

УДК 621.983.044

А. В. Алифанов¹, Ж. А. Попова¹, Д. А. Ционенко²¹ Учреждение образования «Барановичский государственный университет», Барановичи² Учреждение образования «Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники», Минск

МОДЕЛЬ НЕСТАЦИОНАРНОЙ ДИФФУЗИИ ПРИМЕСЕЙ В ЛЕГИРОВАННЫХ СТАЛЯХ ПРИ МАГНИТНО-ИМПУЛЬСНОМ ВОЗДЕЙСТВИИ

Предложена модель, описывающая нестационарную диффузию примесей в легированных сталях при магнитно-импульсном воздействии. Установлено, что нестационарная диффузия примесей определяется дефектами структуры, возникающими при импульсной обработке. При нестационарной диффузии примесные атомы, имеющие большой радиус, мигрируют в направлении от границы вглубь зерна. Взаимодействие атомов примеси с дислокациями препятствует их дальнейшему перемещению и приводит к упрочнению зерна феррита.

Ключевые слова: диффузия, легирующие элементы, пластическая деформация, фазовые переходы, магнитно-импульсная обработка, упрочняющий эффект.

Введение. Экспериментальные данные свидетельствуют о влиянии магнитных полей на изменение структуры и свойств металлов и сплавов. При магнитно-импульсной обработке (далее — МИО) для сталей наблюдается как деформация зёрен феррита на поверхности обрабатываемой заготовки, так и увеличение объёма карбидных фаз, перераспределение примесей по объёму зерна и в области между зёрнами [1], [2], [3], [4], [5], [6].

Диффузия легирующих элементов и углерода в стали при импульсном магнитном воздействии является нестационарной и отличается от диффузии, происходящей в результате случайного перемещения атомов из одного положения равновесия в другое. Существенным отличием является то, что большая система, которой в данном случае является кристаллическая решётка феррита, не находится в состоянии равновесия.

Построение модели. Рассмотрим зерно феррита, представляющее собой монокристалл $Fe_{\alpha}(C)$ — твёрдый раствор внедрения углерода в α -железо. Средние размеры зёрен феррита исследуемых конструкционных сталей 45 и 40Х и легированных инструментальных сталей 8ХФ и 8Х6НФТ до обработки и после МИО (3 импульса по 6 кДж) отличаются (таблица 1).

Атомы углерода располагаются между узлами решётки феррита, а атомы легирующих элементов являются как атомами внедрения, так и атомами замещения.

При этом в зерне присутствуют точечные дефекты (вакансии, междоузельные атомы, примесные атомы легирующих элементов) и линейные дефекты (дислокации). Плотность дислокаций в необработанном образце (в исходном состоянии без отжига) была $10^6 \dots 10^8 \text{ м}^{-2}$, а после МИО с энергией импульса 6 кДж составила $10^{11} \dots 10^{12} \text{ м}^{-2}$.

Время импульса при МИО в данном случае составляет порядка 10^{-3} с (рисунок 1, см. с. 27).

Мгновенное значение плотности энергии магнитного поля, усреднённое по объёму зерна феррита, определяется формулой из [2]

Т а б л и ц а 1 — Влияние МИО на размер зерна

Сталь	Размер зерна, мкм	
	в исходном состоянии	после МИО
45	10...20	4...8
40Х	10...22	3...7
8ХФ	7...12	2...4
8Х6НФТ	8...12	2...5

$$w = \frac{\mu\mu_0}{2} H^2(h, t), \quad (1)$$

где μ — магнитная проницаемость среды, для ферромагнитного образца зависящая от напряжённости магнитного поля H ;

μ_0 — магнитная постоянная в системе СИ, равная $4\pi \cdot 10^{-7}$ Гн/м;

$H(h, t)$ — величина, определяемая по формуле

$$H(h, t) = H_{\max} [\exp(-\alpha h)] \sin(\omega t - \alpha h), \quad (2)$$

где α — величина, обратная толщине скин-слоя в обрабатываемом металле, определяемая по формуле $\alpha = \sqrt{\mu\mu_0 \omega \sigma / 2}$;

h — расстояние от поверхности заготовки, обращённой к индуктору, до зерна феррита;

ω — циклическая частота колебаний электромагнитного поля, создаваемого индуктором в зоне обработки, вычисляемая из соотношения $2\pi / T$.

При напряжённости магнитного поля H_{\max} , равной 107 А/м, и длительности импульса τ , равной 10^{-3} с (эти параметры определяются конструктивными особенностями установки [3]), удельном сопротивлении ρ , равном 10^{-7} Ом·м, магнитной проницаемости среды μ , равной 1 000 (что характерно для феррита), получаем следующие численные оценки процесса: толщина скин-слоя α^{-1} составляет 10^{-4} м, максимальное давление на зерно феррита, находящегося на поверхности образца (при h , равном 0), p_{\max} равно 10^{11} Па. Это значение превосходит предел текучести феррита (σ_m , равный $5 \dots 8 \cdot 10^8$ Па) в 1 000 раз, поэтому в процессе импульсной обработки происходит не только перемещение дислокаций, приводящее к пластической деформации зерна, но и образование дополнительных дефектов: вакансий, краевых и винтовых дислокаций.

При импульсном воздействии система, представляющая собой зерно феррита, переходит в неравновесное состояние.

Процесс перехода системы в новое состояние равновесия после импульсного воздействия можно разделить на ряд стадий, каждая из которых характеризуется своим временем релаксации. Вначале основную роль играют быстрые процессы, связанные с образованием, аннигиляцией и миграцией вакансий, а также процессы нестационарной диффузии примесей. При нестационарной диффузии длина свободного пробега атома примеси сравнима с характерными размерами дислокационных рядов. Время релаксации, связанное с этими процессами, по порядку величины равно времени импульсного воздействия.

На следующей стадии определяющее значение имеют процессы фазовых переходов вблизи границ зёрен и процессы теплопередачи между отдельными участками одного зерна, также сопровождающиеся диффузией примесей. В данном случае длина свободного пробега атома примеси определяется межатомным расстоянием кристаллической решётки, образовавшейся в результате рекристаллизации вблизи границ зёрен, и её дефектностью. Время релаксации, соответствующее процессам на второй стадии, превосходит время импульса в 10...100 раз.

На завершающей стадии, представляющей собой последствие, и длящейся от 1 с до 5 ч, происходит процесс теплообмена между различными зёрнами и теплообмен с окружающей средой. На завершающей стадии также возможны процессы диффузии, в результате которых происходит рекомбинация вакансий и междоузельных атомов, расположенных в непосредственной близости друг от друга, поскольку миграция атомов на большие расстояния в данном случае маловероятна.

Пусть в начальном состоянии (до МИО) атомы примесей и дефекты равномерно распределены по объёму зерна.

В общем случае неравновесная система может быть описана уравнением Леувилля [7]

$$\frac{df_N}{dt} + \sum_{i=1}^N \Phi_i \frac{\partial f_N}{\partial \Phi_i} + \sum_{i=1}^N \left(-\frac{\partial \Phi_i^{ext}}{\partial \Phi_i} - \sum_{j=1}^N \frac{\partial \Phi_{ij}}{\partial \Phi_i} \right) \frac{\partial f_N}{\partial p_i} = 0, \tag{3}$$

где f_N — функция распределения полной системы попарно взаимодействующих частиц, помещённых во внешнее силовое поле, равная $f_N(q_1, \dots, q_N, p_1, \dots, p_N)$;

q_i, p_i — обобщённая координата и обобщённый импульс i -й частицы соответственно;

Φ_i^{ext} — потенциал взаимодействия с внешним полем, равный $\Phi^{ext}(q_i)$;

Φ_{ij} — потенциал парного взаимодействия, равный $\Phi(q_i, q_j)$.

Вследствие нестационарности процесса $\Phi_i^{ext} = \Phi_i^{ext}(t_i)$ и большого количества частиц в системе N , уравнение (3) не может быть решено аналитически точно.

Для решения уравнения (3) введём ряд приближений, позволяющих упростить задачу. В связи с этим отметим, что потенциал парного взаимодействия в данном случае является быстро убывающей функцией расстояния r_{ij} между частицами [8]:

$$\Phi(q_i, q_j) = \frac{A}{r_{ij}^6} - B \exp\left(-\frac{r_{ij}}{\rho}\right), \tag{4}$$

где A и B — коэффициенты, определяющие потенциалы сил притяжения и отталкивания соответственно и зависящие от заряда частиц и их взаимного расположения в кристаллической решётке;

ρ — характерная длина, равная по порядку величины периоду решётки (10^{-10} м).

Потенциал взаимодействия с внешним магнитным полем определяется выражениями (1) и (2) и является более медленной функцией пространственных координат. Потенциал уменьшается при увеличении расстояния от поверхности вглубь материала примерно на порядок на расстоянии h , равном 5 мкм.

Таким образом, ближний порядок в расположении атомов определяется потенциалом парного взаимодействия. Пусть в начальном состоянии количество точечных дефектов в необработанном образце незначительно и составляет порядка 10^8 м^{-3} . Тогда, при учёте равномерности распределения дефектов по объёму зерна, будем считать, что примесные атомы (как внедрения, так и замещения) взаимодействуют только с окружающими их атомами железа и непосредственно оказывать влияния друг на друга не могут, так как потенциал парного взаимодействия, определяемый формулой (4), является короткодействующим. Тогда, вследствие симметрии расположения атомов железа в узлах объёмно-центрированной кристаллической решётки, равнодействующая сил, влияющих на атом примеси, будет равна нулю. При этом, если размеры атомов примеси меньше, чем размеры атомов железа, и структура электронных оболочек атомов примеси существенно отличается от структуры атомов железа, то примесь является примесью внедрения. Это характерно для атомов углерода и бора, а для атомов металлов вольфрама, циркония, молибдена энергетически более выгодным является их присутствие в качестве примесей замещения.

Процесс импульсной обработки приводит, как было отмечено выше, к возникновению большого количества дефектов, время существования которых незначительно и по порядку величины соответствует длительности импульса. При образовании вакансий и краевых дислокаций расстояние между соседними атомами увеличивается, что приводит к уменьшению потенциала парного взаимодействия на 2...3 порядка. Тогда потенциал взаимодействия атомов примеси, находящихся в непосредственной

близости от вакансии, с внешним полем $\Phi^{ext}(q_i)$ будет определять их возможное перемещение.

Таким образом, атомы и ионы примеси в неравновесной системе можно рассматривать как подсистемы и для их описания вводить одночастичные состояния $f_1(q, p)$:

$$\frac{\partial f_1}{\partial t} + \frac{\partial f_1}{\partial q} \dot{q} + \frac{\partial f_1}{\partial p} F = I_{cool}(f_1), \quad (5)$$

где F — сила, действующая на атом примеси в магнитном поле;

$I_{cool}(f_1)$ — интеграл столкновений, определяемый дефектами кристаллической решётки.

Направление действия силы вблизи дефекта определяется радиусом атома примеси [8]. Для атомов, имеющих радиус меньше, чем радиус атомов кристаллической решётки, энергетически выгодно занять положение вблизи границы, а для атомов, радиус которых больше радиуса атомов, образующих кристаллическую решётку, энергетически более выгодным является положение вдали от границы. Соответствующие силы являются короткодействующими и определяют миграцию примесей на расстояниях порядка 10 периодов решётки вблизи границы зерна. Определим силу в проекции на ось, выбранную перпендикулярно границе зерна, выражением

$$F(x) = \Theta(r_a - r_b) F_0 \exp(-kx), \quad (6)$$

где $\Theta(r_a - r_b)$ — функция, определяющая знак проекции;

F_0 — максимальное значение силы взаимодействия атома примеси с дефектом решётки;

k — коэффициент, определяющий взаимодействие атомов примеси и дефекта решётки.

Таким образом, как следует из предложенной модели, диффузия примесей определяется концентрацией дефектов и величиной магнитного поля, а также длительностью импульса.

В процессе импульсной обработки под действием магнитных сил атомы углерода и хрома диффундируют из объёма зерна к его границе. При этом внутри зерна образуется область, обеднённая углеродом, а вблизи границы зерна концентрация углерода возрастает. Вокруг зёрен феррита может возникнуть карбидная сетка, приводящая к упрочнению поверхности образца как целого. Однако в данном случае образование карбидной сетки не приводит к значительному повышению хрупкости. Причиной этого являются процессы рекристаллизации, происходящие вследствие выделения теплоты. Как было отмечено в работе [2], наиболее интенсивно тепловыделение происходит на границах зёрен вследствие повышения удельного сопротивления. В результате рекристаллизации границы зёрен в области обработки имеют рваные края, что свидетельствует о высокой адгезии между границами зёрен и карбидной фазой (рисунок 2).

В зёрнах существуют также объёмные дефекты, в частности, присутствуют фрагменты, ориентация которых отличается от ориентации кристаллической решётки основной части зерна, что играет существенную роль при образовании мелкозернистой структуры в процессе импульсной обработки. Более мелкие элементы мозаичной структуры, такие как блоки, разориентация которых составляет менее 1° , в данном приближении не рассматриваются. Размеры зёрен сталей при МИО уменьшаются (см. таблицу 1). Образование новых границ внутри зерна обусловлено процессами движения примесей при диффузии и их локализацией на границе фрагментов. Области, соответствующие новым границам зёрен, образовавшихся в результате дробления, не обогащены углеродом.

При нестационарной диффузии существенную роль играют процессы, связанные с фиксацией дислокаций, образовавшихся в результате импульсного воздействия. Фиксация осуществляется в результате взаимодействия дислокации с атомами, имеющими большой радиус (молибден, никель, вольфрам). Внедрение данных атомов в область краевой дислокации препятствует её перемещению и приводит к упрочнению объёма зерна феррита. Этот процесс препятствует и аннигиляции дислокаций различных знаков, т. е. концентрация образовавшихся в результате импульса дислокаций остаётся значительной и по истечении времени последствия, что также способствует процессу упрочнения.

Проанализируем зависимость упрочняющих эффектов от энергии импульса. Энергии менее 2 кДж недостаточно для генерации необходимого количества дефектов. Существенные эффекты начинают проявляться в стали 45 при энергии импульса 4 кДж, для стали 40Х — при энергии импульса 6 кДж, а для стали 8ХФ и 8Х6НФТ — при энергии импульса 6...7 кДж. Воздействие импульсов с энергиями, превосходящими 7 кДж, приводит к образованию избыточного числа дефектов, что может вызвать разрушение и разупрочнение образца.

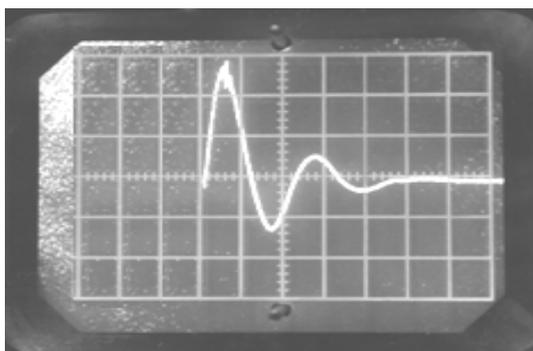


Рисунок 1 — Форма импульса. Временная развёртка 50 мкс / дел

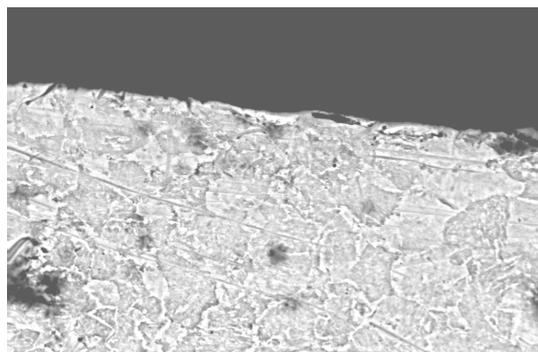


Рисунок 2 — Образование мелкозернистой структуры на поверхности образца стали 45 при МИО (3 импульса 6 кДж). $\times 1\,500$

При перераспределении легирующих элементов по объёму зёрен изменяется температура плавления в области границ, что приводит к снижению эффективности последующих импульсов. Поэтому наиболее эффективным является количество импульсов, равное трём.

Заключение. Построена модель, описывающая нестационарную диффузию легирующих примесей при магнитно-импульсном воздействии на образцы из различных сталей.

Установлено, что в процессе нестационарной диффузии существенную роль играют процессы, связанные с фиксацией дислокаций, образовавшихся в результате импульсного нагружения примесными атомами, имеющими большой радиус (например, молибден, никель, вольфрам). Их внедрение в области вблизи краевых дислокаций препятствует дальнейшему перемещению дислокаций и приводит к упрочнению зерна феррита. Этот процесс препятствует аннигиляции дислокаций различных знаков, т. е. образовавшиеся в результате магнитного импульса дислокации остаются в зернистой структуре, что также способствует процессу упрочнения.

Список цитируемых источников

1. *Мальгин, Б. В.* Магнитное упрочнение инструментов и деталей машин / Б. В. Мальгин. — М. : Машиностроение, 1998. — 130 с.
2. *Алифанов, А. В.* Механизм упрочнения легированных сталей в импульсном магнитном поле / А. В. Алифанов, Ж. А. Попова, Н. М. Ционенко // *Литьё и металлургия*. — 2012. — № 4. — С. 28—35.
3. Магнитно-импульсная упрочняющая обработка металлических изделий / А. В. Алифанов [и др.] // *Технология ремонта, восстановления и упрочнения деталей машин, механизмов, инструмента и технологической оснастки : материалы IX Междунар. науч.-практ. конф., Санкт-Петербург, 10—13 апр. 2007* : в 2 ч. — СПб. : [б. и.], 2007. — Ч. 2. — С. 9—15.
4. *Комшина, А. В.* Перспективность метода низкоэнергетической обработки материалов с использованием магнитного поля / А. В. Комшина, А. С. Помельникова // *Инженер. образование*. — 2012. — № 9.
5. *Алифанов, А. В.* Технология упрочнения режущего инструмента импульсным магнитным полем / А. В. Алифанов, Н. В. Бурносков, И. Л. Чудакова // *Деревообработка: технологии, оборудование, менеджмент XXI века : материалы VI Междунар. Евраз. симп., Екатеринбург, 17—20 мая 2011 г.* — Екатеринбург : [б. и.], 2011. — С. 255—260.
6. *Воробьёва, Г. А.* О структурных превращениях в металлах и сплавах под воздействием импульсной обработки / Г. А. Воробьёва, А. Н. Иводитов, А. М. Сизов // *Изв. АН СССР. Металлы*. — 1991. — № 6. — С. 131—137.
7. *Боголюбов, Н. Н.* Проблемы динамической теории в статистической физике / Н. Н. Боголюбов. — М. : Гостехиздат, 1946. — 120 с.
8. *Блейкмор, Дж.* Физика твёрдого тела / Дж. Блейкмор. — М. : Мир, 1988. — 608 с.

Материал поступил в редакцию 22.04.2014 г.

The model describing the time-dependent diffusion of impurities in the alloy steels by magnet and pulse action has been elaborated. The transient diffusion of impurities is determined by the structural defects caused by pulse treatment. Under unsteady diffusion impurity atoms having a large radius migrate towards the border deep into the grain. The interaction of impurity atoms with dislocations prevents their further movement and leads to the hardening of ferrite grains.

Key words: diffusion, alloying elements, plastic deformation, phase transitions, magnet and pulse treatment, the reinforcing effect.