i_{цикл} = \frac{h_{диф}}{V_{тр}^{дл}}, \quad (18)$$

где $h=5 \cdot 10^{-6}$ м – глубина диффузионной зоны, $V_{тр}^{дл}=6,5 \cdot 10^{-9}$ м/цикл.

Значения параметров в формулах (20) и (21) с учетом их пересчета из модельных значений (α -Fe) в фактические (BC) посредством отношения значений микротвердости

$$\Delta H_{\diamond} = \frac{\bar{H}_{\diamond}}{H_{\diamond}(\alpha - Fe)}, \quad (19)$$

где \bar{H}_{\diamond} – среднее значение микротвердости с учетом %-ного содержания фаз BC по температурным зонам.

Результаты расчетов по приведенным выше положениям представлены в таблице 5.

Таблица 5 – Параметры механизмов разрушения

Тип разрушения	T, K	500	600	700	800	900
		$\sigma_{диф}, ГПа$	4,22	4,83	5,14	5,51
Поры	$i_{\Sigma} \cdot 10^{-3}, \text{цикл}$	6,90	4,80	3,14	1,08	0,40
Длинные трещины	$i_{\Sigma} \cdot 10^{-3}, \text{цикл}$	6,00	4,00	2,76	2,80	1,10
Короткие трещины	$i_{\Sigma} \cdot 10^{-3}, \text{цикл}$	4,28	2,33	1,44	1,08	0,60

Результаты моделирования показывают, что лимитирующими по времени разрушения являются короткие трещины. Тем не менее, различия между значениями $i_{цикл}$ у длинных и коротких трещин невелики и магистральная трещина будет иметь поверхность с многочисленными уступами, вызванными от разрушения коротких трещин. Экспериментальные данные, полученные с помощью растрового электронного микроскопа, подтверждают результаты моделирования (рис. 16 а-б).

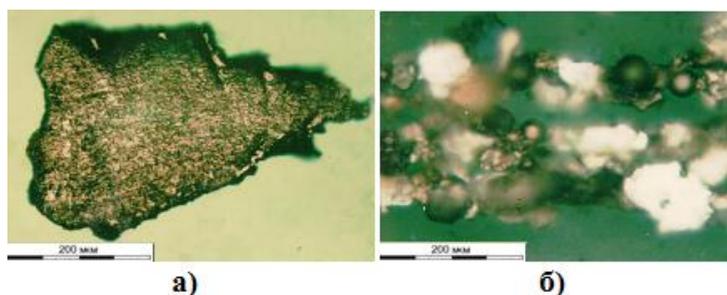


Рисунок 16. – Типовая форма частицы износа:
а – трещинообразование; б – порообразование

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».

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 никотрирования) 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 $\sigma_{диск}$, 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.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ ДИССЕРТАЦИИ ИЗЛОЖЕНО В СЛЕДУЮЩИХ ПУБЛИКАЦИЯХ

Публикации в изданиях, включенных в международные реферативные базы (Web of Science, Scopus)

1. 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** Образование вторичных структур в теплостойких сталях при трении скольжения // Физика металлов и металловедение, 116 (2015) 1304–1312. V.I. Lad'yanov, O.Yu. Goncharov, P.I. Malenko, R.M. Nikonova, F.Z. Gilmutdinov, M.I. Mokrushina, S.A. Tereshkina, A.Yu. Leonov, **K.J. Relmasira** Formation of Secondary Structures in Heat-Resistant Steels under Sliding Friction // The Physics of Metals and Metallography, 116 (2015) 1244–1252. (WoS, Scopus, BAK)

2. В.И. Ладьянов, О.Ю. Гончаров, П.И. Маленко, А.Ю. Леонов, **К.Д. Релмасира** Влияние технологических режимов нитрирования на формирование поверхностных слоев и защитные свойства теплостойких конструкционных сталей // Материаловедение, 3 (2016) 16–23. V.I. Lad'yanov, O.Yu. Goncharov, P.I. Malenko, A.Yu. Leonov, **K.J. Relmasira** Influence of manufacturing conditions of carbonitriding on formation of surface layers and protective properties of hot-work structural steel // Inorganic Materials: Applied Research, 7 (2016) 610–617. (Scopus, BAK)

3. P.I. Malenko, A.Yu. Leonov, **K.J. Relmasira** Studying the resonance processes in the surface layers of friction pairs with lubrication by means of molecular dynamics // *Procedia Engineering*, 150 (2016) 435–441. (Scopus)

4. **K.J. Relmasira**, A.Yu. Leonov, P.I. Malenko Application of molecular dynamics method for simulation of the process of increasing the diffusion mobility of atoms using vacancy diffusion mechanism // *Procedia Engineering*, 206 (2017) 636–641. (Scopus)

5. П.И. Маленко, А.В. Крохалев, **К.Д. Релмасира**, А.Ю. Леонов Исследование влияния добавок аммиака при цементации на формирование структурных зон упрочненного слоя и профиль концентраций углерода и азота // *Черные металлы*, 12 (2017) 56–60. (Scopus, ВАК)

6. P.I. Malenko, **K.J. Relmasira**, A.Yu. Leonov Application of method of molecular dynamics (MMD) for modeling the process of dislocation of hardening of surface zone // *Lecture Notes in Mechanical Engineering*, II (2018) 973–981. (Scopus)

Публикации в рецензируемых научных журналах из списка ВАК РФ

7. П.И. Маленко, С.В. Ильичев, **К.Д. Релмасира**, А.Ю. Леонов Моделирование процесса увеличения диффузионной подвижности атомов в вакансионном механизме диффузии // *Известия ТулГУ. Технические науки*, 1 (2017) 124–130. (ВАК)

8. П.И. Маленко, **К.Д. Релмасира**, А.Ю. Леонов, О.В. Костыгова Моделирование кооперативного механизма диффузии методом молекулярной динамики // *Известия ТулГУ. Серия: Технические науки*, 1 (2018) 32–45. (ВАК)

9. П.И. Маленко, **К.Д. Релмасира**, А.Ю. Леонов, О.В. Костыгова Моделирование резонансного механизма диффузии методом молекулярной динамики // *Известия ТулГУ. Серия: Технические науки*, 1 (2018) 52–59. (ВАК)

10. П.И. Маленко, О.Б. Крючков, Д.Б. Белов, **К.Д. Релмасира**, А.Ю. Леонов, Л.Г. Саранин Исследование процессов эволюции трещин и пор в поверхностной зоне теплостойких сталей с покрытием при фрикционном нагреве в процессе трения скольжения с ресурсным смазыванием // *Все материалы. Энциклопедический справочник*, 11 (2019) 8–15. (ВАК)