

Vol. 44, No. 6
June 2022

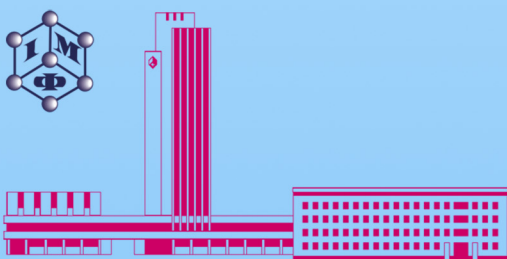
ISSN 1024-1809

METALLOPHYSICS and ADVANCED TECHNOLOGIES

МЕТАЛОФІЗИКА ТА НОВІТНІ ТЕХНОЛОГІЇ

METALLOFIZIKA I NOVEISHIE TEKHNologii

Том 44, № 6 (2022)



**G.V. Kurdyumov Institute for Metal Physics
National Academy of Sciences of Ukraine**
<https://mfint.imp.kiev.ua>

Засновник: НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ, ІНСТИТУТ МЕТАЛОФІЗИКИ ІМ. Г. В. КУРДЮМОВА НАН УКРАЇНИ
Видавець: ІНСТИТУТ МЕТАЛОФІЗИКИ ІМ. Г. В. КУРДЮМОВА НАН УКРАЇНИ

«МЕТАЛОФІЗИКА ТА НОВІТНІ ТЕХНОЛОГІЇ» • ‘METALLOPHYSICS AND ADVANCED TECHNOLOGIES’

Щомісячний науковий журнал		A Monthly Research Journal
РЕДАКЦІЙНА КОЛЕГІЯ		EDITORIAL BOARD
В. А. ТАТАРЕНКО	<i>головний редактор, чл.-кор. НАН України (Інститут металофізики ім. Г. В. Курдюмова НАН України, Київ)</i>	V. A. TATARENKO <i>Editor-in-Chief, Corresponding Member of the N.A.S.Ukr., G.V. Kurdymov Institute for Metal Physics, N.A.S.Ukr., Kyiv</i>
С. В. АХОНІН	<i>акад. НАН України (Інститут електрозварювання ім. Є. О. Патона НАН України, Київ)</i>	S. V. AKHONIN <i>Member of the N.A.S.Ukr., E. O. Paton Electric Welding Institute, N.A.S.Ukr., Kyiv</i>
М. О. БІЛОГОЛОВСЬКИЙ	<i>проф. (Київський академічний університет НАН та МОН України, Київ)</i>	M. O. BELOGOLOVSKIY <i>Professor, Kyiv Academic University, N.A.S.Ukr. & M.E.S.Ukr., Kyiv</i>
Т. М. БРИК	<i>д-р фіз.-мат. наук (Інститут фізики конденсованих систем НАН України, Львів)</i>	T. M. BRYK <i>Dr. Sc. (Phys.-Math.), Institute for Condensed Matter Physics, N.A.S.Ukr., Lviv</i>
М. О. ВАСИЛЬСВ	<i>проф. (Інститут металофізики ім. Г. В. Курдюмова НАН України, Київ)</i>	M. O. VASILIEV <i>Professor, G.V. Kurdymov Institute for Metal Physics, N.A.S.Ukr., Kyiv</i>
В. Г. ГАВРИЛЮК	<i>проф. (Інститут металофізики ім. Г. В. Курдюмова НАН України, Київ)</i>	V. G. GAVRILJUK <i>Professor, G.V. Kurdymov Institute for Metal Physics, N.A.S.Ukr., Kyiv</i>
Г. Є. ГРЕЧНЕВ	<i>проф. (Фізико-технічний інститут низьких температур ім. Б. І. Веркіна НАН України, Харків)</i>	G. E. GRECHNEV <i>Professor, B. Verkin Institute for Low Temperature Physics and Engineering, N.A.S.Ukr., Kharkiv</i>
Т. В. ЗАПОРОЖЕЦЬ	<i>проф. (Черкаський національний університет імені Богдана Хмельницького МОН України, Черкаси)</i>	T. V. ZAPOROZHETS <i>Professor, Bohdan Khmelnytsky National University of Cherkasy, M.E.S.Ukr., Cherkasy</i>
О. М. ІВАСИШИН	<i>акад. НАН України (Інститут металофізики ім. Г. В. Курдюмова НАН України, Київ)</i>	O. M. IVASISHIN <i>Member of the N.A.S.Ukr., G.V. Kurdymov Institute for Metal Physics, N.A.S.Ukr., Kyiv</i>
Ю. М. КОВАЛЬ	<i>чл.-кор. НАН України (Інститут металофізики ім. Г. В. Курдюмова НАН України, Київ)</i>	YU. M. KOVAL' <i>Corresponding Member of the N.A.S.Ukr., G.V. Kurdymov Institute for Metal Physics, N.A.S.Ukr., Kyiv</i>
О. А. КОРДЮК	<i>акад. НАН України (Київський академічний університет НАН та МОН України, Київ)</i>	O. A. KORDYUK <i>Member of the N.A.S.Ukr., Kyiv Academic University, N.A.S.Ukr. & M.E.S.Ukr., Kyiv</i>
С. О. КОТРЕЧКО	<i>заступник головного редактора, чл.-кор. НАН України (Інститут металофізики ім. Г. В. Курдюмова НАН України, Київ)</i>	S. O. KOTRECHKO <i>Deputy Editor-in-Chief, Corresponding Member of the N.A.S.Ukr., G.V. Kurdymov Institute for Metal Physics, N.A.S.Ukr., Kyiv</i>
Ю. В. КУДРЯВЦЕВ	<i>проф. (Інститут металофізики ім. Г. В. Курдюмова НАН України, Київ)</i>	YU. V. KUDRYAVTSEV <i>Professor, G.V. Kurdymov Institute for Metal Physics, N.A.S.Ukr., Kyiv</i>
К. Г. ЛЕВЧУК	<i>відповідальний секретар редколегії, д-р техн. наук (Інститут металофізики ім. Г. В. Курдюмова НАН України, Київ)</i>	K. G. LEVCHUK <i>Executive Managing Editor, Dr. Sc. (Tech.), G.V. Kurdymov Institute for Metal Physics, N.A.S.Ukr., Kyiv</i>
Є. Г. ЛЕНЬ	<i>заступник головного редактора, проф. (Інститут металофізики ім. Г. В. Курдюмова НАН України, Київ)</i>	E. G. LEN <i>Deputy Editor-in-Chief, Professor, G.V. Kurdymov Institute for Metal Physics, N.A.S.Ukr., Kyiv</i>
В. Ф. ЛОСЬ	<i>проф. (Інститут магнетизму НАН та МОН України, Київ)</i>	V. F. LOS <i>Professor, Institute of Magnetism, N.A.S.Ukr. & M.E.S.Ukr., Kyiv</i>
П. Є. МАРКОВСЬКИЙ	<i>д-р техн. наук (Інститут металофізики ім. Г. В. Курдюмова НАН України, Київ)</i>	P. E. MARKOVSKY <i>Dr. Sc. (Tech.), G.V. Kurdymov Institute for Metal Physics, N.A.S.Ukr., Kyiv</i>
В. Б. МОЛОДКІН	<i>чл.-кор. НАН України (Інститут металофізики ім. Г. В. Курдюмова НАН України, Київ)</i>	V. B. MOLODKIN <i>Corresponding Member of the N.A.S.Ukr., G.V. Kurdymov Institute for Metal Physics, N.A.S.Ukr., Kyiv</i>
Б. М. МОРДЮК	<i>д-р фіз.-мат. наук (Інститут металофізики ім. Г. В. Курдюмова НАН України, Київ)</i>	B. M. MORDYUK <i>Dr. Sc. (Phys.-Math.), G.V. Kurdymov Institute for Metal Physics, N.A.S.Ukr., Kyiv</i>
В. М. НЕСТЕРЕНКОВ	<i>чл.-кор. НАН України (Інститут електрозварювання ім. Є. О. Патона НАН України, Київ)</i>	V. M. NESTERENKOV <i>Corresponding Member of the N.A.S.Ukr., E. O. Paton Electric Welding Institute, N.A.S.Ukr., Kyiv</i>
О. Д. ПОГРЕБНЯК	<i>проф. (Сумський державний університет, МОН України, Суми)</i>	O. D. POGREBNJAK <i>Professor, Sumy State University, M.E.S.Ukr., Sumy</i>
Ю. М. ПОДРЕЗОВ	<i>д-р фіз.-мат. наук (Інститут проблем матеріалознавства ім. І. М. Францевича НАН України, Київ)</i>	YU. M. PODREZOV <i>Dr. Sc. (Phys.-Math.), I. M. Frantsevych Institute for Problems of Materials Science, N.A.S.Ukr., Kyiv</i>
Т. М. РАДЧЕНКО	<i>д-р фіз.-мат. наук (Інститут металофізики ім. Г. В. Курдюмова НАН України, Київ)</i>	T. M. RADCHENKO <i>Dr. Sc. (Phys.-Math.), G.V. Kurdymov Institute for Metal Physics, N.A.S.Ukr., Kyiv</i>
О. Д. РУДЬ	<i>проф. (Інститут металофізики ім. Г. В. Курдюмова НАН України, Київ)</i>	O. D. RUD' <i>Professor, G.V. Kurdymov Institute for Metal Physics, N.A.S.Ukr., Kyiv</i>
В. М. УВАРОВ	<i>чл.-кор. НАН України (Інститут металофізики ім. Г. В. Курдюмова НАН України, Київ)</i>	V. M. UVAROV <i>Corresponding Member of the N.A.S.Ukr., G.V. Kurdymov Institute for Metal Physics, N.A.S.Ukr., Kyiv</i>
А. І. УСТИНОВ	<i>проф. (Інститут електрозварювання ім. Є. О. Патона НАН України, Київ)</i>	A. I. USTINOV <i>Professor, E. O. Paton Electric Welding Institute, N.A.S.Ukr., Kyiv</i>
О. В. ФІЛАТОВ	<i>д-р фіз.-мат. наук (Інститут металофізики ім. Г. В. Курдюмова НАН України, Київ)</i>	O. V. FILATOV <i>Dr. Sc. (Phys.-Math.), G.V. Kurdymov Institute for Metal Physics, N.A.S.Ukr., Kyiv</i>
С. О. ФІРСТОВ	<i>акад. НАН України (Інститут проблем матеріалознавства ім. І. М. Францевича НАН України, Київ)</i>	S. O. FIRSTOV <i>Member of the N.A.S.Ukr., I. M. Frantsevych Institute for Problems of Materials Science, N.A.S.Ukr., Kyiv</i>
Т. С. ЧЕРЕПОВА	<i>д-р техн. наук (Інститут металофізики ім. Г. В. Курдюмова НАН України, Київ)</i>	T. S. CHEREPOVA <i>Dr. Sc. (Tech.), G.V. Kurdymov Institute for Metal Physics, N.A.S.Ukr., Kyiv</i>
EDITORIAL ADVISORY BOARD MEMBERS AND REGIONAL EDITORS		
Professor Ing. Ivo DLOUHÝ <i>Institute of Physics of Materials, Czech Academy of Sciences, Brno, Czech Republic</i>	Professor Janusz DUBOWIK <i>Institute of Molecular Physics, Polish Academy of Sciences, Poznań, Poland</i>	Professor Elena V. PERELOMA <i>University of Wollongong, School of Mechanical, Materials and Mechatronic Engineering, Wollongong, Sydney Area, Australia</i>
Professor Han DONG <i>School of Materials Science and Engineering, Shanghai University, Shanghai, P.R. China</i>	Professor Leszek B. MAGALAS <i>AGH University of Science and Technology, Faculty of Metals Engineering and Industrial Computer Science, Kraków, Poland</i>	Dr. Patrice E. A. TURCHI <i>Lawrence Livermore National Laboratory, Condensed Matter and Materials Division, Livermore, CA, U.S.A.</i>

AN INTERNATIONAL RESEARCH JOURNAL

METALLOPHYSICS AND ADVANCED TECHNOLOGIES

(Metallofizika i Noveishie Tekhnologii)

FOUNDED IN SEPTEMBER, 1979

Volume 44, No. 6; June, 2022

CONTENTS

Editorial Announcements	Information for Foreign Subscribers	V
	Information for Contributors	VII
Crystal-lattice defects	Modelling of Radiation-Induced Segregation in Fe–9 at.% Cr Alloy with Alloy Dislocation Subsystem Considered <i>R. V. SKOROKHOD and O. V. KOROPOV</i>	691
	Effect of TEG on Oxidation of TiC–ZrC Equimolar Blend at Mechanical Alloying <i>T. G. AVRAMENKO, A. M. KURYLIUK, O. I. NAKONECHNA, and N. N. BELYAVINA</i>	713
	Structure of High-Entropy CoCrFeNi Alloy Obtained by Laser Alloying <i>V. V. GIRZHON, V. V. YEMELIANCHENKO, and O. V. SMOLYAKOV</i>	725
	Effect of Ar Annealing on Diffusion and Thermal Stability of Transition Metal Thin-Film Systems <i>A. K. ORLOV, I. O. KRUKHLOV, A. LOZOVA, S. I. SIDORENKO, S. V. PRIKHODKO, and S. M. VOLOSHKO</i>	735
Metallic Surfaces and Films	Modification of Surface Layers of Stainless Steel AISI 420 by a Combination of Thermal and Ultrasonic Impact Influence <i>A. P. BURMAK, M. O. VASYLYEV, V. I. ZAKIEV, M. M. VORON, and S. M. VOLOSHKO</i>	751
Physics of strength and plasticity	About Al–Si Alloys Structure Features and Ductility and Strength Increasing after Deformation Heat Processing <i>V. V. KAVERINSKY, Z. P. SUKHENKO, G. A. BAGLUK, and D. G. VERBYLO</i>	769

	Modelling and Simulation of the Plastic Flows in Metal <i>M. O. KURIN, O. O. HORBACHOV, A. V. ONOPCHENKO, and T. V. LOZA</i>	785
	Influence of Ductility on Structural Reliability of Metal Alloys <i>Yu. Ya. MESHKOV and G. P. ZIMINA</i>	807

Scientific Editors of Issue—*V. S. Kharchenko, V. A. Tatarenko*

Executive Managing Editor—*K. H. Levchuk*

Executive Editor—*L. Ya. Yermolenko*

Editors—*M. V. Shcherbyna, K. H. Levchuk, M. V. Manilo*

The artwork for direct reproduction is made by computer group of EPD of the G. V. Kurdyumov Institute for Metal Physics, N.A.S. of Ukraine

Editorial Office Address:

G. V. Kurdyumov Institute for Metal Physics, N.A.S. of Ukraine, EPD—‘MNT’,

36 Academician Vernadsky Boulevard, UA-03142 Kyiv, Ukraine

Telephone: +380 44 4249042. Fax: +380 44 4242561. E-mail: mfint@imp.kiev.ua

Registration Certificate of the Publishing Subject: ДК № 5875 on 13.12.2017

State Registration Certificate of the Printed Mass Medium: KB № 23232-13072 ПП on 23.02.2018.

Approved for publication by the Academic Council of the G. V. Kurdyumov Institute for Metal Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine

Published in English, or Ukrainian languages according to resolution of Editorial Board of the journal

Printed by Publishing House ‘Akademperiodyka’, N.A.S. of Ukraine

4 Tereshchenkivs’ka Str.; UA-01024 Kyiv, Ukraine

Registration Certificate of Publishing Subject: ДК № 544 on 27.07.2001

Journal website: <http://mfint.imp.kiev.ua>

Journal DOI: <https://doi.org/10.15407/mfint>

Issue DOI: <https://doi.org/10.15407/mfint.44.06>

МЕТАЛОФІЗИКА ТА НОВІТНІ ТЕХНОЛОГІЇ

МІЖНАРОДНИЙ НАУКОВИЙ ЖУРНАЛ
ЗАСНОВАНИЙ У ВЕРЕСНІ 1979 р.

Том 44, № 6; червень, 2022

ЗМІСТ

Редакційні оголошення	Інформація для закордонних передплатників	V
	Інформація для авторів	VII
Дефекти кристалічної ґратниці	Моделювання радіаційно-індукованої сегрегації в стопі Fe–9 ат. % Cr з урахуванням дислокаційної підсистеми стопу <i>Р. В. СКОРОХОД, О. В. КОРОПОВ</i>	691
	Вплив ТРГ на окиснення продуктів механохімічного синтезу еквімолярної суміші TiC–ZrC <i>Т. Г. АВРАМЕНКО, А. М. КУРИЛЮК, О. І. НАКОНЕЧНА, Н. М. БІЛЯВИНА</i>	713
	Структура високоентропійного стопу CoCrFeNi, одержаного методом лазерного легування <i>В. В. ГІРЖОН, В. В. ЄМЕЛЬЯНЧЕНКО, О. В. СМОЛЯКОВ</i>	725
	Вплив відпалу в аргоні на дифузцію та термічну стабільність тонкоплівкових систем перехідних металів <i>А. К. ОРЛОВ, І. О. КРУГЛОВ, А. ЛОЗОВА, С. І. СИДОРЕНКО, С. В. ПРИХОДЬКО, С. М. ВОЛОШКО</i>	735
Металічні поверхні та плівки	Модифікація поверхневих шарів неіржавійної криці 40X13 комбінацією термічного й ультразвукового ударного впливу <i>А. П. БУРМАК, М. О. ВАСИЛЬЄВ, В. І. ЗАКІЄВ, М. М. ВОРОН, С. М. ВОЛОШКО</i>	751
Фізика міцності та пластичності	Про структурні особливості та підвищення пластичності та міцності Al–Si стопів після деформаційно-термічного оброблення <i>В. В. КАВЕРИНСЬКИЙ, З. П. ХУСЕНКО, Г. А. БАГЛЮК, Д. Г. ВЕРБИЛО</i>	769

	Аналітичні розв'язування задач пластичного перебігу металу під час механічного оброблення <i>М. О. КУРІН, О. О. ГОРБАЧОВ, А. В. ОНОПЧЕНКО, Т. В. ЛОЗА</i>	785
	Вплив пластичності на конструкційну надійність металевих стопів <i>Ю. Я. МІШКОВ, Г. П. ЗІМІНА</i>	807

Наукові редактори випуску: *В. С. Харченко, В. А. Татаренко*

Відповідальний секретар редакційної колегії *К. Г. Левчук*

Редактор-коректор *Л. Я. Єрмоленко*

Технічні редактори: *М. В. Щербина, К. Г. Левчук, М. В. Маніло*

Художній редактор *Л. Я. Єрмоленко*

Оригінал-макет для прямого репродукування виготовлено комп'ютерною групою РВВ Інституту металофізики ім. Г. В. Курдюмова НАН України

Адреса редакції:

Інститут металофізики ім. Г. В. Курдюмова НАН України, РВВ—Редакція «МНТ»

бульв. Акад. Вернадського, 36; 03142 Київ, Україна

Тел.: +380 44 4249042; факс: +380 44 4242561

Ел. пошта: mfint@imp.kiev.ua

Свідоцтво суб'єкта видавничої справи: ДК № 5875 від 13.12.2017 р.

Свідоцтво про державну реєстрацію друкованого засобу масової інформації: КВ № 23232-13072 ПР від 23.02.2018 р.

Затверджено до друку вченою радою Інституту металофізики ім. Г. В. Курдюмова НАН України

Друкується за постановою редакційної колегії журналу англійською, або українською мовами

Підписано до друку 30.06.2022 р. Формат 70 × 100/16.

Ум. друк. арк. 11,38. Обл.-вид. арк. 10,47.

Тираж 56 пр. Зам. № 6702 від 07.09.2022 р.

Віддруковано ВД «Академперіодика» НАН України

вул. Терещенківська, 4; 01024 Київ, Україна

Свідоцтво суб'єкта видавничої справи ДК № 544 від 27.07.2001 р.

Сайт журналу: <http://mfint.imp.kiev.ua>

DOI (журналу): <https://doi.org/10.15407/mfint>

DOI (випуску): <https://doi.org/10.15407/mfint.44.06>

INFORMATION (GUIDELINES) FOR CONTRIBUTORS

Submission of Manuscripts: Manuscripts should be sent by e-mail (mfint@imp.kiev.ua). Additionally, they can be sent by regular mail to Executive Managing Editor, Editorial Office, G. V. Kurdyumov Institute for Metal Physics, N.A.S. of Ukraine, 36 Academician Vernadsky Boulevard, UA-03142 Kyiv, Ukraine. Manuscripts may also be submitted to a member of the Editorial Advisory Board or to the appropriate Regional Editor who is familiar with the research presented.

Submission of a paper to '*Metallophysics and Advanced Technologies*' (transliteration: '*Metallfizika i Noveishie Tekhnologii*', i.e., '*MfNT*') will be taken to imply that it represents original work not previously published, that it is not being considered for publication elsewhere, and that, if accepted for publication, it will not be republished without the consent of the Editors and Publisher. It is a condition of acceptance by the Editor of a manuscript for publication that the Publishers acquire automatically the copyright in the manuscript throughout the world. Journal '*MfNT*' supports the generally accepted principles described in documents on publication ethics and unacceptable practices, which are presented on the [journal website](#).

Scope of the Journal: *Electronic Structure and Properties, Crystal-Lattice Defects, Phase Transformations, Physics of Strength and Plasticity, Metallic Surfaces and Films, Structure and Properties of Nanoscale and Mesoscopic Materials, Amorphous and Liquid States, Interactions of Radiation and Particles with Condensed Matter, Materials in Extremal Conditions, Reactor and Aerospace Metals Science, Medical Metals Science, New Metallic Materials and Synthetic Metals, Metal-Containing Smart Materials, Physical and Technical Basis of Experiment and Diagnostics, Articles under Discussion.*

Language: The language of publication may be English (preferably) or Ukrainian.

Abstract: Each paper requires an abstract of 200–250 words summarizing the significant coverage and findings (the use of mathematical symbols and expressions in abstract is not recommended).

Keywords and PACS numbers: 5–7 keywords and PACS numbers reflecting the content of the contribution should be supplied (see '*Physics and Astronomy Classification Scheme 2010*').

Manuscript Preparation: Papers should be formatted according to the [template](#), which can be downloaded from the Journal's website. The length of **research papers** should not in general exceed 5000 words and 10 figures; **review articles** should not exceed 10000 words and 30 figures, including tables and diagrams. Authors are urged to arrange the subject matter clearly under headings such as: 1. Introduction, 2. Experimental/Theoretical Details, 3. Results, 4. Discussion, 5. Conclusion, References. Subsections should be identified with section and subsection numbers (such as 6.1. Second-Value Subheading).

References and Notes: Notes are indicated in the text by consecutive superior Arabic numbers (without parentheses). References should be numbered consecutively (in square brackets) throughout the text. The full list should be collected and typed at the end of the paper in numerical order. Listed references should be completed in all details including DOI (if available) but excluding article titles in journals. **All authors'** initials should precede their names. Examples of references preparation:

1. S. O. Firstov and T. G. Rogul, *Metallfiz. Noveishie Tekhnol.*, **44**, No. 1: 127 (2022) (in Ukrainian). <https://doi.org/10.15407/mfint.44.01.0127>
2. V. B. Tarelnyk, O. P. Gaponova, and Ye. V. Konoplianchenko, *Prog. Phys. Met.*, **23**, No. 1: 27 (2022). <https://doi.org/10.15407/ufm.23.01.027>
3. A. Meisel, G. Leonhardt, and R. Szargan, *Röntgenspektren und Chemische Bindung* [X-Ray Spectra and Chemical Bond] (Leipzig: Akademische Verlagsgesellschaft Geest & Portig K.-G.: 1977) (in German).
4. J. M. Ziman, *Printsipy Teorii Tverdogo Tela* [Principles of the Theory of Solids] (Moscow: Mir: 1974) (Russian translation).
5. M. A. Stucke, D. M. Dimiduk, and D. M. Hazzledine, *High Temperature Ordered Intermetallic Alloys. V* (Eds. I. Baker and R. Darolia) (Pittsburgh, PA, USA: MRS: 1993), p. 471.
6. *Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs and Mathematical Tables* (Eds. M. Abramowitz and I. A. Stegun), Nat'l Bureau of Standards. Appl. Math. Ser. Vol. 55 (Washington, D.C.: U.S. Govt. Printing Office: 1964).
7. B. B. Karpovych and O. B. Borovkoff, *Proc. of Symp. 'Micromaterials Engineering' (Dec. 25–31, 1999)* (Kyiv: RVV IMF: 2000), vol. 2, p. 113 (in Russian).
8. A. E. Krug, *Abstr. Int. Conf. Phys. Phenomena (Dec. 25–31, 1991, Alushta)* (Kharkiv: 1991), p. 12.
9. T. M. Radchenko, *Vplyv Uporyadkuvannya Defektnoyi Struktury na Transportni Vlastyivosti Zmishanykh Krystaliv* [Influence of Ordering of the Defect Structure on Transport Properties of the Mixed Crystals] (Thesis of Disser. for the Degree of Dr. Phys.-Math. Sci.) (Kyiv: G. V. Kurdyumov Institute for Metal Physics, N.A.S.U.: 2015) (in Ukrainian). <https://doi.org/10.13140/RG.2.2.35430.22089>

ІНФОРМАЦІЯ ДЛЯ АВТОРІВ

10. E. M. Gololobov, V. B. Shipilo, N. I. Sedrenok, and A. I. Dudyak, *Sposob Polucheniya Karbonitridov Metallov* [Production Method of Metal Carbonitrides], Authors' Certificate 722341 SSSR (Publ. November 21, 1979) (in Russian).

11. V. G. Trubachev, K. V. Chuistov, V. N. Gorshkov, and A. E. Perekos, *Sposob Polucheniya Metallicheskih Poroshkov* [The Technology of Metallic Powder Production]: Patent 1639892 SU. MKI, B22 F9/02, 9/14 (Otkrytiya i Izobreteniya, **34**, No. 13: 11) (1991) (in Russian).

12. Yu. M. Koval' and V. V. Nemoshkalenko, *O Prirode Martensitnykh Prevrashcheniy* [On the Nature of Martensitic Transformations] (Kyiv: 1998) (Prepr./N.A.S. of Ukraine. Inst. for Metal Physics. No. 1, 1998) (in Russian).

Journal title abbreviations should conform to generally accepted styles:

<https://www.cas.org/support/documentation/references/corejournals>;

<https://cdn.journals.aps.org/files/rmpguapb.pdf>;

https://images.webofknowledge.com/WOK46P9/help/WOS/A_abrvjt.html;

<https://mathscinet.ams.org/msnhtml/serials.pdf>.

Equations and Formulae: Formulas in the text should be inserted by **MathType**, fully compatible with MS Office. Vectors should be typed in bold without arrows above. Note that complicated formulae, mathematical expressions or (de)notations are not recommended in the title, abstract, and keywords.

Tables: Number tables consecutively with Arabic numerals and give a clear descriptive caption at the top.

Figures: All figures should be numbered with consecutive Arabic numbers, have descriptive captions and be mentioned in the text. Keep figures separate at the end of the text and clearly label each figure with author's name and figure number. The labels at axis should contain the designation (or notation) of quantities and their units.

Preparation: Figures submitted must be of a high enough standard for reproduction with 300–600 dpi resolution (including half-tone illustrations). Redrawing or retouching of unusable figures will be charged to the authors.

Colour Plates: Whenever, the use of colour is an integral part of the research, or where the work is generated in colour, the Journal will publish (in paper version) the colour illustrations with charge to the author. Reprints in colour will carry a surcharge. Please write to the Publisher for details.

Submission of Electronic Text: Authors should submit the electronic version of their paper by e-mail to the Editorial Office. The text file should be saved in the native formats of the MS Word with a name consisting the name of the first author, for example, Hotovchenko.docx. The electronic form of figures (in TIF, EPS, JPG, PNG formats preferably and with name consisting the name of the first author also, for example, Hotovchenko_fig2a.jpg) should be planned so that they reduce to 12.7 cm column width (or less), and keep them separated from the text file. It is desirable to submit additionally all the **figures** within the format of the program, in which they were created.

Proofs: Contributors will receive page proofs for correction by e-mail as a PDF document. These must be returned to Kyiv office (mfint@imp.kiev.ua with subject beginning by word 'mfint') within 5 days of receipt.

Page Charges: There are no page charges to individuals or institutions.

Reprints: Authors can freely download a PDF version of their published article from journal website: <https://mfint.imp.kiev.ua>. The printed issues may be ordered by completing the appropriate form sent with proofs and prepaid by authors under the terms as for subscription.

Further Information: All questions arising during the **peer review** or after acceptance of manuscripts, especially those relating to reprints, should be directed to G. V. Kurdyumov Institute for Metal Physics, N.A.S. of Ukraine, Executive Managing Editor, Editorial Office, 36 Academician Vernadsky Blvd., UA-03142 Kyiv, Ukraine;

Fax: +380 44 4242561, e-mail: mfint@imp.kiev.ua (with subject beginning by word 'mfint').

We ask the authors to apply with their manuscript Copyright Transfer Agreement form.

Copyright Transfer Agreement

We, the undersigned authors of the manuscript '_____', transfer to the Founders, Publisher, and Editorial Board of the Journal 'Metallophysics and Advanced Technologies' (according to agreements between them) the right to publish this manuscript in original language or in translation to the other languages. We confirm that publication of this manuscript **will not** infringe a copyright of other persons or organizations and publication ethics.

Author(s): _____
(Last Name, First Name, Affiliation)

Correspondence Address: _____

Phone and e-mail: _____

(Signature)

(Date)

ІНФОРМАЦІЯ (ПРАВИЛА) ДЛЯ АВТОРІВ

Науковий журнал «Металофізика та новітні технології» (МфНТ) щомісяця публікує статті, які раніше ще не публікувалися та не перебувають на розгляді для опублікування в інших виданнях. Статті мають містити результати експериментальних і теоретичних досліджень в області фізики та технологій металів, сполук з металічними властивостями; рецензії на монографії; інформацію про конференції, семінари; відомості з історії металофізики; рекламу нових технологій, матеріалів, приладів. Журнал дотримується загальноприйнятих принципів, зазначених на його сайті в документах з публікаційної етики та щодо неприйнятних практик.

Тематика журналу: *Електронні структура та властивості, Дефекти кристалічної ґратки, Фазові перетворення, Фізика міцності та пластичності, Металічні поверхні та плівки, Будова та властивості наномасштабних і мезоскопічних матеріалів, Аморфний і рідкий стани, Взаємодії випромінювання та частинок із конденсованою речовиною, Матеріали в екстремальних умовах, Реакторне й авіакосмічне металознавство, Медичне металознавство, Нові металеві матеріали та синтетичні метали, Металовмісні смарт-матеріали, Фізико-технічні основи експерименту та діагностики, Дискусійні повідомлення.*

Статті публікуються однією з двох мов: англійською (відається перевага) або українською.

Статті, в оформленні яких не дотримано наступних правил для опублікування в МфНТ, повертаються авторам без розгляду по суті. (Датою надходження вважається день повторного надання статті після дотримання зазначених нижче правил.)

1. Стаття має бути підписаною всіма авторами (із зазначенням їхніх адрес електронної пошти); слід вказати прізвище, ім'я та по батькові автора, з яким редакція буде вести листування, його поштову адресу, номери телефону та факсу й адресу електронної пошти.

2. Виклад матеріалу має бути чітким, структурованим (розділами, наприклад, «1. Вступ», «2. Експериментальна/Теоретична методика», «3. Результати та їх обговорення», «4. Висновки», «Цитована література»), стислим, без довгих преамбул, відхилень і повторів, а також без дублювання в тексті даних таблиць, рисунків і підписів до них. Анотація та розділ «Висновки» мають не дублювати один одного. Числові дані слід наводити в загальноприйнятих одиницях.

3. Об'єм оригінальної (неоглядової) статті має бути не більше 5000 слів (з урахуванням основного тексту, таблиць, підписів до рисунків, списку використаних джерел) і 10 рисунків. **Об'єм оглядової статті** — до 10000 слів та 30 рисунків.

4. За потреби до редакції може надаватися друкований (A4, подвійний інтервал) примірник рукопису з ілюстраціями.

5. До редакції обов'язково надається (по e-mail) файл статті, набраний у текстовому редакторі Microsoft Word, з назвою, що складається з прізвища першого автора (латиницею), наприклад, Hotovchenko.docx.

6. Електронна версія рукопису та його друкований варіант (в разі його надання) мають бути ідентичними. Вони мають оформлюватися за **шаблоном**, який можна завантажити з сайту журналу, і містити 5–7 **індексів PACS** в редакції 'Physics and Astronomy Classification Scheme 2010'. Тексти статей мають також містити **назву статті, список авторів, повні назви та поштові адреси установ**, в яких вони працюють, **анотацію статті** (200–250 слів), **5–7 ключових слів** двома мовами (англійською та українською), а заголовки таблиць і підписи до рисунків мають подаватися **як мовою рукопису, так і англійською мовою**; англійська анотація може бути представленою в більш розгорнутому варіанті (до 500 слів). Назва статті, її анотація та ключові слова мають не містити складні формули, математичні вирази чи позначення.

7. Електронні версії рисунків мають бути представленими у вигляді окремих файлів (у форматах TIF, EPS, JPG, PNG з розрізненням у 300–600 dpi) з назвами, що складаються з прізвища першого автора (латиницею) та номера рисунка, наприклад, Hotovchenko_fig2a.jpg. Додатково рисунки надаються у форматі програми, в якій вони створювалися.

8. Написи на рисунках (особливо на півтонових) слід по можливості замінити літерними позначеннями (набраними на контрастному фоні), а криві позначити цифрами або різними типами ліній/маркерів, які мають бути роз'ясненими в підписах до рисунків або в тексті. На графіках усі лінії/маркери мають бути достатньої товщини/розміру для якісного відтворення їх у зменшеному в 2–3 рази вигляді (рекомендована початкова ширина рисунка — 12,7 см). Світлини мають бути чіткими та контрастними, а написи та позначення мають не закривати істотні деталі (для чого можна використовувати стрілки). Замість зазначення в підтекстовці збільшення під час зйомки бажано проставити масштаб (на контрастному фоні) на одній з ідентичних світлин. На графіках підписи до осей, **виконані мовою статті**, мають містити позначення (або найменування) величин, що відкладаються вздовж осей, і відділені комою їхні одиниці вимірювання.

9. Формули в текст треба вставляти за допомогою редактора формул **MathType**, сумісного з MS Office. **Вектори** слід набирати напівтовстим шрифтом без стрілок зверху.

10. Рисунки, таблиці, формули, а також підрядкові примітки (виноски) мають нумеруватися поспіль по всій статті.

11. Посилання на літературні джерела слід давати у вигляді порядкового номера, надрукованого в рядок у квадратних дужках. Список цитованої літератури складається по черговості за першою згадкою джерела. Приклади оформлення посилань наведено нижче (просимо звернути увагу на порядок розташування ініціалів і прізвищ авторів, бібліографічних відомостей і на розділові знаки, а також на необхідність зазначення **всіх** співавторів цитованої роботи та її ідентифікатора **DOI**, якщо він є):

1. S. O. Firstov and T. G. Rogul, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **44**, No. 1: 127 (2022) (in Ukrainian). <https://doi.org/10.15407/mfint.44.01.0127>
2. V. B. Tarel'nyk, O. P. Gaponova, and Ye. V. Konoplianchenko, *Prog. Phys. Met.*, **23**, No. 1: 27 (2022). <https://doi.org/10.15407/ufm.23.01.027>
3. A. Meisel, G. Leonhardt, and R. Szargan, *Röntgenspektren und Chemische Bindung* [X-Ray Spectra and Chemical Bond] (Leipzig: Akademische Verlagsgesellschaft Geest & Portig K.-G.: 1977) (in German).
4. J. M. Ziman, *Printsipy Teorii Tverdogo Tela* [Principles of the Theory of Solids] (Moscow: Mir: 1974) (Russian translation).
5. M. A. Stucke, D. M. Dimiduk, and D. M. Hazzledine, *High Temperature Ordered Intermetallic Alloys. V* (Eds. I. Baker and R. Darolia) (Pittsburgh, PA, USA: MRS: 1993), p. 471.
6. *Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs and Mathematical Tables* (Eds. M. Abramowitz and I. A. Stegun), Nat'l Bureau of Standards. Appl. Math. Ser. Vol. 55 (Washington, D.C.: U.S. Govt. Printing Office: 1964).
7. B. B. Karpovych and O. B. Borovkoff, *Proc. of Symp. 'Micromaterials Engineering' (Dec. 25–31, 1999)* (Kyiv: RVV IMF: 2000), vol. 2, p. 113 (in Russian).
8. A. Eh. Krug, *Abstr. Int. Conf. Phys. Phenomena (Dec. 25–31, 1991, Alushta)* (Kharkiv: 1991), p. 12.
9. T. M. Radchenko, *Vplyv Uporyadkuvannya Defektnoyi Struktury na Transportni Vlastyvosti Zmishanykh Krystaliv* [Influence of Ordering of the Defect Structure on Transport Properties of the Mixed Crystals] (Thesis of Diss. for the Degree of Dr. Phys.-Math. Sci.) (Kyiv: G. V. Kurdyumov Institute for Metal Physics, N.A.S.U.: 2015) (in Ukrainian). <https://doi.org/10.13140/RG.2.2.35430.22089>
10. E. M. Gololobov, V. B. Shipilo, N. I. Sedrenok, and A. I. Dudyak, *Sposob Polucheniya Karbonitridov Metallov* [Production Method of Metal Carbonitrides], Authors' Certificate 722341 SSSR (Publ. November 21, 1979) (in Russian).
11. V. G. Trubachev, K. V. Chuistov, V. N. Gorshkov, and A. E. Perekos, *Sposob Polucheniya Metallicheskikh Poroshkov* [The Technology of Metallic Powder Production]: Patent 1639892 SU. MKI, B22 F9/02, 9/14 (Otkrytiya i Izobreteniya, **34**, No. 13: 11) (1991) (in Russian).
12. Yu. M. Koval' and V. V. Nemoshkalenko, *O Prirode Martensitnykh Prevrashcheniy* [On the Nature of Martensitic Transformations] (Kyiv: 1998) (Prepr./N.A.S. of Ukraine. Inst. for Metal Physics. No. 1, 1998) (in Russian).

Слід використовувати загальноприйняті скорочення назв журналів:

<https://www.cas.org/support/documentation/references/corejournals>;
<https://cdn.journals.aps.org/files/rmpguapb.pdf>;
https://images.webofknowledge.com/WOK46P9/help/WOS/A_abrvjt.html;
<https://mathscinet.ams.org/msnhtml/serials.pdf>.

Необхідною вимогою є також надання авторами додаткового списку цитованої літератури (**References**) в латинській транслітерації (система BGN/PCGN; рекомендовані транслітератори: <http://www.slovyuk.ua/services/translit.php>; <http://ru.translit.net/?account=bgn>).

Після транслітерованих назв книг, дисертацій, патентів та ін. слід у квадратних дужках наводити їхній англomовний переклад (див. приклади вище). При транслітерації статей з МФНТ слід використовувати написання П.І.Б. авторів, наведені лише в англomовному змісті відповідного випуску, і офіційну транслітеровану назву журналу (див. також першу сторінку кожної статті та сайт).

12. Коректура авторам надсилається електронною поштою у вигляді pdf-файлу після завершення етапу **рецензування**. На перевірку коректури авторам відводяться 5 робочих днів. Після закінчення зазначеного терміну стаття автоматично направляється до друку. Виправлення слід відмітити та прокоментувати в самому pdf-файлі або оформити у вигляді переліку виправлень (підписаного уповноваженим представником колективу авторів) і переслати електронною поштою на адресу редакції.

Електронний варіант статті надсилається на e-mail: mfint@imp.kiev.ua (з темою, що починається словом 'mfint'). Друкована версія рукопису (якщо у ній є потреба) надсилається за адресою: Інститут металофізики ім. Г. В. Курдюмова НАН України, редакція МФНТ; бульвар Акад. Вернадського, 36; 03142 Київ, Україна або відповідному регіональному редактору (див. сайт).

Автори можуть вільно завантажити pdf-файли опублікованих статей з сайту журналу (<https://mfint.imp.kiev.ua>), а також замовити друковані примірники випуску журналу зі своєю статтею, надіславши до редакції журналу разом з **коректурою відповідну заявку та квитанцію про оплату** друку необхідної кількості примірників випуску на умовах, аналогічних передплатним.

Відповідно до угод між редакцією МФНТ, засновниками та видавцем журналу, редакція вважає, що автори, надсилаючи їй рукопис статті, передають засновникам, видавцю та редколегії право опублікувати цей рукопис мовою оригіналу та в перекладі іншими мовами, і просить авторів відразу прикладати до рукопису «Угоду про передачу авторського права».

Угода про передачу авторського права

Ми, що нижче підписалися, автори рукопису «_____», передаємо засновникам, видавцю та редколегії журналу «Металофізика та новітні технології» (згідно з угодами між ними) право опублікувати цей рукопис мовою оригіналу та в перекладі іншими мовами. Ми підтверджуємо, що ця публікація не порушує авторського права інших осіб або організацій і принципів наукової етики. При цьому за авторами зберігаються всі інші права як власників цього рукопису.

Підписи авторів: _____ (П.І.Б., дата, адреса, тел., e-mail)

CRYSTAL-LATTICE DEFECTS

PACS numbers: 07.05.Tr, 61.72.J-, 61.80.Az, 61.80.Hg, 61.82.Bg, 66.30.-h

Моделювання радіаційно-індукованої сегрегації в стопі Fe–9 ат.% Cr з урахуванням дислокаційної підсистеми стопу

Р. В. Скороход, О. В. Коропов

*Інститут прикладної фізики НАН України,
вул. Петропавлівська, 58,
40000 Суми, Україна*

Для стопу Fe–9 ат.% Cr в рамках моделю, який базується на першому і другому законах Фіка з урахуванням оберненого ефекту Кіркендала, проведено моделювання радіаційно-індукованої сегрегації та систематизацію і розрахунки визначальних кількісних характеристик радіаційно-індукованої сегрегації. До таких характеристик ми відносимо наступні: концентраційні профілі атомів Cr і точкових дефектів, поверхневу концентрацію атомів Cr, величину поверхневого збагачення (збіднення) атомів Cr, повну ширину концентраційного профілю атомів Cr на рівні половини максимального збагачення (збіднення), сегрегаційну площу Cr та дискримінант радіаційно-індукованої сегрегації атомів Cr в стаціонарному режимі. Досліджено вплив дислокаційної підсистеми стопу Fe–9 ат.% Cr на зазначені характеристики радіаційно-індукованої сегрегації і показано, що дислокаційна підсистема пригнічує ефекти радіаційно-індукованої сегрегації за рахунок поглинання нерівноважних точкових дефектів. Розраховані концентраційні профілі атомів Cr та точкових дефектів при обраних значеннях густин дислокацій в дислокаційній підсистемі стопу (0 , 10^{12} м^{-2} , 10^{14} м^{-2} , 10^{16} м^{-2}). Для даних значень густин дислокацій досліджена залежність поверхневого збагачення атомів Cr від дози опромінення при її збільшенні від 10^{-4} зна до 10^2 зна і проаналізовані залежності визначальних кількісних характеристик радіаційно-індукованої сегрегації від температури при її зміні від 250°C до 650°C .

Corresponding author: Roman Volodymyrovych Skorokhod
E-mail: r.skorokhodqq@gmail.com

*Institute of Applied Physics, N.A.S. of Ukraine,
58 Petropavlivska Str., 40000 Sumy, Ukraine*

Citation: R. V. Skorokhod and O. V. Koropov, Modelling of Radiation-Induced Segregation in Fe–9 at.% Cr Alloy with the Alloy Dislocation Subsystem Considered, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **44**, No. 6: 691–711 (2022) (in Ukrainian). DOI: [10.15407/mfint.44.06.0691](https://doi.org/10.15407/mfint.44.06.0691)

Ключові слова: радіаційно-індукована сегрегація, концентровані металеві стопи, дислокаційна підсистема стопу, точкові дефекти, концентраційні профілі, поверхнєве збагачення, комп'ютерне моделювання.

For the Fe–9 at.% Cr alloy, radiation-induced segregation is simulated in the model based on the first and second Fick's laws with inverse Kirkendall effect considered. The governing quantitative characteristics of radiation-induced segregation are systematized and calculated. Such characteristics include the following: concentration profiles of Cr atoms and point defects, surface concentration of Cr atoms, the value of surface enrichment (depletion) of Cr atoms, the full width of the concentration profile of Cr atoms at half maximum enrichment (depletion), segregation area of Cr and discriminant of radiation-induced segregation of Cr atoms in a steady state. The effect of the Fe–9 at.% Cr alloy dislocation subsystem on the specified characteristics of radiation-induced segregation is studied due to the absorption of nonequilibrium point defects. The dislocation subsystem is shown to suppress the effects of radiation-induced segregation. The concentration profiles of Cr atoms and point defects at the selected values of dislocation densities in the alloy dislocation subsystem (0 , 10^{12} m^{-2} , 10^{14} m^{-2} , 10^{16} m^{-2}) are calculated. For the values of dislocation densities, the dependence of the surface enrichment of Cr atoms on the irradiation dose increased from 10^{-4} dpa to 10^2 dpa is studied and the dependences of the governing quantitative characteristics of radiation-induced segregation on temperature changed from 250°C to 650°C are analysed.

Key words: radiation-induced segregation, concentrated metal alloys, alloy dislocation subsystem, point defects, concentration profiles, surface enrichment, computer modeling.

(Отримано 8 вересня 2020 р.; остаточн. варіант — 24 грудня 2021 р.)

1. ВСТУП

Дослідження еволюції механічних та фізико-хімічних властивостей конструкційних матеріалів ядерних реакторів в процесі експлуатації є актуальною задачею радіаційного матеріалознавства [1–6]. Для аналізу впливу опромінення на матеріали ядерної енергетики використовують зразки-свідки [7] та симуляційні експерименти з електронами, протонами чи важкими йонами (див., наприклад, [8–12]). В сучасних дослідженнях змін елементного складу та мікроструктури опромінених металевих стопів активно впроваджується комп'ютерне моделювання фізичних процесів, які протікають за умов опромінення (див., наприклад, [1, 2, 13]). Це, насамперед, пов'язано з постійним ростом потужності комп'ютерів і розрахункових кластерів, відносно дешевизною комп'ютерного моделювання та достатньо високою точністю розрахунків.

Дану роботу присвячено моделюванню явища радіаційно-індукованої сегрегації (РІС), яке полягає в просторовому перерозподілі атомів різного сорту металевго стопу під дією опромінення. В результаті такого перерозподілу спостерігається збіднення або збагачення зразка стопу по головним, домішковим чи легуючим компонентам поблизу стоків точкових дефектів (ТД), таких як поверхні зразка, пори, дислокаційні петлі, міжзеренні межі та інші [1, 14]. Наслідками РІС, зокрема, можуть бути погіршення механічної міцності та корозійної стійкості матеріялу, прискорення утворення, взагалі кажучи, багатокомпонентних виділень нової фази, тощо [1]. Виділення нової фази, як відомо, гальмують рух дислокацій, які є носіями пластичної деформації [15, 16], а насамперед пластичний металевий стоп стає більш твердим і навіть може окрихчуватись шляхом утворення і розростання тріщин [17]. Різні питання, пов'язані з РІС, досліджувались в роботах [18–21] (див. також докторську дисертацію А. А. Туркіна [22]).

Метою даної роботи є систематизація та розрахунки визначальних кількісних характеристик РІС в стопі Fe–9 ат. % Cr з урахуванням дислокаційної підсистеми матеріялу при різних значеннях густин дислокацій. Відмітимо, що дислокації в металах відіграють роль ефективних стоків ТД [23], та, завдяки цьому, за умов опромінення впливають на формування концентраційних профілів як ТД, так і компонентів стопу.

2. БАЗОВИЙ МОДЕЛЬ

Для моделювання РІС в двокомпонентному стопі Fe–9 ат. % Cr будемо використовувати модель, який базується на першому та другому законах Фіка з урахуванням оберненого ефекту Кіркендалла (inverse Kirkendall model) [1, 14, 24–26]. Вважаємо, що зразок стопу являє собою шар з постійною товщиною l , який займає область $0 \leq x \leq l$, а поверхні зразка ($x = 0$, $x = l$) є ідеальними стоками ТД. На відміну від попередніх робіт [27–30] введемо до розгляду дислокаційну підсистему в стопі, яка є розосередженим стоком ТД і описується густиною дислокацій ρ_D . Також врахуємо, що концентрації ТД — вакансій (v) і міжвузельних атомів (i) $C_{v(i)}(x, t)$ на декілька порядків менше концентрацій атомів Fe $C_{Fe}(x, t)$ та атомів Cr $C_{Cr}(x, t)$, тобто з достатньо великою точністю можна вважати, що

$$C_{Cr} + C_{Fe} = 1. \quad (1)$$

Просторово-часова еволюція концентрацій атомів Cr $C_{Cr}(x, t)$, вакансій $C_v(x, t)$ та міжвузельних атомів $C_i(x, t)$ задається системою трьох пов'язаних між собою нелінійних диференціальних рівнянь у частинних похідних [1, 24]:

$$\begin{cases} \frac{\partial C_{Cr}}{\partial t} = -\nabla \mathbf{J}_{Cr}, \\ \frac{\partial C_v}{\partial t} = -\nabla \mathbf{J}_v + K_0 - R_{iv} C_v C_i - k_v^2 D_v (C_v - C_v^{eq}), \\ \frac{\partial C_i}{\partial t} = -\nabla \mathbf{J}_i + K_0 - R_{iv} C_v C_i - k_i^2 D_i (C_i - C_i^{eq}), \end{cases} \quad (2)$$

де $\mathbf{J}_{Cr}$ та $\mathbf{J}_p$ (тут і далі нижній індекс $p = v, i$) — потоки атомів Cr ($\mathbf{J}_{Cr}$) і ТД сорту p ($\mathbf{J}_p$), K_0 — швидкість продукування радіаційних (нерівноважних) ТД (пар Френкеля), R_{iv} — коефіцієнт рекомбінації вакансій та міжвузельних атомів, k_p — потужність стоків ТД сорту p [1], C_v^{eq} і C_i^{eq} — термодинамічно рівноважні концентрації вакансій та міжвузельних атомів. Для коефіцієнта рекомбінації ТД має місце формула [31]

$$R_{iv} = \frac{4\pi r_{iv}}{\Omega} [(d_{Cr,v} + d_{Cr,i}) C_{Cr} + (d_{Fe,v} + d_{Fe,i})(1 - C_{Cr})]. \quad (3)$$

Тут r_{iv} — радіус рекомбінації ТД, Ω — середній атомний об'єм в стопі, $d_{j,p}$ (нижній індекс $j = Cr, Fe$) — кінетичні коефіцієнти (diffusivity coefficients) [1], які пов'язані з парціальними коефіцієнтами дифузії атомів ($D_{Cr(Fe)} = d_{Cr(Fe),v} C_v + d_{Cr(Fe),i} C_i$), та ТД ($D_{v(i)} = d_{Cr,v(i)} C_{Cr} + d_{Fe,v(i)} C_{Fe}$). Оскільки стоп Fe-9 ат. % Cr має ОЦК-ґратницю, то середній атомний об'єм дорівнює $\Omega = a^3/2$, де a — параметр ґратниці. Кінетичні коефіцієнти $d_{j,p}$ визначаються як [1]:

$$d_{j,p} = d_{j,p}^0 \exp\left(\frac{-E_{j,p}^m}{k_b T}\right), \quad (4)$$

де $d_{j,p}^0$ — передекспоненційний фактор, $E_{j,p}^m$ — енергія міграції ТД за допомогою атомів сорту j , k_b — стала Больцмана, T — температура. Потужність стоків ТД має вигляд [1, 32]

$$k_p^2 = 4\pi r_{pD} \frac{\rho_D}{\Delta}, \quad (5)$$

де r_{pD} — радіус захвату дислокацією ТД сорту p , Δ — відстань між кристалографічними площинами ($\Delta = a$). Для термодинамічно рівноважних концентрацій ТД C_v^{eq} та C_i^{eq} справедливі наступні формули [1]

$$C_v^{eq} = \exp\left(\frac{S_v^f}{k_b}\right) \exp\left(-\frac{E_{Fe,v}^f}{k_b T}\right), \quad (6)$$

$$C_i^{\text{eq}} = \exp\left(-\frac{E_{\text{Fe},i}^f}{k_b T}\right), \quad (7)$$

де S_v^f — ентропія формування вакансій, $E_{\text{Fe},v}^f$ — енергія формування вакансій Fe, $E_{\text{Fe},i}^f$ — енергія формування міжвузельних атомів Fe.

Потоки атомів Cr (J_{Cr}) та ТД ($J_{v(i)}$) задаються виразами [1]:

$$J_{\text{Cr}} = -\alpha D_{\text{Cr}} \nabla C_{\text{Cr}} + (d_{\text{Cr},v} \nabla C_v - d_{\text{Cr},i} \nabla C_i) C_{\text{Cr}}, \quad (8)$$

$$J_v = \alpha C_v (d_{\text{Cr},v} - d_{\text{Fe},v}) \nabla C_{\text{Cr}} - D_v \nabla C_v, \quad (9)$$

$$J_i = -\alpha C_i (d_{\text{Cr},i} - d_{\text{Fe},i}) \nabla C_{\text{Cr}} - D_i \nabla C_i, \quad (10)$$

де α — термодинамічний фактор [1, 24].

Як і в попередній роботі [27], будемо вважати, що в початковий момент часу ($t = 0$) атоми Cr та Fe розподілені однорідно в об'ємі зразка, тобто

$$C_{\text{Cr}}(x, t)|_{t=0} = 0,09, C_{\text{Fe}}(x, t)|_{t=0} = 0,91, \quad (11)$$

а концентрації ТД $C_{v(i)}(x, t)$ дорівнюють відповідним термодинамічно рівноважним значенням $C_{v(i)}^{\text{eq}}$

$$C_v(x, t)|_{t=0} = C_v^{\text{eq}}, C_i(x, t)|_{t=0} = C_i^{\text{eq}}. \quad (12)$$

Оскільки поверхню зразка вважаємо ідеальним стоком ТД, концентрації ТД $C_{v(i)}(x, t)$ на поверхні ($x = 0$) приймаємо наступними:

$$C_v(x, t)|_{x=0} = C_v^{\text{eq}}, C_i(x, t)|_{x=0} = C_i^{\text{eq}}. \quad (13)$$

В площині симетрії зразка стопу ($x = l/2$) градієнти концентрацій атомів Cr $C_{\text{Cr}}(x, t)$ і ТД $C_{v(i)}(x, t)$ природно прийняти рівними нулю

$$\left. \frac{\partial C_{\text{Cr}}(x, t)}{\partial x} \right|_{x=l/2} = \left. \frac{\partial C_v(x, t)}{\partial x} \right|_{x=l/2} = \left. \frac{\partial C_i(x, t)}{\partial x} \right|_{x=l/2} = 0. \quad (14)$$

Додатково для концентрації атомів Cr $C_{\text{Cr}}(x, t)$ має виконуватися закон збереження речовини

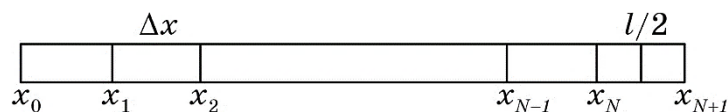


Рис. 1. Схематичне зображення різницевої схеми.

Fig. 1. Schematic representation of the difference scheme.

ТАБЛИЦЯ 1. Вхідні параметри.

TABLE 1. Input parameters.

Параметр	Символ	Значення	Посилання
Параметр ґратниці	a	$2,86 \cdot 10^{-10}$ м	[37]
Радіус рекомбінації ТД	r_{iv}	$3,3a$	[38]
Радіус захвату міжвузельних атомів дислокацією	r_{iD}	10^{-9} м	[39]
Радіус захвату вакансій дислокацією	r_{vD}	10^{-9} м	[40]
Енергія формування міжвузельних атомів Fe	$E_{Fe,i}^f$	5,0 eV	[41]
Енергія формування вакансій Fe	$E_{Fe,v}^f$	1,6 eV	[42]
Енергія міграції міжвузельних атомів Fe	$E_{Fe,i}^m$	0,35 eV	[26]
Енергія міграції вакансій Fe	$E_{Fe,v}^m$	0,625 eV	[26]
Передекспоненційний фактор дифузії міжвузельних атомів в Fe	$d_{Fe,i}^0$	$6,59 \cdot 10^{-7}$ м ² /с	[37]
Передекспоненційний фактор дифузії вакансій Fe	$d_{Fe,v}^0$	$5,92 \cdot 10^{-6}$ м ² /с	[37]
Енергія міграції міжвузельних атомів Cr	$E_{Cr,i}^m$	0,28 eV	[26]
Енергія міграції вакансій Cr	$E_{Cr,v}^m$	0,55 eV	[26]
Передекспоненційний фактор дифузії міжвузельних атомів Cr	$d_{Cr,i}^0$	$6,85 \cdot 10^{-7}$ м ² /с	[37]
Передекспоненційний фактор дифузії вакансій Cr	$d_{Cr,v}^0$	$5,46 \cdot 10^{-6}$ м ² /с	[37]
Ентропія формування вакансій	S_v^f	$1,0k_b$	[42]
Термодинамічний фактор	α	1	[42]

$$\int_0^{l/2} C_{Cr}(x, t) dx = \frac{l}{2} C_{Cr}(x, t)|_{t=0}, \quad (15)$$

який відіграє роль ще однієї граничної умови.

Система диференціальних рівнянь (2) з початковими та граничними умовами (11)–(15) розв'язувалася чисельно. Вхідні параметри до цієї системи представлені в табл. 1. Математичний алгоритм, який використовувався при розв'язанні системи (2), обговорювався в роботі [27]. Всі розрахунки проведені для зразків стопу Fe–9 ат. % Cr товщиною $l = 300$ нм з кроком різницевої схеми $\Delta x = l/(2N + 1) \approx 0,2498$ нм по просторовій координаті x , де

$N = 600$ (рис. 1). Після визначення концентрації атомів Cr $C_{Cr}(x, t)$ концентрація атомів Fe $C_{Fe}(x, t)$ знаходилась з рівності (1).

Значення температури T , набраної дози опромінення D , швидкості продукування радіаційних ТД K_0 та густини дислокацій ρ_D , за замовченням, обрані наступними: $T = 300^\circ\text{C}$, $D = 1$ зна (зміщення на атом), $K_0 = 10^{-5}$ зна/с, $\rho_D = 10^{14} \text{ м}^{-2}$. Відмітимо, що за умов достатньо тривалого опромінення густина дислокацій зазвичай виходить на стаціонарне значення (див. наприклад роботи [1, 33–36]); для стопів Fe–Cr зазвичай спостерігаються значення $\rho_D \approx 10^{14} \text{ м}^{-2}$ [33–36]. Тоді можна думати, що густина дислокацій $\rho_D = 10^{14} \text{ м}^{-2}$, прийнята в

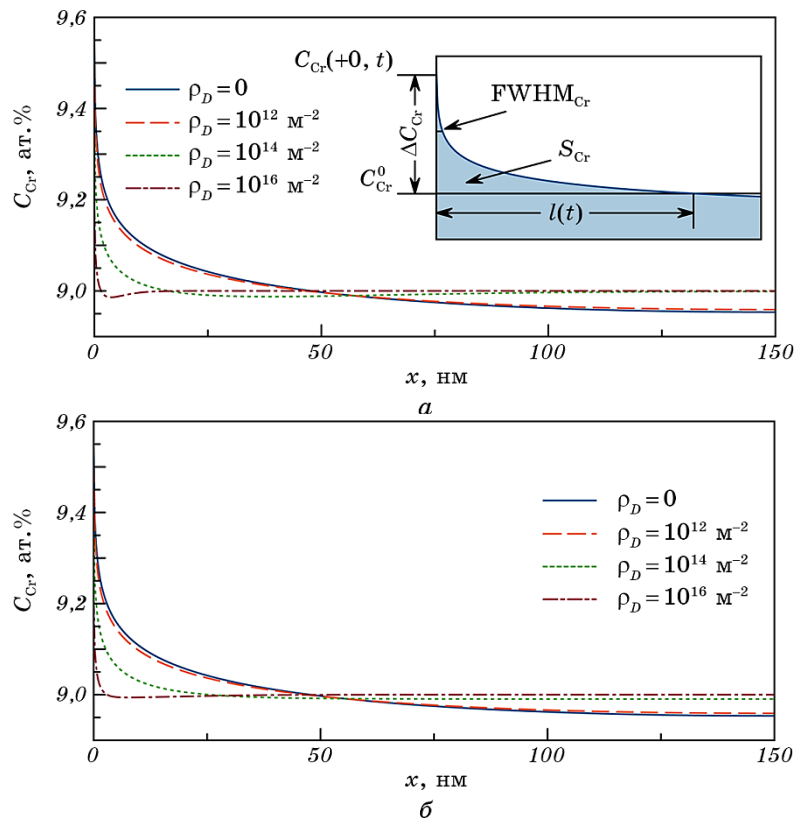


Рис. 2. Залежності концентрації атомів Cr від координати при дозах опромінення 1 зна (а) і 12 зна (б) та різних значеннях густин дислокацій. На вставці до рис. 2, а схематично зображені визначальні кількісні характеристики РІС 1, 3–6.

Fig. 2. Concentration of Cr atoms as a function of coordinates at irradiation doses of 1 dpa (a) and 12 dpa (б) and different values of dislocation densities. The insert to Fig. 2, a schematically depicts governing quantitative characteristics of RIS 1, 3–6.

розрахунках, не буде помітно змінюватися під час процесів РІС, а розрахунки з іншими значеннями густин дислокацій можна розглядати як суто модельні.

3. ВИЗНАЧАЛЬНІ КІЛЬКІСНІ ХАРАКТЕРИСТИКИ РІС

До визначальних кількісних характеристик РІС в двокомпонентних стопах Fe–Cr будемо відносити наступні:

1) концентраційний профіль атомів Cr

$$C_{Cr} = C_{Cr}(x, t), \quad (16)$$

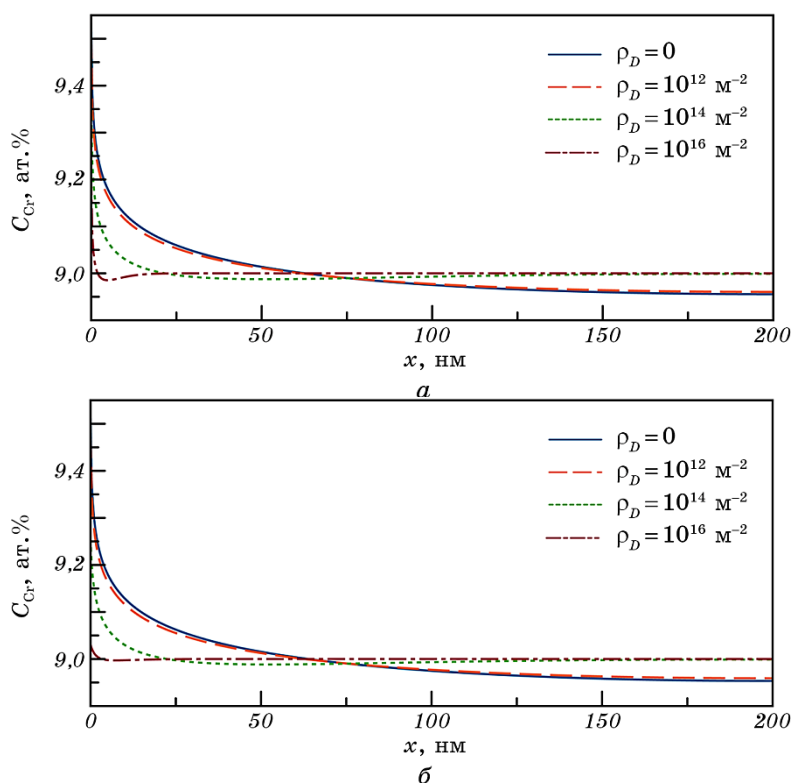


Рис. 3. Залежності концентрації атомів Cr від координати при швидкостях продукування радіаційних ТД 10^{-4} зна/с (а) і 10^{-7} зна/с (б) та різних значеннях густин дислокацій.

Fig. 3. Concentration of Cr atoms as a function of coordinates at production rates of point defect (PD) of 10^{-4} dpa/s (a) and 10^{-7} dpa/s (b) and different values of dislocation densities.

2) концентраційні профілі ТД (вакансій та міжвузельних атомів)

$$C_v = C_v(x, t), C_i = C_i(x, t), \quad (17)$$

3) поверхнева концентрація атомів Cr (концентрація атомів Cr в безпосередній близькості від поверхні зразка)

$$C_{Cr}(+0, t) = C_{Cr}(x, t)|_{x \rightarrow +0}, \quad (18)$$

4) поверхнєве збагачення (збіднення) атомів Cr

$$\Delta C_{Cr} = C_{Cr}(+0, t) - C_{Cr}^0, \quad (19)$$

де C_{Cr}^0 — концентрація атомів Cr в умовах однорідного розподілу атомів в стопі Fe–Cr;

5) сегрегаційна площа Cr — площа фігури, яка обмежена кривою $C_{Cr} = C_{Cr}(x, t)$ і прямою $C_{Cr} = C_{Cr}^0$ в межах $0 \leq x \leq l(t)$ [1]:

$$S_{Cr} = \int_0^{l(t)} |C_{Cr}(x, t) - C_{Cr}^0| dx, \quad (20)$$

де $l(t)$ — відстань від початку координат ($x=0$) до точки перетину кривої $C_{Cr} = C_{Cr}(x, t)$ та прямої $C_{Cr} = C_{Cr}^0$,

6) повна ширина концентраційного профілю атомів Cr на рівні половини максимального збагачення (збіднення) FWHM_{Cr} (full width at half maximum),

7) дискримінант РІС атомів Cr — величина, яка вказує на поверхнєве збагачення ($\mathcal{D}_{Cr} < 0$) або збіднення ($\mathcal{D}_{Cr} > 0$) атомів Cr у ста-

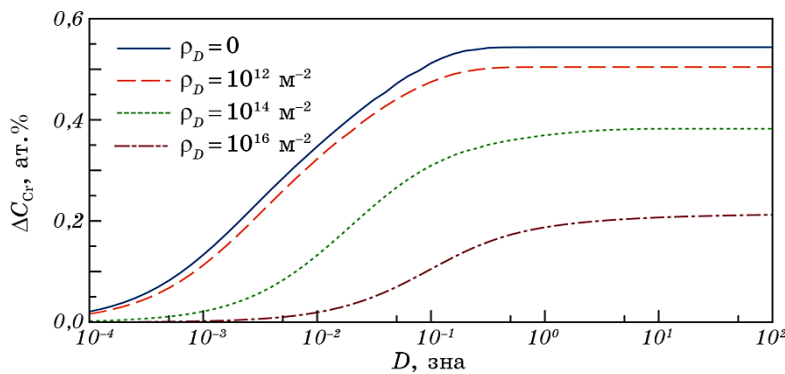


Рис. 4. Залежності поверхневого збагачення атомів Cr від дози при різних значеннях густин дислокацій.

Fig. 4. Surface enrichment of Cr atoms as a function of dose at different values of dislocation densities.

ціонарному режимі РІС [1, 24, 28]:

$$\mathcal{D}_{Cr} = \frac{\nabla C_{Cr}}{\nabla C_v} = \frac{C_{Cr} C_{Fe} d_{Fe,i} d_{Fe,v}}{\alpha(d_{Fe,i} C_{Fe} D_{Cr} + d_{Cr,i} C_{Cr} D_{Fe})} \left(\frac{d_{Cr,v}}{d_{Fe,v}} - \frac{d_{Cr,i}}{d_{Fe,i}} \right). \quad (21)$$

Зазначимо, що характеристика (20) є єдиною інтегральною характеристикою РІС.

4. РЕЗУЛЬТАТИ ТА ОБГОВОРЕННЯ

Концентраційні профілі атомів Cr $C_{Cr} = C_{Cr}(x, t)$, які розраховані при температурі $T = 300^\circ\text{C}$, швидкості продукування радіаційних ТД $K_0 = 10^{-5}$ зна/с, різних значеннях густин дислокацій в дислокацій-

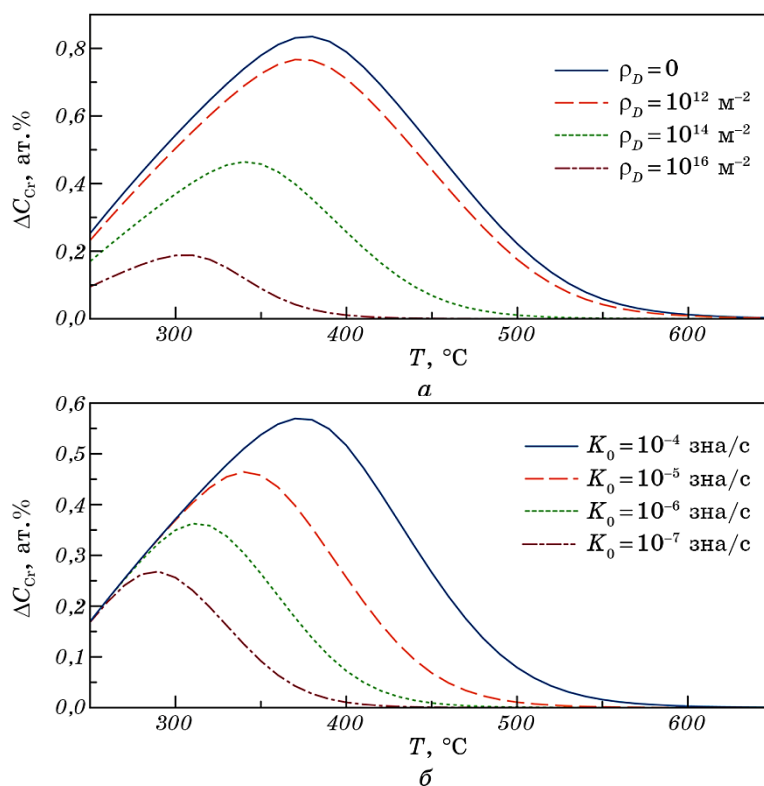


Рис. 5. Залежності поверхневого збагачення атомів Cr від температури при різних значеннях густин дислокацій (а) та швидкостей продукування радіаційних ТД (б).

Fig. 5. Surface enrichment of Cr atoms as a function of temperature at different values of dislocation densities (a) and production rates of PD (b).

ній підсистемі стопу ($\rho_D = 0$, $\rho_D = 10^{12} \text{ м}^{-2}$, $\rho_D = 10^{14} \text{ м}^{-2}$, $\rho_D = 10^{16} \text{ м}^{-2}$) та дозах опромінення $D = 1$ зна і $D = 12$ зна представлені на рис. 2, а та б відповідно. Схематичні зображення визначальних кількісних характеристик РІС 1, 3–6 наведені на вставці до рис. 2, а. Як видно з рис. 2, а для дози $D = 1$ зна зі збільшенням густини дислокацій зменшується поверхнева концентрація атомів Cr $C_{Cr}(+0) = C_{Cr}(x \rightarrow +0)$, а саме при $\rho_D = 0$ $C_{Cr}(+0) = 9,54$ ат.%, при $\rho_D = 10^{12} \text{ м}^{-2}$ $C_{Cr}(+0) = 9,50$ ат.%, при $\rho_D = 10^{14} \text{ м}^{-2}$ $C_{Cr}(+0) = 9,37$ ат.%, при $\rho_D = 10^{16} \text{ м}^{-2}$ $C_{Cr}(+0) = 9,19$ ат.%. Для значень густин дислокацій $\rho_D = 10^{14} \text{ м}^{-2}$ та $\rho_D = 10^{16} \text{ м}^{-2}$ і дози $D = 1$ зна мають місце мінімуми концентрації Cr як функції просторової координати x ($C_{Cr}(x)$) (пунктирна та штрихпунктирна криві на рис 2, а). Для дози $D = 12$ зна (рис. 2, б) мінімум концентрації Cr в залежностях $C_{Cr} = C_{Cr}(x)$ спостерігається лише при $\rho_D = 10^{16} \text{ м}^{-2}$ (штрихпунктирна крива на рис 2, б).

Відмітимо, що згідно з проведеними розрахунками для значення $\rho_D = 10^{16} \text{ м}^{-2}$ мінімум концентрації Cr $C_{Cr} = C_{Cr}(x)$ зникає при практично не досяжних дозах $D \approx 10^3$ зна. Наявності зазначених мінімумів при високих значеннях густин дислокацій $\rho_D = 10^{14} \text{ м}^{-2}$ та $\rho_D = 10^{16} \text{ м}^{-2}$ для дози $D = 1$ зна та при $\rho_D = 10^{16} \text{ м}^{-2}$ ($D = 12$ зна) пов'язані з невстановленням стаціонарного режиму РІС при обраних значеннях дози D . Інакше кажучи, атоми Cr ефективно накопичуються поблизу поверхні зразка, а дифузійні потоки атомів Cr з глибини зразка, через їхню відносну малість, не встигають поповнювати область збіднення атомів Cr на відстані від поверхні.

На рисунку 3 наведено концентраційні профілі атомів Cr $C_{Cr} = C_{Cr}(x)$, які розраховані при дозі опромінення $D = 1$ зна, швидко-

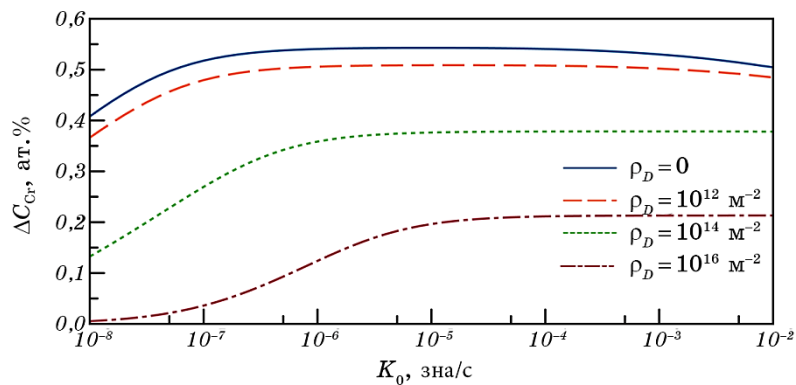


Рис. 6. Залежності поверхневого збагачення атомів Cr від швидкостей продукування радіаційних ТД при різних значеннях густин дислокацій.

Fig. 6. Surface enrichment of Cr atoms as a function of production rate of PD at different values of dislocation densities.

стях продукування радіаційних ТД $K_0 = 10^{-4}$ зна/с (рис. 3, а) та $K_0 = 10^{-7}$ зна/с (рис. 3, б) і зазначених вище значеннях густин дислокацій.

З рисунку 3 видно, що при вказаних значеннях K_0 як і при $K_0 = 10^{-5}$ зна/с (див. рис 2, а) для значень $\rho_D = 10^{14} \text{ м}^{-2}$ та $\rho_D = 10^{16} \text{ м}^{-2}$ мають місце мінімуми концентрації Cr як функції просторової координати x ($C_{Cr}(x)$) (пунктирна та штрихпунктирна криві на рис 2, а). Така залежність свідчить про те, що стаціонарний режим РІС не встановлюється для значень $\rho_D = 10^{14} \text{ м}^{-2}$ та $\rho_D = 10^{16} \text{ м}^{-2}$ при дозі $D = 1$ зна навіть для $K_0 = 10^{-7}$ зна/с. Відмітимо, що при менших швидкостях продукування радіаційних ТД мінімуми концентрації Cr $C_{Cr} = C_{Cr}(x)$ більш розмиті при одних і тих же набраних дозах.

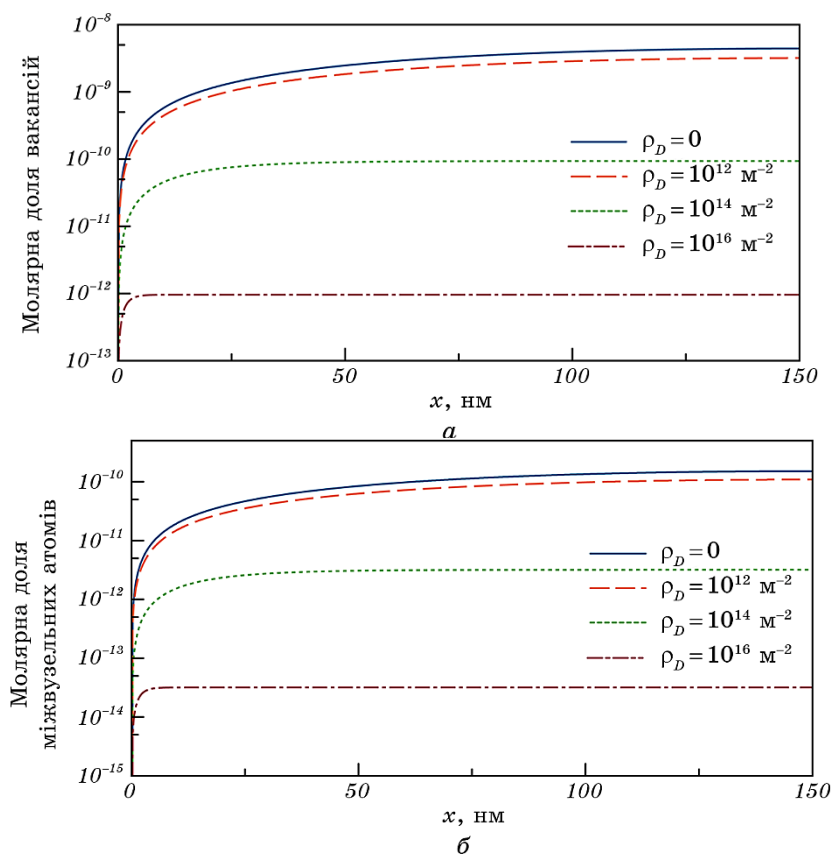


Рис. 7. Залежності молярної доли вакансій (а) та міжвузельних атомів (б) від координати при різних значеннях густин дислокацій.

Fig. 7. Mole fraction of vacancies (a) and interstitials (b) as a function of coordinates at different values of dislocation densities.

Таким чином, якісно можна стверджувати, що висока густина дислокацій ρ_D та велика швидкість продукування радіаційних ТД K_0 є факторами, які уповільнюють встановлення стаціонарного режиму РІС. Висока густина дислокацій ρ_D зменшує дифузійні потоки атомів, пов'язаних з дифузійними потоками ТД, за рахунок інтенсивного поглинання ТД дислокаціями, а великі значення K_0 підвищують нерівноважність системи.

На рисунку 4 представлені залежності величини поверхневого збагачення атомів Cr $\Delta C_{Cr} = \Delta C_{Cr}(D)$ при зазначених вище значеннях густин дислокацій ρ_D . Як випливає з рис. 4, для всього інтервалу набраних доз опромінення $10^{-4} < D < 10^2$ зна ΔC_{Cr} помітно зменшується зі збільшенням значення густини дислокацій ρ_D при фіксованому значенні дози D , що узгоджується з поведінкою поверхневої концентрації атомів Cr $C_{Cr}(+0)$, представленої на рис. 2, для доз $D = 1$ зна та $D = 12$ зна. При значеннях $\rho_D = 0$ і $\rho_D = 10^{12} \text{ м}^{-2}$ величина ΔC_{Cr} зростає зі збільшенням дози опромінення D в інтервалі $10^{-4} < D < 1$ зна, а при подальшому збільшенні дози D залишається практично незмінною. Така поведінка $\Delta C_{Cr}(D)$ вказує на те, що при дозі $D \approx 1$ зна ($\rho_D = 0$, $\rho_D = 10^{12} \text{ м}^{-2}$) спостерігається вихід на стаціонарний режим РІС. Для густин дислокацій $\rho_D = 10^{14} \text{ м}^{-2}$ вихід на стаціонарний режим РІС спостерігається при дозі $D \approx 12$ зна. Проте для $\rho_D = 10^{16} \text{ м}^{-2}$ величина поверхневого збагачення атомів Cr $\Delta C_{Cr}(D)$ зростає на всьому обраному інтервалі набраних доз ($10^{-4} < D < 10^2$ зна), тобто на цьому інтервалі значень D стаціонарний режим РІС ще не встановлюється.

Характерні робочі температури сучасних ядерних реакторів лежать в діапазоні $265 < T < 350^\circ\text{C}$, а для перспективних ядерних реакторів IV покоління можуть сягати $T = 1100^\circ\text{C}$ [2, 43, 44]. В даній роботі моделювання РІС для всіх обраних значень густин дислокацій ($\rho_D = 0$, $\rho_D = 10^{12} \text{ м}^{-2}$, $\rho_D = 10^{14} \text{ м}^{-2}$ і $\rho_D = 10^{16} \text{ м}^{-2}$) проведено від температури $T = 250^\circ\text{C}$ до $T = 650^\circ\text{C}$.

На рисунку 5 зображені залежності $\Delta C_{Cr} = \Delta C_{Cr}(T)$ при $D = 1$ зна, $K_0 = 10^{-5}$ зна/с і різних значеннях густин дислокацій $\rho_D = 0$, $\rho_D = 10^{12} \text{ м}^{-2}$, $\rho_D = 10^{14} \text{ м}^{-2}$, $\rho_D = 10^{16} \text{ м}^{-2}$ (рис. 5, а) та при $D = 1$ зна, $\rho_D = 10^{14} \text{ м}^{-2}$, і різних значеннях швидкостей продукування ТД $K_0 = 10^{-4}$ зна/с, $K_0 = 10^{-5}$ зна/с, $K_0 = 10^{-6}$ зна/с, $K_0 = 10^{-7}$ зна/с (рис. 5, б). Приведені залежності вказують, що на всьому обраному температурному інтервалі $265 < T < 350^\circ\text{C}$ спостерігається поверхневе збагачення атомів Cr ($\Delta C_{Cr} > 0$). Зі збільшенням температури T та фіксованих інших параметрах (D , K_0 , ρ_D) в залежності $\Delta C_{Cr}(T)$ спостерігається зростання ΔC_{Cr} , яке досягає максимального значення та потім суттєво спадає (див. рис. 5). Такий характер залежності $\Delta C_{Cr}(T)$ пов'язують з конкуренцією двох механізмів [1]: (i) відносно високою рекомбінацією ТД при низьких температурах та (ii) зростанням ролі зворотної дифузії при збільшенні T . Температура $T_{\Delta C}^{\max}$,

при якій спостерігається максимальне значення поверхневого збагачення атомів Cr $\Delta C_{Cr}(T)$ та й саме максимальне значення збагачення $\Delta C_{Cr}^{\max}$ зменшуються як зі збільшенням густини дислокацій ρ_D (рис. 5, а) так і зі зменшенням швидкості продукування ТД K_0 (рис. 5, б). Наприклад (див. рис. 5, а), для $K_0 = 10^{-5}$ зна/с при $\rho_D = 0$:

$T_{\Delta C}^{\max} = 377,23^\circ\text{C}$,	$\Delta C_{Cr}^{\max} = 0,84$ ат.%,	при $\rho_D = 10^{12} \text{ м}^{-2}$:
$T_{\Delta C}^{\max} = 377,82^\circ\text{C}$,	$\Delta C_{Cr}^{\max} = 0,77$ ат.%,	при $\rho_D = 10^{14} \text{ м}^{-2}$:
$T_{\Delta C}^{\max} = 341,18^\circ\text{C}$,	$\Delta C_{Cr}^{\max} = 0,46$ ат.%,	при $\rho_D = 10^{16} \text{ м}^{-2}$:
$T_{\Delta C}^{\max} = 305,49^\circ\text{C}$,	$\Delta C_{Cr}^{\max} = 0,19$ ат.%,	

На рисунку 6 наведено залежності $\Delta C_{Cr} = \Delta C_{Cr}(K_0)$ при зазначених значеннях ρ_D . Зі збільшенням швидкості продукування ТД K_0 в залежностях $\Delta C_{Cr}(K_0)$ спостерігається суттєве зростання ΔC_{Cr} , яке виходить на плато та потім поступово спадає. При відносно низьких

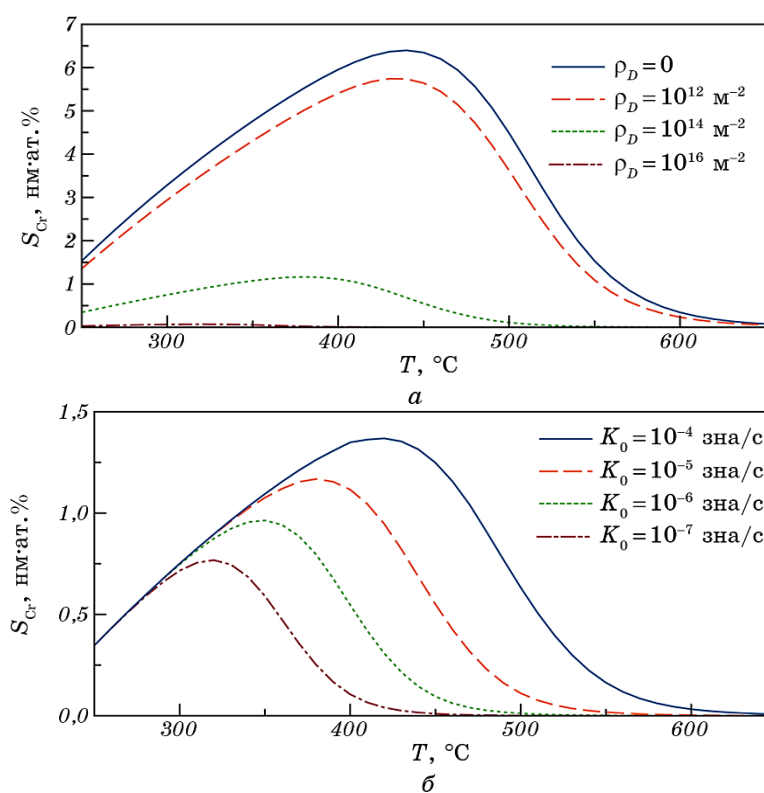


Рис. 8. Залежності сегрегаційної площі Cr від температури при різних значеннях густин дислокацій (а) та швидкостей продукування радіаційних ТД (б).

Fig. 8. Segregation area of Cr as a function of temperature at different values of dislocation densities (a) and production rates of PD (b).

значеннях K_0 зростання $\Delta C_{Cr} = \Delta C_{Cr}(K_0)$ пов'язане зі збільшенням концентрації нерівноважних ТД. Натомість, подальше збільшення концентрації ТД зі збільшенням K_0 супроводжується збільшенням коефіцієнту рекомбінації ТД та швидкості поглинання ТД дислокаційною підсистемою (для $\rho_D \neq 0$), що призводить до виникнення плато в залежностях $\Delta C_{Cr} = \Delta C_{Cr}(K_0)$ та поступового зменшення ΔC_{Cr} .

На рисунку 7 зображено концентраційні профілі ТД (вакансій $C_v = C_v(x)$ та міжвузельних атомів $C_i = C_i(x)$) при обраних вище значеннях густин дислокацій ρ_D . Оскільки дислокації є природним стоком ТД [23], зі збільшенням значення ρ_D зменшуються концентрації вакансій (рис. 7, а) та міжвузельних атомів (рис. 7, б), що призводить до зменшення дифузійних потоків атомів Cr та Fe, які

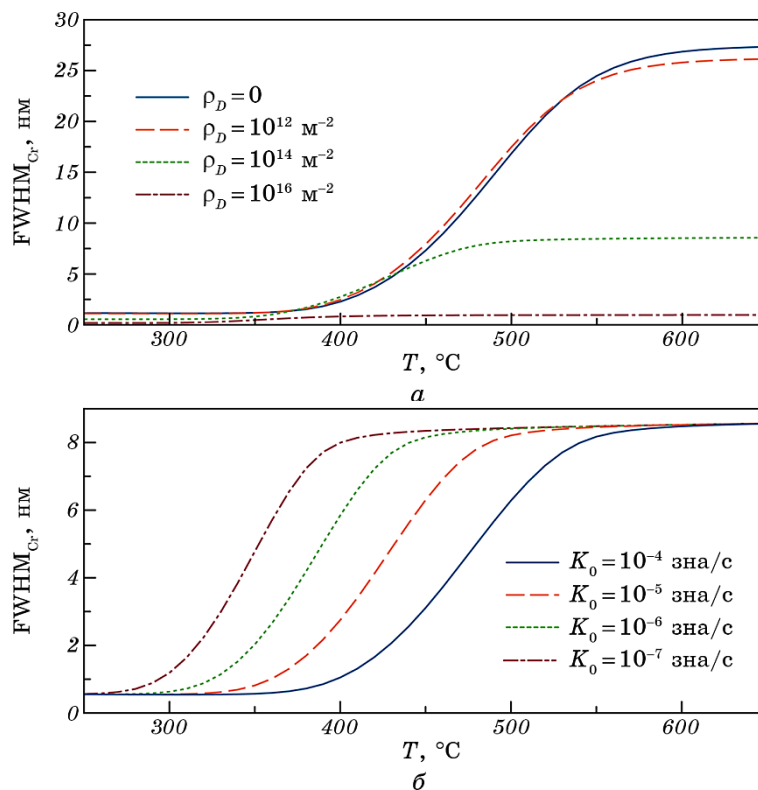


Рис. 9. Залежності повної ширини концентраційного профілю атомів Cr на рівні половини максимального збагачення від температури при різних значеннях густин дислокацій (а) та швидкостей продукування радіаційних ТД (б).

Fig. 9. Full width of the concentration profile of Cr atoms at half maximum enrichment as a function of temperature at different values of dislocation densities (а) and production rates of PD (б).

пов'язані з дифузійними потоками ТД. Внаслідок цього величини поверхневої концентрації атомів Cr $C_{Cr}(+0)$ (рис. 2, *a*) та поверхневого збагачення атомів Cr ΔC_{Cr} (рис. 4, 5, *a*) зменшуються. Як впливає з рис. 7, при значенні густини дислокацій, наприклад, $\rho_D = 10^{14} \text{ м}^{-2}$ максимальні значення концентрацій ТД дорівнюють: $C_v = 3,19 \cdot 10^{-9}$ молярних долей, $C_i = 1,09 \cdot 10^{-10}$ молярних долей. В той же час при тому ж самому значенні ρ_D і аналогічних умовах опромінення максимальне значення концентрації атомів Cr складає $C_{Cr} = 0,919 \cdot 10^{-1}$ молярних долей (на 8–9 порядків вище концентрацій ТД), тобто умова (1) свідомо виконується.

Залежності $S_{Cr} = S_{Cr}(T)$, які розраховані при $D = 1$ зна, $T = 300^\circ\text{C}$, $K_0 = 10^{-5}$ зна/с і різних значеннях густин дислокацій $\rho_D = 0$, $\rho_D = 10^{12} \text{ м}^{-2}$, $\rho_D = 10^{14} \text{ м}^{-2}$, $\rho_D = 10^{16} \text{ м}^{-2}$ представлені на рис. 8, *a*. Також самі залежності $S_{Cr} = S_{Cr}(T)$ при $D = 1$ зна, $T = 300^\circ\text{C}$, $\rho_D = 10^{14} \text{ м}^{-2}$, і різних значеннях швидкостей продукування ТД $K_0 = 10^{-4}$ зна/с, $K_0 = 10^{-5}$ зна/с, $K_0 = 10^{-6}$ зна/с, $K_0 = 10^{-7}$ зна/с наведені на рис. 8, *б*. Величини сегрегаційних площ Cr $S_{Cr}(T)$ досягають максимальних значень при більш високих температурах $T_s^{\max}$ в порівнянні з температурами $T_{\Delta C}^{\max}$ (див. вище) за одних і тих же значеннях ρ_D та K_0 .

В рамках даного дослідження також були одержані залежності $\text{FWHM}_{Cr} = \text{FWHM}_{Cr}(T)$ при різних значеннях густин дислокацій ρ_D (див. рис. 9, *a*) та швидкостей продукування радіаційних ТД K_0 (див. рис. 9, *б*). Зазначимо, що для обраного температурного проміжку ($250 < T < 650^\circ\text{C}$) спостерігається зростання $\text{FWHM}_{Cr}(T)$ при фіксованих значеннях ρ_D і K_0 . Для стопу Fe–9 ат. % Cr для всього дослідженого в даній роботі температурного проміжку $250 < T < 650^\circ\text{C}$ дискримінант РІС атомів Cr $\mathcal{D}_{Cr}$ менше нуля ($\mathcal{D}_{Cr} < 0$), що вказує на поверхневе збагачення атомів Cr ($\Delta C_{Cr} > 0$) в стаціонарному режимі РІС. Відмітимо, що одержані залежності поверхневого збагачення атомів Cr $\Delta C_{Cr}(T)$, які розраховані в стаціонарному режимі РІС (див. суцільну та штрихову криві на рис. 5, *a*) узгоджуються зі знаком дискримінанта РІС $\mathcal{D}_{Cr}$.

5. ВИСНОВКИ

Таким чином, в роботі проведено моделювання РІС в стопі Fe–9 ат. % Cr при різних значеннях густин дислокацій в дислокаційній підсистемі стопу ($\rho_D = 0$, $\rho_D = 10^{12} \text{ м}^{-2}$, $\rho_D = 10^{14} \text{ м}^{-2}$, $\rho_D = 10^{16} \text{ м}^{-2}$), на основі загальноприйнятого моделю РІС [1, 14, 24–26]. Для двокомпонентних стопів Fe–Cr сформульовані визначальні кількісні характеристики РІС. Розраховані та наведені наступні визначальні характеристики РІС: концентраційні профілі атомів Cr $C_{Cr} = C_{Cr}(x)$ (рис. 2, 3) та ТД (вакансій $C_v = C_v(x)$ і міжвузельних атомів $C_i = C_i(x)$) (рис. 7), поверхнева концентрація атомів Cr $C_{Cr}(+0)$ (рис. 2), поверхневе збагачення атомів Cr $\Delta C_{Cr} = \Delta C_{Cr}(D)$ (рис. 4), $\Delta C_{Cr} = \Delta C_{Cr}(T)$ (рис.

5) і $\Delta C_{Cr} = \Delta C_{Cr}(K_0)$ (рис. 6), сегрегаційна площа Cr $S_{Cr} = S_{Cr}(T)$ (рис. 8) та повна ширина концентраційного профілю атомів Cr на рівні половини максимального збагачення $FWHM_{Cr} = FWHM_{Cr}(T)$ (рис. 9). Зазначимо, що для досліджуваних в роботі інтервалів температур $250 < T < 650^\circ\text{C}$, швидкостей продукування точкових дефектів $10^{-8} < K_0 < 10^{-2}$ зна/с та доз опромінення $10^{-4} < D < 10^2$ зна спостерігається саме поверхнєве збагачення, а не збіднення атомів Cr ($\Delta C_{Cr} > 0$). Показано, що за однакових умов опромінення зі збільшенням густини дислокацій зменшуються концентрації ТД та величини $C_{Cr}(+0)$, ΔC_{Cr} , S_{Cr} . Пояснення цього полягає в тому, що дислокаційна підсистема, яка є ефективним стоком ТД, поглинає нерівноважні ТД і зменшує потоки ТД та пов'язані з ними потоки компонентів стопу, в наслідок чого ефекти РІС слабшають. Розрахунки показують, що зі збільшенням значення ρ_D збільшується доза, при якій спостерігається вихід на стаціонарний режим РІС. В стаціонарному режимі РІС знак поверхнєвого збагачення атомів Cr ($\Delta C_{Cr} > 0$) відповідає знаку дискримінанту РІС ($\mathcal{D}_{Cr} < 0$).

Автори висловлюють щире подяку д.ф.-м.н. А. А. Туркіну, який люб'язно прочитав текст статті, за корисне обговорення даної роботи. Автори також дуже вдячні рецензенту статті за цінні критичні зауваження. Робота виконана в рамках цільової програми наукових досліджень НАН України «Ядерні та радіаційні технології для енергетичного сектору і суспільних потреб» на 2019–2023 рр.

ЦИТОВАНА ЛІТЕРАТУРА

1. G. S. Was, *Fundamentals of Radiation Materials Science. Metals and Alloys*. 2nd Ed. (New York: Springer: 2017).
2. A. Aitkaliyeva, L. He, H. Wen, B. Miller, X. M. Bai, and T. Allen, *Structural Materials for Generation IV Nuclear Reactors* (Ed. P. Yvon) (Amsterdam: Elsevier: 2017), p. 253.
3. S. J. Zinkle, H. Tanigawa and B. D. Wirth, *Structural Alloys for Nuclear Energy Applications* (Eds. G. R. Odette and S. J. Zinkle) (Amsterdam: Elsevier: 2019), p. 163.
4. G. S. Was and S. Ukai, *Structural Alloys for Nuclear Energy Applications* (Eds. G. R. Odette and S. J. Zinkle) (Amsterdam: Elsevier: 2019), p. 293.
5. В. Н. Воеводин, И. М. Неклюдов, *Эволюция структурно-фазового состояния и радиационная стойкость конструкционных материалов* (Київ: Наукова думка: 2006).
6. В. Н. Воеводин, И. М. Неклюдов, «Вісник Харківського національного університету». Серія фізична «Ядра, частинки, поля», **746**, вип. 4 (32): 3 (2006).
7. А. Гриценко, В. Демехин, В. Илькович, В. Буканов, Е. Васильева, *Ядерная радиационная безопасность*, **50**: 29 (2011).
8. J. P. Wharry and G. S. Was, *J. Nucl. Mater.*, **442**: 7 (2013).
9. C. Zheng and D. Kaoumi, *Mater. Charact.*, **134**: 152 (2017).

10. C. Zheng, M. A. Auger, M. P. Moody, and D. Kaoumi, *J. Nucl. Mater.*, **491**: 162 (2017).
11. H.-H. Jin, S. S. Hwang, M. J. Choi, G.-G. Lee, and J. Kwon, *J. Nucl. Mater.*, **513**: 271 (2019).
12. X. Liu, J. G. Gigax, J. D. Poplawsky, W. Guo, H. Kim, L. Shao, F. A. Garner, and J. F. Stubbins, *Materialia*, No. 9: 100542 (2020).
13. B. D. Wirth, G. R. Odette, J. Marian, L. Ventelon, J. A. Young-Vandersall, and L. A. Zepeda-Ruiz, *J. Nucl. Mater.*, **329–333 (Part A)**: 103 (2004).
14. A. J. Ardell and P. Bellon, *Current Opinion in Solid State and Materials Science*, **20**, No. 3: 115 (2016).
15. Я. И. Френкель, *Введение в теорию металлов* (Ленинград: Наука: 1972).
16. А. М. Косевич, *Физическая механика реальных кристаллов* (Киев: Наукова Думка: 1981).
17. С. А. Котречко, Ю. Я. Мешков, *Предельная прочность. Кристаллы, металлы, конструкции* (Киев: Наукова Думка: 2008).
18. A. S. Bakai, O. V. Borodin, V. V. Bryk, V. N. Voyevodin, V. F. Zelenskij, I. M. Neklyudov, P. V. Platonov, and A. A. Turkin, *J. Nucl. Mater.*, **185**: 260 (1991).
19. А. С. Бакай, А. А. Туркин, *Радиационно-индуцированная модификация фазовой диаграммы бинарного сплава* (Москва: ЦНИИАтоминформ: 1988).
20. А. А. Туркин, А. С. Бакай, *Вопросы атомной науки и техники*, Вып. 4 (89): 47 (2006).
21. А. А. Туркин, *Проблемы теоретической и математической физики. Научные труды*, Вып. 3 (Ред. А. Г. Загородний, Н. Ф. Шульга, В. В. Яновский) (Харьков: ХНУ имени В. Н. Каразина: 2019), с. 58.
22. А. А. Туркин, *Теорія фазових перетворень у неупорядкованих сплавах заміщення під опроміненням* (Дис. ... докт. фіз.-мат. наук) (Харків: 2010).
23. R. Bullough and R. C. Newman, *Rep. Prog. Phys.*, **33**, No. 1: 101 (1970).
24. H. Wiedersich, P. R. Okamoto, and N. Q. Lam, *J. Nucl. Mater.*, **83**: 98 (1979).
25. J. P. Wharry, Z. Jiao, and G. S. Was, *J. Nucl. Mater.*, **425**: 117 (2012).
26. J. P. Wharry and G. S. Was, *Acta Mater.*, **65**: 42 (2014).
27. R. V. Skorokhod, O. M. Buhay, V. M. Bilyk, V. L. Denysenko, and O. V. Koropov, *Східно-європейський фізичний журнал*, **5**, № 1: 61 (2018).
28. О. В. Коропов, Р. В. Скороход, *IX Міжнародна науково-практична конференція «Математика в сучасному технічному університеті» (28–29 грудня 2020, Київ)* (Вінниця: ФОП Ю. В. Кушнір: 2021), с. 80.
29. О. В. Коропов, *18 Міжнародна наукова конференція ім. академіка Михайла Кравчука (7–10 жовтня 2017)* (Київ: НТУУ «КПІ»: 2017), т. 1, с. 86.
30. О. В. Коропов, *17 Міжнародна наукова конференція ім. академіка Михайла Кравчука (19–20 травня 2016)* (Київ: НТУУ «КПІ»: 2016), т. 1, с. 161.
31. F. Soisson, *J. Nucl. Mater.*, **349**: 235 (2006).
32. K. G. Field, L. M. Barnard, C. M. Parish, J. T. Busby, D. Morgan, and T. R. Allen, *J. Nucl. Mater.*, **435**: 172 (2013).
33. D. S. Gelles, *J. Nucl. Mater.*, **108–109**: 515 (1982).
34. S. I. Porollo, A. M. Dvoriashin, A. N. Vorobyev, and Yu. V. Konobeev, *J. Nucl. Mater.*, **256**: 247 (1998).
35. Yu. V. Konobeev, A. M. Dvoriashin, S. I. Porollo, and F. A. Garner, *J. Nucl. Mater.*, **355**: 124 (2006).
36. W.-Y. Chen, Y. Miao, J. Gan, M. A. Okuniewski, S. A. Maloy, and J. F. Stubbins, *Acta Mater.*, **111**: 407 (2016).

37. S. Choudhury, L. Barnard, J. D. Tucker, T. R. Allen, B. D. Wirth, M. Asta, and D. Morgan, *J. Nucl. Mater.*, **411**: 1 (2011).
38. C.-C. Fu, J. Dalla Torre, F. Willaime, J.-L. Bocquet, and A. Barbu, *Nat. Mater.*, **4**: 68 (2005).
39. K. Vörtler, M. Mamivand, L. Barnard, I. Szlufarska, F. A. Garner, and D. Morgan, *J. Nucl. Mater.*, **479**: 23 (2016).
40. P. Olsson, C. Domain, and J. Wallenius, *Phys. Rev. B*, **75**: 014110 (2007).
41. H.-E. Schaefer, K. Maier, M. Weller, D. Herlach, A. Seeger, and J. Diehl, *Scripta Metallurgica*, **11**: No. 9: 803 (1977).
42. T. R. Allen and G. S. Was, *Acta Mater.*, **46**, No. 10: 3679 (1998).
43. S. J. Zinkle and J. T. Busby, *Mater. Today*, **12**, No. 11: 12 (2009).
44. D. Buckthorpe, *Structural Materials for Generation IV Nuclear Reactors* (Ed. P. Yvon) (Amsterdam: Elsevier: 2017), p. 1.

REFERENCES

1. G. S. Was, *Fundamentals of Radiation Materials Science. Metals and Alloys*, 2nd Ed. (New York: Springer: 2017).
2. A. Aitkaliyeva, L. He, H. Wen, B. Miller, X. M. Bai, and T. Allen, *Structural Materials for Generation IV Nuclear Reactors* (Ed. P. Yvon) (Amsterdam: Elsevier: 2017), p. 253.
3. S. J. Zinkle, H. Tanigawa and B. D. Wirth, *Structural Alloys for Nuclear Energy Applications* (Eds. G. R. Odette and S. J. Zinkle) (Amsterdam: Elsevier: 2019), p. 163.
4. G. S. Was and S. Ukai, *Structural Alloys for Nuclear Energy Applications* (Eds. G. R. Odette and S. J. Zinkle) (Amsterdam: Elsevier: 2019), p. 293.
5. V. N. Voevodin and I. M. Neklyudov, *Evolutsiya Strukturno-Fazovogo Sostoyaniya i Radiatsionnaya Stoykost' Konstruktsionnykh Materialov* [The Evolution of the Structural Phase State and Radiation Resistance of Structural Materials] (Kyiv: Naukova Dumka: 2006) (in Russian).
6. V. N. Voevodin and I. M. Neklyudov, 'Visnyk Kharkivs'koho Natsional'noho Universytetu'. Seriya Fizychna 'Yadra, Chastynky, Polya', **746**, Iss. 4 (32): 3 (2006) (in Russian).
7. A. Gritsenko, V. Demekhin, V. Il'kovich, V. Bukanov, and E. Vasil'eva, *Yaderna ta Radiatsiyina Bezpeka*, **50**: 29 (2011) (in Russian).
8. J. P. Wharry and G. S. Was, *J. Nucl. Mater.*, **442**: 7 (2013).
9. C. Zheng and D. Kaoumi, *Mater. Charact.*, **134**: 152 (2017).
10. C. Zheng, M. A. Auger, M. P. Moody, and D. Kaoumi, *J. Nucl. Mater.*, **491**: 162 (2017).
11. H.-H. Jin, S. S. Hwang, M. J. Choi, G.-G. Lee, and J. Kwon, *J. Nucl. Mater.*, **513**: 271 (2019).
12. X. Liu, J. G. Gigax, J. D. Poplawsky, W. Guo, H. Kim, L. Shao, F. A. Garner, and J. F. Stubbins, *Materialia*, No. 9: 100542 (2020).
13. B. D. Wirth, G. R. Odette, J. Marian, L. Ventelon, J. A. Young-Vandersall, and L. A. Zepeda-Ruiz, *J. Nucl. Mater.*, **329–333 (Part A)**: 103 (2004).
14. A. J. Ardell and P. Bellon, *Current Opinion in Solid State and Materials Science*, **20**, No. 3: 115 (2016).

15. Ya. I. Frenkel', *Vvedenie v Teoriyu Metallov* [Introduction to the Theory of Metals] (Leningrad: Nauka: 1972) (in Russian).
16. A. M. Kosevich, *Fizicheskaya Mekhanika Real'nykh Kristallov* [Physical Mechanics of Real Crystals] (Kyiv: Naukova Dumka: 1981) (in Russian).
17. S. A. Kotrechko and Yu. Ya. Meshkov, *Predel'naya Prochnost'. Kristally, Metally, Konstruktsii* [Strength of Crystals, Metals, and Structures] (Kyiv: Naukova Dumka: 2008) (in Russian).
18. A. S. Bakai, O. V. Borodin, V. V. Bryk, V. N. Voyevodin, V. F. Zelenskij, I. M. Neklyudov, P. V. Platonov, and A. A. Turkin, *J. Nucl. Mater.*, **185**: 260 (1991).
19. A. S. Bakay and A. A. Turkin, *Radiatsionno-Indutsirovannaya Modifikatsiya Fazovoy Diagrammy Binarnogo Splava* [Radiation-Induced Modification of the Phase Diagram of a Binary Alloy] (Moscow: TsNIIatominform: 1988) (in Russian).
20. A. A. Turkin and A. S. Bakay, *Voprosy Atomnoy Nauki i Tekhniki*, Iss. 4 (89): 47 (2006) (in Russian).
21. A. A. Turkin, *Problemy Teoreticheskoy i Matematicheskoy Fiziki. Nauchnye Trudy, Vyp. 3* [Problems of Theoretical and Mathematical Physics. Scientific Works, Vol. 3] (Eds. A. G. Zagorodniy, N. F. Shul'ga, and V. V. Yanovskiy) (Kharkiv: KhNU imeni V. N. Karazina: 2019), p. 58 (in Russian).
22. A. A. Turkyn, *Teoriya Fazovykh Peretvoren' u Neuporyadkovanykh Splavakh Zamishchennya pid Oprominennyam* [Theory of Phase Transformations in Disordered Substitutional Alloys under Irradiation] (Dis. ... Dr. Sci. (Phys.-Math.)) (Kharkiv: 2010) (in Ukrainian).
23. R. Bullough and R. C. Newman, *Rep. Prog. Phys.*, **33**, No. 1: 101 (1970).
24. H. Wiedersich, P. R. Okamoto, and N. Q. Lam, *J. Nucl. Mater.*, **83**: 98 (1979).
25. J. P. Wharry, Z. Jiao, and G. S. Was, *J. Nucl. Mater.*, **425**: 117 (2012).
26. J. P. Wharry and G. S. Was, *Acta Mater.*, **65**: 42 (2014).
27. R. V. Skorokhod, O. M. Buhay, V. M. Bilyk, V. L. Denysenko, and O. V. Koropov, *Skhidno-Yevropeys'kyi Fizychnyy Zhurnal*, **5**, No. 1: 61 (2018).
28. O. V. Koropov and R. V. Skorokhod, *IX International Scientific-Practical Conference 'Mathematics in Modern Technical University' (Dec. 28–29, 2020, Kyiv)* (Vinnytsia: FOP Yu. V. Kushnir: 2021), p. 80 (in Ukrainian).
29. O. V. Koropov, *18th International Scientific Mykhailo Kravchuk Conference (Oct. 7–10, 2017)* (Kyiv: NTUU «KPI»: 2017), vol. 1, p. 86 (in Ukrainian).
30. O. V. Koropov, *17th International Scientific Mykhailo Kravchuk Conference (May 19–20, 2016)* (Kyiv: NTUU «KPI»: 2016), vol. 1, p. 161 (in Ukrainian).
31. F. Soisson, *J. Nucl. Mater.*, **349**: 235 (2006).
32. K. G. Field, L. M. Barnard, C. M. Parish, J. T. Busby, D. Morgan, and T. R. Allen, *J. Nucl. Mater.*, **435**: 172 (2013).
33. D. S. Gelles, *J. Nucl. Mater.*, **108–109**: 515 (1982).
34. S. I. Porollo, A. M. Dvoriashin, A. N. Vorobyev, and Yu. V. Konobeev, *J. Nucl. Mater.*, **256**: 247 (1998).
35. Yu. V. Konobeev, A. M. Dvoriashin, S. I. Porollo, and F. A. Garner, *J. Nucl. Mater.*, **355**: 124 (2006).
36. W.-Y. Chen, Y. Miao, J. Gan, M. A. Okuniewski, S. A. Maloy, and J. F. Stubbins, *Acta Mater.*, **111**: 407 (2016).
37. S. Choudhury, L. Barnard, J. D. Tucker, T. R. Allen, B. D. Wirth, M. Asta, and D. Morgan, *J. Nucl. Mater.*, **411**: 1 (2011).

- 38. C.-C. Fu, J. Dalla Torre, F. Willaime, J.-L. Bocquet, and A. Barbu, *Nat. Mater.*, **4**: 68 (2005).
- 39. K. Vörtler, M. Mamivand, L. Barnard, I. Szlufarska, F. A. Garner, and D. Morgan, *J. Nucl. Mater.*, **479**: 23 (2016).
- 40. P. Olsson, C. Domain, and J. Wallenius, *Phys. Rev. B*, **75**: 014110 (2007).
- 41. H.-E. Schaefer, K. Maier, M. Weller, D. Herlach, A. Seeger, and J. Diehl, *Scripta Metallurgica*, **11**: No. 9: 803 (1977).
- 42. T. R. Allen and G. S. Was, *Acta Mater.*, **46**, No. 10: 3679 (1998).
- 43. S. J. Zinkle and J. T. Busby, *Mater. Today*, **12**, No. 11: 12 (2009).
- 44. D. Buckthorpe, *Structural Materials for Generation IV Nuclear Reactors* (Ed. P. Yvon) (Amsterdam: Elsevier: 2017), p. 1.

PACS numbers: 61.05.C-, 61.66.Fn, 81.05.uf, 81.16.Pr, 81.20.Ev

Effect of TEG on Oxidation of TiC–ZrC Equimolar Blend at Mechanical Alloying

T. G. Avramenko, A. M. Kuryliuk, O. I. Nakonechna, and N. N. Belyavina

*Taras Shevchenko National University of Kyiv,
60 Volodymyrska Str.,
UA-01033 Kyiv, Ukraine*

A detailed x-ray diffraction study of TiC–ZrC equimolar blend at mechanical alloying in a planetary ball mill is provided. An essential oxidation of carbide components is established. As found, Oxygen from the charge and reaction zone of the mill promotes gradual decomposition of ZrC with the formation of cubic c-ZrO₂, which further transforms into its monoclinic modification m-ZrO₂. TiC accumulates the Oxygen in tetrahedral voids of its crystal lattice, forming Ti_xCO_y oxycarbide. Addition of 3% vol. TEG powder to the initial TiC–ZrC charge completely inhibits the oxidation.

Key words: mechanical alloying, thermoexfoliated graphite, carbide, crystal structure, x-ray diffraction.

Проведено детальне рентгеноструктурне дослідження продуктів механо-хімічного оброблення в планетарному млині двох еквімолярних сумішей TiC–ZrC та TiC–ZrC + 3% об. ТРГ, в результаті якого показано, що карбідні компоненти еквімолярної TiC–ZrC суміші виявляють схильність до їх суттєвого окиснення. При цьому наявний в шихті та реакційній зоні млина кисень сприяє поступовому розпаду карбіду цирконію ZrC з утворенням стабілізованої вуглецем кубічної модифікації оксиду цирконію c-ZrO₂, яка з часом трансформується в його моноклінну модифікацію m-ZrO₂, а карбід TiC накопичує Оксиген в тетраедричних порах його кристалічної ґратниці з утворенням оксикарбіду Ti_xCO_y. Додаток 3% об. порошку терморозширеного графіту (ТРГ) до вихідної суміші TiC–ZrC повністю перешкоджає процесу окиснення кожного з карбідів, а механохімічна активація сумішей

Corresponding author: Olesya Ivanivna Nakonechna
E-mail: les@univ.kiev.ua, olesya.nakonechna@knu.ua

Citation: T. G. Avramenko, A. M. Kuryliuk, O. I. Nakonechna, and N. N. Belyavina, Effect of TEG on Oxidation of TiC–ZrC Equimolar Blend at Mechanical Alloying, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, 44, No. 6: 713–724 (2022). DOI: [10.15407/mfint.44.06.0713](https://doi.org/10.15407/mfint.44.06.0713)

викликає вибивання атомів металу (скоріше, йонів Ti^{4+} та Zr^{4+}) до реакційної зони млина з утворенням структурних дефектів в ґратницях карбідів, що створює передумови для подальшого формування взаємних твердих розчинів заміщення $Zr_{1-x}Ti_xC$. Одержана в роботі МХ активована дрібнодисперсна (розмір кристалітів до 20 нм) суміш $TiC-ZrC + 3\%$ об. ТРГ може бути рекомендована як ефективний наповнювач для створення консолідованих нанокристалічних керамік на базі TiB_2 та інших боридів.

Ключові слова: механохімічний синтез, терморозширений графіт, карбід, кристалічна структура, рентгенівська дифракція.

(Received February 4, 2022; in final version, May 19, 2022)

1. INTRODUCTION

TiB_2-TiC and TiB_2-ZrC ceramic composite materials are known to have high hardness, good wear resistance, high fracture toughness and corrosion resistance [1–5]. However, since it is very difficult to compact these materials by conventional sintering, to synthesize TiB_2-TiC and TiB_2-ZrC composites the method of reaction sintering of powder charge of B_4C , pure Ti and Zr metals at temperatures above $1500^\circ C$ is applied.

Problems related to complicated compaction of ceramics at direct sintering of TiB_2 and TiC powders were eliminated by applying mechanical treatment of the initial charge in a high-energy planetary mill at the first technological stage. As a result of such processing for 30 hours the crystallite size of phase components decreased to 15 nm and the composite sintered at $1500-2100^\circ C$ from the processed powder demonstrated quite good characteristics [6].

High mechanical properties of TiB_2-TiC composite materials (relative density is above 98%, hardness of 94.7 HRA, tensile strength of 487–776 MPa, fracture toughness is up to $7 \text{ MPa}\cdot\text{m}^{1/2}$ [7]) and TiB_2-ZrC [5], as well as the possibility of their direct synthesis from ultrafine powders of components [6] prompted us to provide mechanical processing of equimolar mixture of $TiC-ZrC$ carbides. Milled charge will be used as precursor for further synthesis of $TiB_2-TiC-ZrC$ ceramic nanocomposite material.

2. MATERIALS AND METHODS

The charge of raw carbide powders (Table 1) was sealed in ZrO_2 vial and subjected to cyclic processing (10 min of processing and 2 min of cooling) in BM 6 Pro planetary ball mill. Eleven ZrO_2 balls (15 mm in diameter) were used for the processing of the charge; the mass ratio of the balls to powder was 10:1. During experiment the temperature of the

TABLE 1. Materials studied.

Experiment	TiC (CBC grade, 99.9% wt. purity)		ZrC ('Y' grade, 99.9% wt. purity)		Thermoexfoliated graphite (TEG)	
	% wt.	% vol.	% wt.	% vol.	% wt.	% vol.
1	36.7	43.9	63.3	56.1	—	—
2	36.7	43.9	63.3	56.1	3.7	3.0

working area in the reaction zone did not exceed 70°C, the rotation speed of the vial was 500 rpm.

Phase transformations taking place at mechanical alloying have been studied by x-ray diffraction methods on the test samples selected after each complete hour of milling. XRD data was collected with DRON-3M automatic diffractometers (CuK_α radiation) in a discrete mode under the following scanning parameters: observation range $2\theta = (20-100)^\circ$, step scan was 0.05° and counting time per step was 3 s. Sample was rotating in the plane of the cuvette attachment during measurements. The original software package [8], including full complex of standard Rietveld procedures, has been used for analysis and interpretation of the x-ray diffraction patterns obtained, namely, determination of both peak positions and integral intensities of the Bragg reflections by means of full profile analysis; carrying out qualitative and quantitative phase analysis using PDF data for phase identification and the least square method for lattice parameters refinement; testing of the structure models and refining crystal structure parameters (including coordinates of atoms, atomic position filling, texture, *etc.*); calculation of the parameters of the real structure of the individual phases (coherent block sizes and lattice strain values).

3. EXPERIMENTAL RESULTS

3.1. Experiment 1. Mechanical Alloying of TiC–ZrC Equimolar Blend

The results of x-ray phase analysis indicate that with increasing of milling time, the phase composition of the equimolar blend studied gradually changes. Therefore, the presence of the c-ZrO₂ cubic oxide phase was detected on diffraction patterns of 2 hours milled test samples, in addition to the phases of the charge components (Fig. 1). Besides, the quantity of this phase is gradually increasing with milling time increasing. Advanced phase analysis (Table 2) has revealed that the apparent balance of phase content is somewhat disturbed, namely, the weight ratio of phases containing Titanium (TiC) and Zirconium (ZrC and c-ZrO₂) does not correspond to the charge composition. A detailed study of the

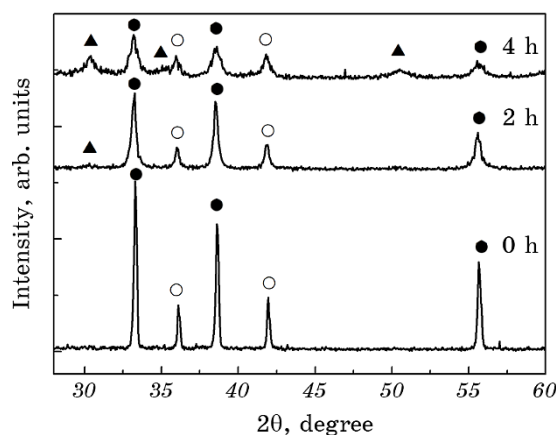


Fig. 1. Diffraction patterns of test samples of mechanically alloyed TiC–ZrC equimolar blend. Phases are marked as: ●—ZrC; ○—TiC, ▲—c-ZrO₂.

final test sample (4 h of milling) has revealed that it contains the low-temperature monoclinic modification of zirconium oxide m-ZrO₂ in addition to the mentioned TiC, ZrC and c-ZrO₂ phases. Taking this into consideration, the quantitative phase content becomes completely balanced (Table 2).

According to the data of Ref. [9], at certain conditions the oxygen atoms presented in charge can diffuse into ZrC grains with the formation of a layer of carbon-stabilized c-ZrO₂ phase. In our experiment, the lattice parameter of the milled charge is $a = 0.5125(2)$ nm. As the oxidation process develops, c-ZrO₂ transforms into its monoclinic modification m-ZrO₂, which exists in a fine crystal state. It is this process takes place at oxidation of ZrC carbide during mechanical alloying of TiC–ZrC blend. Herein, the presence of x-ray amorphous m-ZrO₂ phase in milled samples causes a certain discrepancy in the quantitative content of the test samples studied (Table 2).

The lattice parameters of both carbides are changed with processing time increasing (Fig. 2). To clarify the nature of these changes we provided a detailed x-ray diffraction study of the crystal structure of ZrC and TiC phases milled.

It is known that in the crystal structure of monocarbides of stoichiometric composition (NaCl type) atoms of metal components (Zirconium or Titanium) and Carbon are arranged in the regular systems of points of $Fm\bar{3}m$ space group as follows: four atoms of Ti or Zr are placed in $4(a) 0 0 0$; four atoms of C are placed in $4(b) 0.5 0.5 0.5$. Therefore, the occupation density of $4(a)$ position by metal atoms was refined in the first turn and possible arrangement of Oxygen atoms at formation of Zirconium or Titanium oxycarbides was simulated. As a result, it was obtained that the imperfection of the crystal lattice of carbides gradually increases with

TABLE 2. Phase composition of mechanically alloyed blends.

Milling time t , h,	Experiment 1. TiC–ZrC			Experiment 2. TiC–ZrC + 3% vol. TEG		
	Phase composition ¹⁾	Lattice parameter a , nm		Phase composition ¹⁾	Lattice parameter a , nm	
		ZrC	TiC		ZrC	TiC
0	ZrC (63) + + TiC (37)	0.46826(4)	0.43262(3)	ZrC (63) + + TiC (37) + + C _{gr}	0.46826(4)	0.43262(3)
1	ZrC (63) + + TiC (37)	0.46814(6)	0.43246(9)	ZrC (63) + + TiC (37)	0.4682(1)	0.4324(1)
2	ZrC (59) + + TiC (39) + + c-ZrO ₂ (1) + + m-ZrO ₂ (?)	0.46830(9)	0.43259(2)	ZrC (63) + + TiC (37)	0.4683(1)	0.4325(1)
3	ZrC (51) + + TiC (45) + c- ZrO ₂ (4) + m- + ZrO ₂ (?)	0.4682(2)	0.4328(1)	ZrC (62) + + TiC (38)	0.4682(2)	0.4326(2)
4	ZrC (39) + TiC (51) + c-ZrO ₂ (10) + m-ZrO ₂ (?) ²⁾	0.4681(1)	0.4331(4)	ZrC (60) + + TiC (39) + + c-ZrO ₂ (1) ³⁾	0.4681(1)	0.4327(1)

¹⁾ Phase composition on % vol.²⁾ Quantitative balance for all present phases: ZrC (32) + TiC (40) + c-ZrO₂ (12) + m-ZrO₂ (16).³⁾ Vial debris.

processing time, and the Oxygen presented in these lattices partially fills the tetrahedral voids of 8(c) 0.25 0.25 0.25 position. Accuracy of the calculations was controlled by the reliability factor R_B , which usually did not exceed 0.03 (Table 3). Figure 3 gives solid evidence of the decrease of metal component in the crystal lattices of carbides.

Analysis of the parameters of the real structure of carbides by the approximation method on (111) and (222) reflections (TiC and ZrC powders were used as standards) have shown that fine crystal state with the crystallite size D of about 30 nm is formed in test samples after 1 hour of milling. As milling time increases, the crystallite size of ZrC carbide continues to decrease down to 13 nm, while D_{TiC} is not changed (Table 4). There is no lattice strain (ϵ) in ZrC carbide milled, but its value changes slightly for TiC phase. Dislocation density ρ increases with processing time increasing for both carbides. It should be noted that it was impossible to define the parameters of TiC real structure in some cases due to

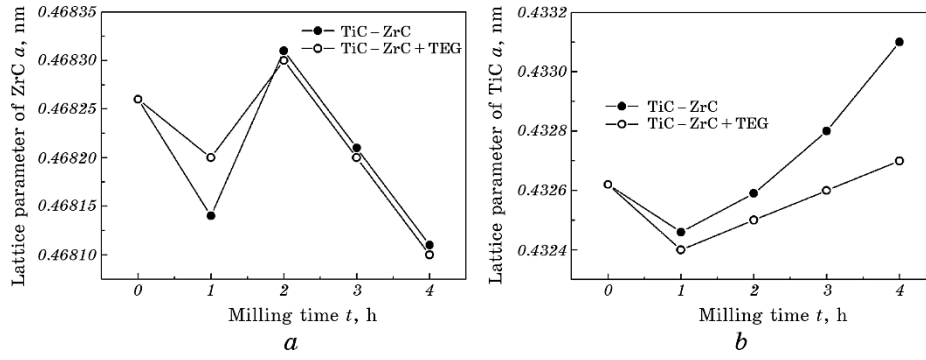


Fig. 2. Dependences of lattice parameters of ZrC (a) and TiC (b) on milling time.

the significant broadening of the diffraction peaks. Calculated parameters of the real structure of carbides milled are listed in Table 4 and presented in Fig. 4.

Thus, mechanical alloying of the TiC-ZrC equimolar blend is accompanied by an essential oxidation of charge. In subsequent experiment

TABLE 3. Crystal structure refinement for mechanically alloyed ZrC and TiC.

Milling time t , h	Experiment 1. TiC-ZrC					Experiment 2. TiC-ZrC + 3% vol. TEG				
	Compound	Phase content, at. %			R_B	Compound	Phase content, at. %			R_B
		Zr	C	O			Zr	C	O	
0	ZrC	50	50	—	0.018	ZrC	50	50	—	0.022
1	Zr _{0.89} C	47	53	—	0.026	Zr _{0.96} C	49	51	—	0.020
2	Zr _{0.82} C	45	55	—	0.029	Zr _{0.89} C	47	53	—	0.018
3	Zr _{0.78} CO _{0.04}	43	55	2	0.029	Zr _{0.82} C	45	55	—	0.034
4	Zr _{0.69} CO _{0.07}	41	59	4	0.031	Zr _{0.75} C	43	57	—	0.031
Milling time t , h	Experiment 1. TiC-ZrC					Experiment 2. TiC-ZrC + 3% vol. TEG				
	Compound	Phase content, at. %			R_B	Compound	Phase content, at. %			R_B
		Ti	C	O			Ti	C	O	
0	TiC	50	50	—	0.018	TiC	50	50	—	0.016
1	Ti _{0.92} C	48	52	—	0.026	Ti _{0.88} C	47	53	—	0.021
2	Ti _{0.78} C	44	56	—	0.029	Ti _{0.82} C	45	55	—	0.013
3	Ti _{0.75} CO _{0.13}	40	53	7	0.029	Ti _{0.85} C	46	54	—	0.024
4	Ti _{0.67} CO _{0.42}	32	48	20	0.016	Ti _{0.92} C	48	52	—	0.015

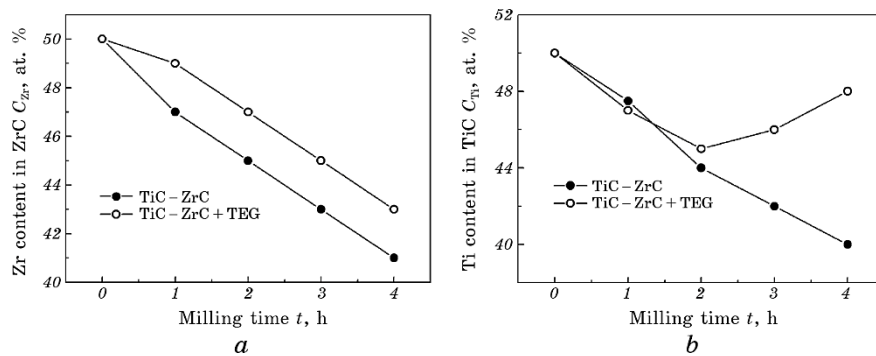


Fig. 3. Dependences of Zirconium (*a*) and Titanium (*b*) content in the metal lattice of ZrC and TiC on milling time.

3% vol. of thermoexfoliated graphite (TEG) was added to the initial charge in order to suppress oxidation.

3.2. Experiment 2. Mechanical Alloying of TiC–ZrC Equimolar Blend with Addition of 3% vol. TEG

Diffraction patterns of the test samples do not contain any additional phases (Fig. 5, Table 2). Dependences of the crystal lattice parameters of TiC and ZrC carbides on processing time are like those for charge milled without TEG (Fig. 2, Table 2). However, lattice parameters of TiC phase are slightly smaller.

Refinement of the crystal structure of TiC and ZrC carbides milled has revealed the absence of dissolved Oxygen and the decrease in filling of their metal sublattices by Titanium or Zirconium atoms (Table 3, Fig. 3). Besides, this value gradually decreases with the processing time for

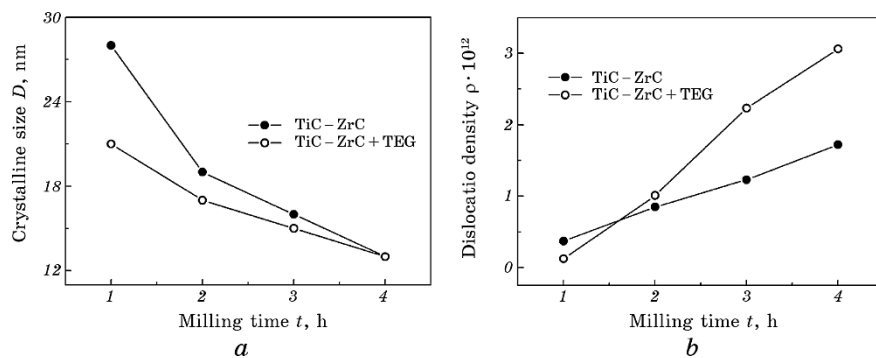


Fig. 4. Dependences of the crystallites size (*a*) and the density of dislocations (*b*) of ZrC carbide on milling time.

TABLE 4. Parameters of the real structure of mechanically alloyed ZrC and TiC.

Milling time t , h	Experiment 1. TiC–ZrC			Experiment 2. TiC–ZrC + 3% vol. TEG		
	Crystal- lite size D , nm	Lattice strain ε , %	Dislocation density ρ , E+12	Crystal- lite size D , nm	Lattice strain ε , %	Dislocation density ρ , E+12
ZrC						
0	>150	–	–	>150	–	–
1	28(4)	0.0	0.372(5)	21(3)	0.29(2)	0.154(6)
2	19(3)	0.0	0.849(4)	17(1)	0.31(2)	1.010(5)
3	16(1)	0.0	1.230(5)	15(2)	0.46(2)	2.230(8)
4	13(2)	0.0	1.720(7)	13(2)	0.52(4)	3.060(8)
TiC						
0	>150	–	–	>150	–	–
1	30(4)	0.08(1)	0.291(4)	19(2)	0.16(3)	0.557(6)
2	30(4)	0.30(2)	1.040(7)	19(9)	0.00	0.556(6)
3	24(2)	0.21(2)	?	20(3)	0.00	0.693(7)
4	?	?	?	20(3)	0.11(2)	0.758(7)

ZrC carbide, while for TiC phase it begins to increase after passing a certain minimum (Fig. 3).

Calculation of the real structure parameters of carbide phases shows that the nature of changes in the crystallite size and dislocations density of for both charges milled is the same (Fig. 4). However, ZrC crystal lattice just accumulates the internal stresses in the presence of TEG and isn't decomposed with the formation of oxycarbide phase (Table 4).

In general, the experiment on mechanical alloying of equimolar TiC–ZrC blend undoubtedly shows that the addition of 3% vol. of carbon in the form of TEG to the initial charge leads to complete inhibition of the oxidation.

4. DISCUSSION

Study of the kinetics of transformations of the carbide components of equimolar TiC–ZrC blend shows the tendency to oxidation of the powders milled (Table 2). Moreover, the oxidation of charge components is carried out in different ways. Oxygen presented in the charge and reaction zone of the mill promotes the gradual decomposition of ZrC with the formation of c-ZrO₂ carbon-stabilized cubic modification of zirconium oxide, which further transforms into its monoclinic modification m-ZrO₂. Generally, the transformation of ZrC takes place as:

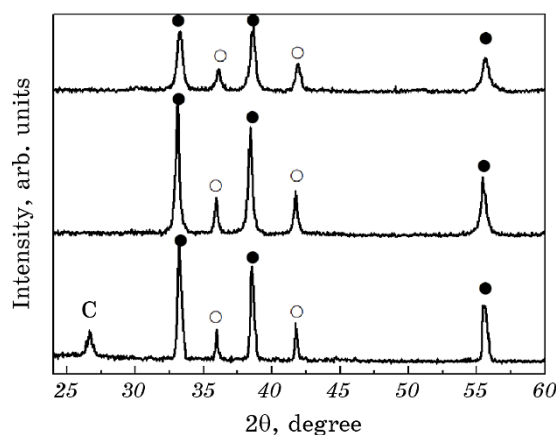
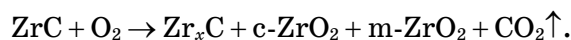
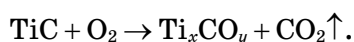


Fig. 5. Diffraction patterns of test samples of mechanically alloyed TiC–ZrC + 3% vol. TEG equimolar blend. Phases are marked as: ●—ZrC, ○—TiC, C—Graphite.



There is almost no solubility of Oxygen in the ZrC crystal lattice at mechanical alloying in contrast to the significant solubility of Oxygen in the tetrahedral voids of TiC lattice. Thus, the oxidation of TiC titanium carbide occurs according to the scheme:



Addition of about 3% vol. TEG powder to the initial TiC–ZrC equimolar blend completely inhibits the oxidation of the carbides. But the metal sublattices of both carbides are gradually depleted by Titanium or Zirconium atoms at mechanical alloying of both mixtures studied (TiC–ZrC and TiC–ZrC + TEG) (Table 3). At this, the clusters of these atoms, more properly, Ti^{4+} and Zr^{4+} ions, are saturated the reaction zone of planetary mill. This process dominates at the beginning of mechanical alloying (up to 1 hour of processing) and is accompanied by a decrease in the lattice parameters of both carbides (Fig. 2).

The dynamics of further changes in the parameters of TiC and ZrC crystal lattices in dependence on the existing structural defects is quite interesting (Fig. 6).

The obtained dependences (Fig. 6) could be explained only by assuming the existence of dissolution of Zirconium atoms/ions in TiC lattice, which leads to an increase in its lattice parameter and a supposed decrease in the degree of structural defect. In return, Titanium at-

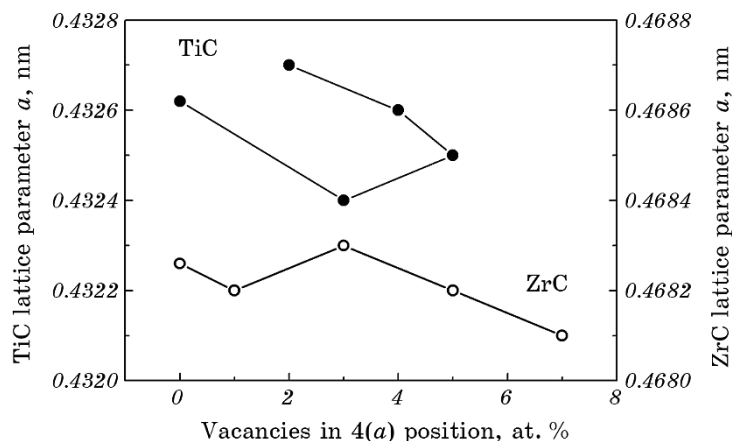


Fig. 6. Dependences of TiC and ZrC lattice parameters on the structural defects induced at processing of TiC-ZrC + TEG charge.

oms/ions dissolution in ZrC lattice results in a decrease in its lattice parameter and a supposed increase in the degree of defect of the structure. That is, the preconditions for formation of mutual $Zr_{1-x}Ti_xC$ substitutional solid solutions are created at mechanical alloying. Previously, such solid solutions were obtained from a mixture of TiC-ZrC by the method of spark plasma sintering (SPS) [10–13]. B. C. Ocak *et al.* [14] have studied the effect of graphene nanoparticles (GNP) dopants on TiC-ZrC ceramics obtained by SPS. It was shown that the highly dense (relative density is over 99%) ZrC-TiC-GNP composites are formed at sintering of the initial charge with addition of 3% vol. GNP. The phase composition of these composites is formed by $Zr_{1-x}Ti_xC$ substitutional solid solutions of [14].

In this work it was shown that the addition of 3% vol. TEG to ZrC-TiC powder blend completely prevents the oxidation of carbides at mechanical alloying. Moreover, the addition of 3% vol. Carbon is known to significantly improve the fracture toughness of TiB_2 -TiC ceramics due to the fact that graphite inclusions prevent the growth of cracks [15]. Thus, TEG dopants to ZrC-TiC charge may act in two ways, namely, they prevent the oxidation of a charge milled, and on the other hand, TEG dopants create preconditions for improving the mechanical properties of bulk composite material.

5. CONCLUSIONS

Detailed x-ray diffraction study of test samples of equimolar blends of TiC-ZrC and TiC-ZrC + 3% vol. TEG mechanically alloyed in a planetary mill under the same mode has revealed the following.

Carbide components of TiC–ZrC equimolar blend are significantly oxidized at processing. Oxygen present in the charge and reaction zone of the mill promotes the gradual decomposition of ZrC with the formation of carbon-stabilized cubic modification of zirconium oxide c-ZrO₂, which eventually transforms into its monoclinic modification m-ZrO₂, while TiC carbide accumulates the Oxygen atoms in tetrahedral voids of its crystal lattice, forming of Ti_xCO_y oxycarbide.

Addition of TEG (3% vol.) to the initial TiC–ZrC charge completely inhibits the oxidation.

Mechanical alloying causes an extraction of metal atoms (rather Ti⁴⁺ and Zr⁴⁺ ions) from charge to the reaction zone of mill with the formation of structural defects in ZrC and TiC crystal lattice, which creates preconditions for further formation of Zr_{1-x}Ti_xC solid solutions.

Fine-crystalline (crystallite size up to 20 nm) TiC–ZrC + 3% vol. TEG activated powder can be recommended as an effective filler for the creation of consolidated nanoceramics based on TiB₂ and other borides.

ACKNOWLEDGEMENT

This work has been supported by Ministry of Education and Science of Ukraine for perspective development of a scientific direction ‘Mathematical sciences and natural sciences’ at Taras Shevchenko National University of Kyiv.

REFERENCES

1. H. Zhao and Y. B. Cheng, *Ceramics International*, **25**, No. 4: 353 (1999).
2. G. Wen, S. B. Li, B. S. Zhang, and Z. X. Guo, *Acta Mater.*, **49**, No. 8: 1463 (2001).
3. D. Vallauri, I. A. Adrián, and A. Chrysanthou, *J. Eur. Ceramic Society*, **28**, No. 8: 1697 (2008).
4. Y. Wang, M. Yao, Z. Hu, H. Li, J. H. Ouyang, L. Chen, S. Huo, and Y. Zhou, *Ceramics International*, **44**, No. 18: 23297 (2018).
5. Y. Yuan, W. Ji, S. Dai, Z. Zhang, H. Zhang, and L. Xu, *International Journal of Refractory Metals and Hard Materials*, **84**, No. 105002 (2019).
6. M. Yao, Y. Wang, L. Chen, J. Ouyang, H. Li, H. Gu, and Y. Zhou, *Mater. Sci. Engineering: A*, **819**: 141510. (2021).
7. D. Wang, H. Wang, S. Sun, X. Zhu, G. Tu, *International Journal of Refractory Metals and Hard Materials*, **45**: 95 (2014).
8. M. Dashevskiy, O. Boshko, O. Nakonechna, and N. Belyavina, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **39**, No. 4: 541 (2017).
9. Y. Zhou, *Phase Formation and Thermal Conductivity of Zirconium Carbide* (PhD Thesis) (Missouri University of Science and Technology: 2021).
10. Y. Li, H. Katsui, and T. Goto, *Ceramics International*, **41**, No. 10: 14258 (2015).
11. Y. Li, H. Katsui, and T. Goto, *Ceramics International*, **41**, No. 5: 7103 (2015).

12. Y. Li, H. Katsui, and T. Goto, *J. Eur. Ceramic Society*, **36**, No. 15: 3795 (2016).
13. H. Li, G. He, N. Lu, and J. Li, *J. Ceramic Society of Japan*, **129**, No. 9: 574 (2021).
14. B. C. Ocak, B. Yavas, I. Akin, F. Sahin, and G. Goller, *Ceramics International*, **44**, No. 2: 2336 (2018).
15. O. Popov, T. Avramenko, and V. Vishnyakov, *Materials Today Communications*, **26**, 101756 (2021).

PACS numbers: 61.80.Ba, 62.20.Qp, 64.60.My, 81.40.Gh, 81.65.-b

Structure of High-Entropy CoCrFeNi Alloy Obtained by Laser Alloying

V. V. Girzhon, V. V. Yemelianchenko, and O. V. Smolyakov

Zaporizhzhya National University,
66 Zhukovsky Str.,
UA-69600 Zaporizhzhya, Ukraine

The structural-phase state of the CoCrFeNi high-entropy alloy obtained by laser alloying of technically pure iron surface layers with a mixture of powders of pure elements Co, Ni, Cr in an equiatomic ratio was investigated by XRD, EDX and metallographic analyses. As shown, the formation of multi-component substitutional solid solution based on f.c.c. lattice, which is typical for high entropy alloys in the surface layers during laser alloying took place. The influence of the atmosphere, in which alloying is carried out, on the processes of structure formation and phase composition of alloyed surfaces are analyzed. As determined, during laser alloying in the air exothermic oxidation processes occurs, which, as a result, lead to the formation of oxygen- and chromium-enriched areas on the peripheral areas of laser spots. Laser alloying in argon atmosphere provides a uniform distribution of all elements on the surface of the laser alloying zone.

Key words: high-entropy alloy, laser alloying zone, chemical inhomogeneity, substitutional solid solution, high cooling rates, phase composition.

Методами XRD, EDX та металографічної аналізи досліджено структурно-фазовий стан високоентропійного стопу CoCrFeNi, одержаного за допомогою лазерного легування поверхневих шарів технічно чистого заліза сумішню порошків чистих елементів Co, Ni, Cr в еквіатомному співвідношенні. Показано, що при лазерному легуванні у поверхневих шарах відбувалося формування багатокомпонентного твердого розчину заміщення на основі ГЦК-ґратниці, що характерно для високоентропійних стопів. Проаналізовано вплив атмосфери, в якій здійснювалося легування, на

Corresponding author: Vladyslav Vasylyovych Yemelianchenko
E-mail: emelyanchenkovlad@gmail.com

Citation: V. V. Girzhon, V. V. Yemelianchenko, and O. V. Smolyakov, Structure of High-Entropy CoCrFeNi Alloy Obtained by Laser Alloying, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, 44, No. 6: 725–733 (2022). DOI: [10.15407/mfint.44.06.0725](https://doi.org/10.15407/mfint.44.06.0725)

процеси структуроутворення та фазовий склад легованих шарів. Встановлено, що при лазерному легуванні на повітрі відбуваються екзотермічні процеси окиснення, які, як наслідок, приводять до утворення збагачених Оксигеном і Хромом ділянок на периферійних околах лазерних плям. Лазерне легування в атмосфері аргону забезпечило рівномірний розподіл усіх елементів по поверхні зони лазерного легування.

Ключові слова: високоентропійний стоп, зона лазерного легування, хемічна неоднорідність, твердий розчин заміщення, високі швидкості охолодження, фазовий склад.

(Received December 20, 2021; in final version, April 28, 2022)

1. INTRODUCTION

Typically, high entropy alloys (HEAs) are alloys containing from 5 to 13 elements, the number of each varies within 5...35 atomic percent (equiatomic or close to equiatomic concentration of elements). A characteristic feature of HEAs is the presence in their phase composition of one or more multicomponent substitutional solid solutions based on b.c.c., f.c.c. or h.c.p. lattice. The formation of such solid solutions is explained by the high values of mixing entropy in comparison with traditional alloys [1].

Structural features of HEAs provide their high mechanical properties (hardness, wear resistance, *etc.*) in a wide range of temperatures. The increase of these properties caused by significant distortion of the crystal lattice due to the difference in the atomic radii of the substitutional elements [2].

HEAs based on f.c.c. solid solution are characterized by low strength and high ductility, and HEAs with b.c.c. structure, on the contrary, by high strength and low ductility. Therefore, to achieve a set of required physical and mechanical properties of a particular product, it is necessary to be able to obtain alloys with a certain predetermined crystal structure [3].

The vast majority of known HEAs were obtained by vacuum-arc melting, or melting in an argon atmosphere. However, in many cases it is efficient to obtain high performance of ready parts not in the whole volume, but only in certain surface areas that are exposed to the most intense mechanical stress, *i.e.*, the creation of local coatings with high mechanical properties. Among the known methods of obtaining such coatings, laser alloying is one of the most promising due to the high manufacturability of the process [4]. Significant cooling rates of the melt ($10^3...10^6$ K/s), typical for this method, prevent the progress of diffusion processes during structural formation, which can lead to redistribution of chemical elements and the formation of other, undesir-

able, intermetallic phases. In addition, the advantages of the method include high adhesion between the coating and the matrix material [5].

The small number of scientific publications devoted to the production of HEAs coatings by laser alloying, proves that this problem requires further study. Therefore, the purpose of this study is to obtain and analyze the structural-phase state of a high-entropy alloy of the Co–Cr–Fe–Ni system obtained on the surface of samples from ARMCO iron by laser alloying.

2. EXPERIMENTAL/THEORETICAL DETAILS

Samples of technically pure iron (ARMCO-iron) were selected as the alloying object (matrix). Alloying was performed on a pulsed YAG laser ($\lambda = 1.06 \mu\text{m}$). The alloying components were an equiatomic mixture of pure elements Co, Ni and Cr powders with a fraction size less than $50 \mu\text{m}$. The alloying was performed in protective argon atmosphere and in air atmosphere. The phase composition of the surface layers of the samples was controlled by XRD ($\text{CuK}\alpha$ -radiation), EDX and metallographic analyses.

3. RESULTS AND DISCUSSION

At the first step of the research, the alloying of the samples was carried out in atmospheres of air and argon with a power density $1 \text{ GW}/\text{m}^2$ and a pulse repetition frequency 2 Hz. The thickness of the backcoat was $120 \mu\text{m}$.

According to XRD data, two phases were detected after alloying in the air atmosphere in the laser alloying zone (LAZ): b.c.c. and f.c.c. solid solutions (Fig. 1, *a*). Precisely determined lattice parameters of the obtained phases are presented in Table 1. It should be noted that the lattice parameter of the f.c.c. phase actually coincided with the lattice parameter of the HE-alloy of the same system, given in [7]. The lattice parameter of the b.c.c. phase was slightly larger than the lattice parameter α -Fe. Therefore, we can assume that the b.c.c. phase is a substitutional solid solution of chromium in iron, because according to [8] Fe and Cr form continuous series of solid solutions, and the size of chromium atoms is larger than the size of iron atoms. Due to the low solubility of oxygen and nitrogen in the α -Fe lattice, their effect on the lattice parameter change can be neglected. The sizes of Co and Ni atoms are smaller than those ones of iron atoms.

EDX analysis of the alloyed surface of the sample (Fig. 2) showed that the distribution of alloy components on the LAZ surface is homogeneous except for the peripheral regions of the laser spots. Elevated chromium and oxygen content was observed in these areas. This fea-

ture of the distribution of chemical elements can be explained in the following way. As known [9], that from all of the elements of the system, chromium has the greatest tendency to interact with oxygen and can form refractory oxides. The crystallization of the melt pool in the surface layers began with the areas that had the lowest temperature, *i.e.*, in the peripheral areas of the laser spots. In the first stages of crystallization, the most refractory phases were formed. Taking in consideration the fact that laser alloying was performed in air atmosphere, we can assume that this was the main reason for the formation of oxygen and chromium-enriched areas. The absence of reflections from the lattices of oxides on the diffractograms indicated a small volume fraction of them.

In order to eliminate the influence of the air atmosphere on the peculiarities of the distribution of elements on the LAZ surface, laser alloying in an argon atmosphere was performed. It turned out that this treatment provided a homogeneous distribution of all the elements on the LAZ surface (Fig. 3). This indicated the legitimacy of the assump-

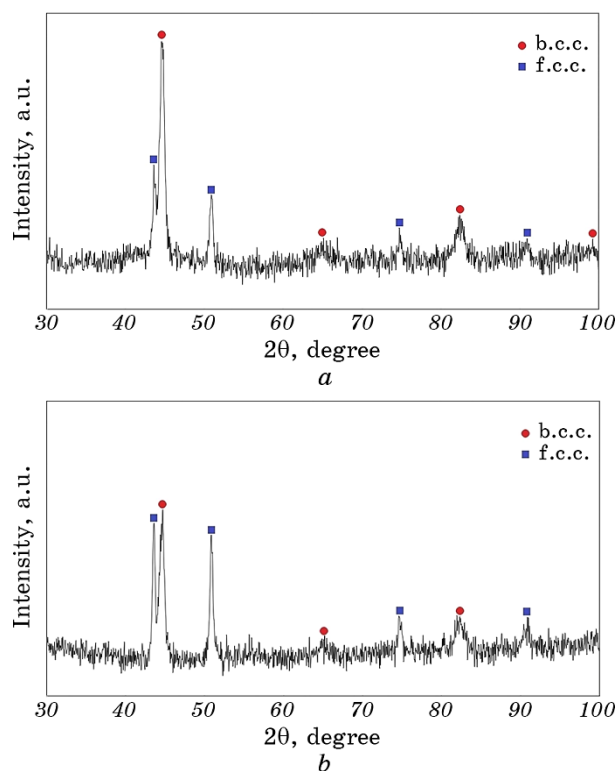
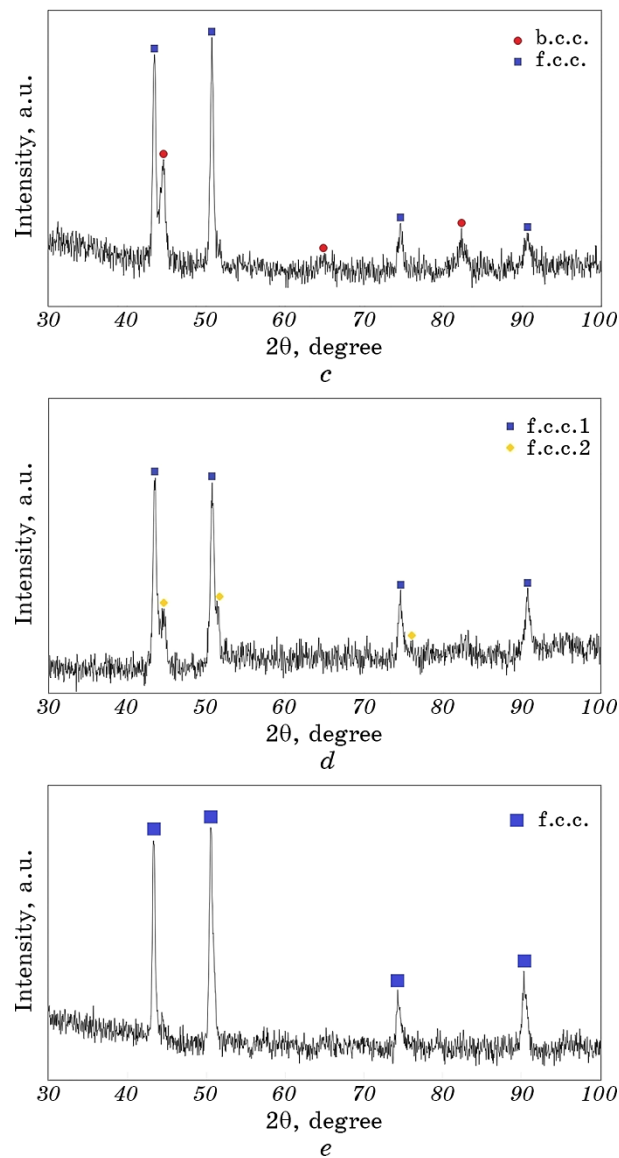


Fig. 1. XRD-patterns from the surface layers of samples of armco-iron after laser alloying with an equiatomic mixture of powders Co, Cr, Ni.



Continuation of Fig. 1.

tion about the reasons for the heterogeneity of the distribution of elements during alloying in air atmosphere.

It should be noted that alloying in an argon atmosphere led to a decrease in the intensities of diffraction maxima from the b.c.c. phase lattice (Fig. 1, *b*). This redistribution is explained by the fact that in the absence of oxygen, the temperature on the surface of the sample

TABLE 1. Lattice parameters of phases in LAZ after alloying under different conditions.

Thickness of backcoat, μm	Atmosphere of treatment	Phase composition	Lattice parameters, nm
120	Air	b.c.c.	0.28695 ± 0.00011
		f.c.c.	0.35724 ± 0.00016
120	Argon	b.c.c.	0.28699 ± 0.00011
		f.c.c.	0.35732 ± 0.00016
150	Air	b.c.c.	0.28713 ± 0.00011
		f.c.c.	0.36011 ± 0.00016
150	Argon	f.c.c. 1	0.35992 ± 0.00016
		f.c.c. 2	0.35521 ± 0.00016

during alloying was lower than during alloying in the air [10]. This can be caused by the absence of exothermic oxidation processes of both the organic components of the binder and the metals. As a result, the penetration depth decreased and, as a consequence, the amount of iron in the LAZ reduced. This caused a decrease in the volume fraction of b.c.c. phases. Indeed, according to EDX studies, the ratio of the amount of iron to the total amount of all other components in the LAZ after treatment in an argon atmosphere reduced from 2.45 to 1.76.

The decrease in the temperature of LAZ during alloying in argon can also explain the presence of areas that contained an increased number of individual components (Fig. 3), as the residence time of LAZ in the liquid state diminished.

Precise calculations of lattice parameters (Table 1) after alloying in argon atmosphere revealed their slight increase. This could be explained by the fact that the part of chromium atoms, which bound to oxides during alloying in air atmosphere, in this case participated in the process of LAZ structure.

The obtained data on the LAZ phase composition demonstrated an excess of iron in it (b.c.c. phase formation). This indicated that the chemical composition of the LAZ surface layers did not fully correspond to the region of homogeneity of the solid solution typical for Co–Cr–Fe–Ni system HEAs [11]. In order to reduce the amount of iron in LAZ at the next step of the study alloying was performed with a backcoat thickness 150 μm .

After alloying in air atmosphere (Fig. 1, c) in the LAZ surface layers, f.c.c., and b.c.c. phases were again detected, and the volume fraction of b.c.c. phases was smaller than after alloying with a backcoat thickness 120 μm , which was the expected result. The lattice param-

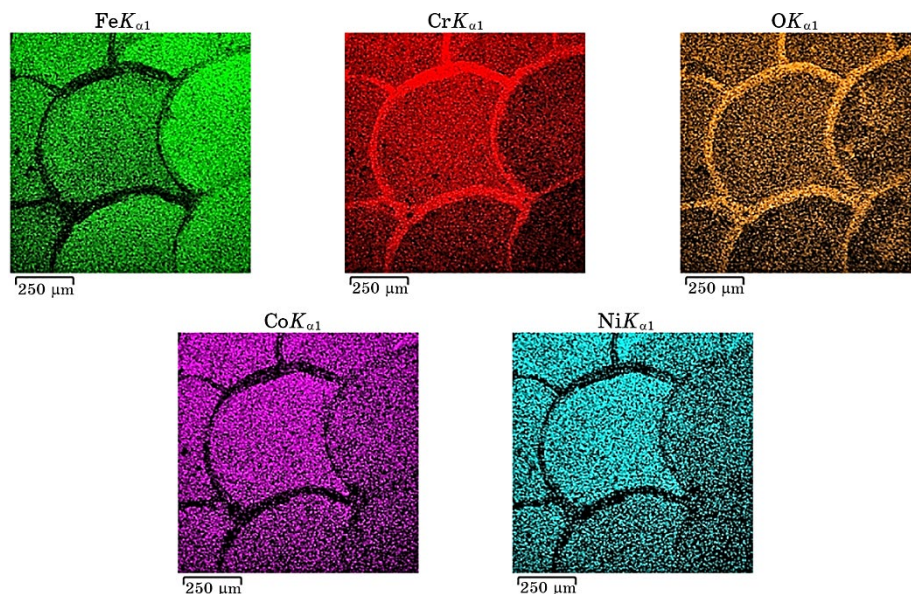


Fig. 2. Distribution of chemical components on the surface of LAZ after laser alloying in the air atmosphere.

ters of both solid solutions (Table 1) increased markedly. The growth in the b.c.c. phase parameter is quite easily explained by the augmentation in the relative amount of chromium in the LAZ. The parameter of the f.c.c. phase differed significantly from the previous one. This allowed us to assume that the formed f.c.c. phase is not identical in chemical composition to the same phase formed in LAZ during alloying with a smaller thickness of the backcoat.

Alloying with a backcoat thickness 150 μm in an argon atmosphere (Fig. 1, *d*) led to the formation in the alloyed layers of two f.c.c. solid solutions with different lattice parameters (Table 1). The presence on the diffractograms of reflections from the lattice of the two f.c.c. phases only indicated the absence of condition for the formation of the b.c.c. phase. This can be explained by decrease in the amount of iron in LAZ, caused by lower temperatures of structure formation in the absence of oxygen.

The formation of two f.c.c. solid solutions could be due to the rather inhomogeneous distribution of chemical elements in the LAZ, caused by high cooling rates of the melt and the Marangoni–Gibbs effect [12, 13]. Therefore, in order to align the chemical composition, the laser remelting of alloyed surface with a lower power density (0.5 GW/m^2) in argon atmosphere was carried out. After such treatment, only one f.c.c. phase was observed in the LAZ (Fig.1, *e*). The lattice parameter of the obtained solid solution (0.35994 ± 0.00016) nm practically coin-

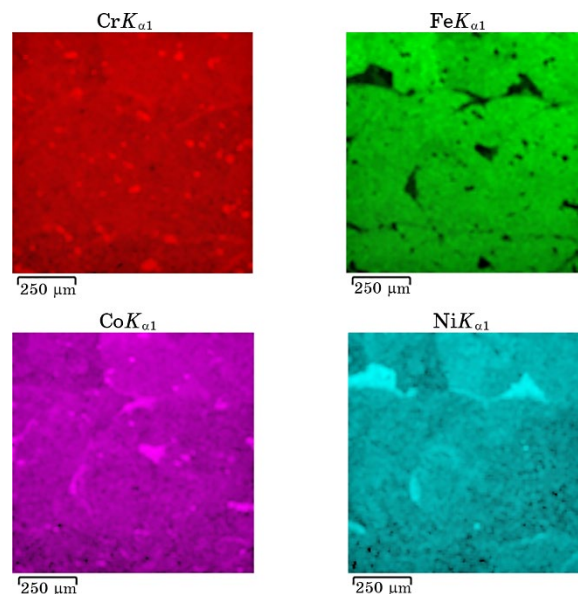


Fig. 3. Distribution of chemical components on the surface of LAZ after laser alloying in the argon atmosphere.

cided with the lattice parameter of the multicomponent substitutional solid solution, the formation of which is typical for HEAs of this system [14]. Thus, the described method makes possible to obtain a coating type HEAs on the surface of the iron.

4. CONCLUSIONS

1. Laser alloying of the ARMCO-iron surface layers with a mixture of powders Co, Ni, Cr, taken in the equiatomic ratio allows to obtain a highly adhesive coating, which contains phases typical for high-entropy alloys.
2. After laser alloying in air atmosphere contrast to alloying in a neutral environment the alloying zone is characterized by an increased content of matrix iron, which is caused by higher temperatures due to exothermic oxidation processes and the consequent increase in melt pool depth.

REFERENCES

1. Y. Zhang, *High-Entropy Materials: A Brief Introduction* (Singapore: Springer: 2019).

2. B. S. Murty, J. W. Yeh, S. Ranganathan, and P. P. Bhattacharjee, *High-Entropy Alloys. Second Edition* (UK, Oxford: Butterworth–Heinemann Elsevier Ltd.: 2019).
3. Y. Zhang, T. T. Zuo, Z. Tang, M. C. Gao, K. A. Dahmen, P. K. Liaw, and Z. P. Lu, *Progr. Mater. Sci.*, **61**: 1 (2014).
4. J. M. Poate, G. Foti, and D. C. Jacobson, *Surface Modification and Alloying: by Laser, Ion, and Electron Beams* (Berlin/Heidelberg: Springer Science+Business Media: 2013).
5. H. Zhang, Y. Pan, Y. Z. He, J. L. Wu, T. M. Yue, and S. Guo, *Miner. Met. Mater. Ser.*, **66**: 2057 (2014).
6. Z. Wua, H. Bei, F. Otto, G. M. Pharr, and E. P. George, *Intermetallics*, **46**: 131 (2014).
7. J. Li, W. Jia, J. Wang, H. Kou, D. Zhang, and E. Beaugnon, *Mater. Des.*, **95**: 183 (2016).
8. T. B. Massalski, J. L. Murray, L. H. Bennett, and Hugh Baker, *Binary Alloy Phase Diagrams* (Metals Park, Ohio: American Society for Metals: 1986), vol. 1.
9. W. W. Smeltzer and D. J. Young, *Progr. Solid State Chem.*, **10**: 17 (1975).
10. M. Doubenskaia, D. Kotoban, and I. Zhirnov, *Mechanics Industry*, **17**: 707 (2016).
11. F. He, Z. Wang, Q. Wu, S. Niu, J. Li, J. Wang, and C. T. Liu, *Scr. Mater.*, **131**: 42 (2017).
12. *Lazernye Tekhnologii Obrabotki Materialov: Sovremennye Problemy Fundamental'nykh Issledovaniy i Prikladnykh Razrabotok* [Laser Technology of Materials Processing: Modern Problems of Fundamental Research and Applied Development] (Ed. B. Ja. Panchenko) (Moscow: Fizmatlit: 2009) (in Russian).
13. V. V. Girzhon, A. V. Smoljakov, and I. V. Tancjura, *Fizika Metallov i Metallovedenie*, **106**: 384 (2008) (in Russian).
14. J. Cornide, U. Dahlborg, Z. Leong, L. Asensio Dominguez, J. Juraszek, S. Jouen, T. Hansen, R. Wunderlich, S. Chambrelaud, I. Todd, R. Goodall, and M. Calvo-Dahlborg, *Proc. of TMS 2015 144th Annual Meeting & Exhibitions (March 15–17, 2015, Orlando, Florida)* (Springer International Publishing: 2016), p. 1147.

PACS numbers: 66.30.Lw, 68.35.Fx, 68.35.Rh, 68.55.Ln, 72.15.-v, 81.40.-z

Effect of Ar Annealing on Diffusion and Thermal Stability of Transition Metal Thin-Film Systems

A. K. Orlov, I. O. Kruhlov, A. Lozova, S. I. Sidorenko, S. V. Prikhodko*,
and S. M. Voloshko

National Technical University of Ukraine
‘Igor Sikorsky Kyiv Polytechnic Institute’,
37 Peremohy Ave.,
UA-03056 Kyiv, Ukraine
*University of California (UCLA),
420 Westwood Plaza,
2121K-Engineering 5,
CA 90095-1595 Los Angeles, USA

The processes of diffusion-induced structure and phase formation in nanoscale Ni/Cu/V thin films deposited by DC magnetron sputtering on a Si (100) substrate after annealing in the temperature range of 200–550°C in vacuum (10^{-3} Pa) and argon (200 Pa) atmospheres are studied. Thermal stability, diffusion mass transfer of components and changes of phase composition in vacuum and Ar atmospheres are analysed using synchrotron and copper radiation x-ray diffraction (XRD) and secondary ion mass spectrometry (SIMS). Due to the different diffusion mobility of Cu and Ni atoms with the temperatures increase in the studied interval, the two regions with different Ni and Cu concentrations are formed. Grain boundary and bulk mechanisms of Cu and Ni diffusion and the influence of the heat treatment atmosphere are discussed. As shown, annealing in vacuum atmosphere, compared to annealing in argon, results in an increase in the onset temperature of the Cu-based solid solution formation by 100°C and a decrease in the concentration of Ni in this solid solution. Thus, upon annealing in vacuum, the thin film maintains thermal stability over a larger temperature range compared with annealing in argon.

Corresponding author: Andriy Kostyantynovych Orlov
E-mail: orlov@kpm.kpi.ua

Citation: A. K. Orlov, I. O. Kruhlov, A. Lozova, S. I. Sidorenko, S. V. Prikhodko, and S. M. Voloshko, Effect of Ar Annealing on Diffusion and Thermal Stability of Transition Metal Thin-Film Systems, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **44**, No. 6: 735–749 (2022). DOI: [10.15407/mfint.44.06.0735](https://doi.org/10.15407/mfint.44.06.0735)

Key words: nanosize films, solid solution, synchrotron radiation, heat treatment, diffusion, phase formation.

Досліджено процеси дифузійно-індукованого структуро- та фазоутворення в нанорозмірних тонких плівках Ni/Cu/V, одержаних методом магнетронного осадження на підкладку Si (100), після відпалу в інтервалі температур 200–550°C у атмосферах вакууму (10^{-3} Па) та аргону (200 Па). Термічну стабільність, дифузійний масоперенос компонентів та зміну фазового складу в атмосферах вакууму та аргону проаналізовано за допомогою метод рентгеноструктурної фазової аналізи (XRD) із використанням синхротронного та мідного випромінювання та вторинно-йонної мас-спектрометрії (SIMS). Через різну дифузійну мобільність атомів Cu та Ni із зростанням температури у досліджуваному інтервалі формуються дві області з різною концентрацією Ni та Cu. Обговорюються зернограничний та об'ємний механізми дифузії Cu та Ni, а також вплив атмосфери термічного оброблення. Показано, що відпал у вакуумі порівняно з відпалом в аргоні приводить до підвищення температури початку утворення твердого розчину на основі Cu на 100°C та пониження концентрації Ni в цьому твердому розчині. Таким чином, за умов відпалу у вакуумі тонкоплівкова композиція зберігає термічну стабільність у більшому інтервалі температур порівняно з відпалом в аргоні.

Ключові слова: нанорозмірні плівки, твердий розчин, синхротронне випромінювання, термооброблення, дифузія, фазоутворення.

(Received April 5, 2022; in final version, April 27, 2022)

1. INTRODUCTION

At present, Cu-based thin-film systems are of great importance and their research continues, since such systems have unique mechanical, electrical, and magnetic properties [1], which lead to new opportunities for their application in various fields of nanotechnology and solar energy. One of the important elements of solar cells (SC) is metal contacts, which greatly affect their functionality, stability, and cost. Currently, Ag paste is mainly utilized for metal contacts, usually fabricated using screen printing technology followed by high-temperature (700–900°C) annealing [2]. However, insufficient control over this process can unpredictably disrupt the $p-n$ junction, leading to degradation of the passivation layers and possible shunting of the junction [3]. While the high conductivity of Ag and the established mass-production technology remain the main advantages, the great concern of these contacts is related to high market price of Ag which contributes to about 40% of the total cost of SC value. Therefore, alternative contact materials and technologies for their fabrication are also being considered, but at present their use has not yet reached the level of commercial product. Cu is one of the most promising materials for re-

placing Ag and viably reducing the SC cost up to ~100 times while maintaining high electrical conductivity. However, the high diffusion activity of Cu at the Si interface remains a major obstacle that prevents the use of Cu as a contact material for SC, since this can lead to the formation of intermetallic phases of Cu with Si that serve as recombination centres [4], as well as compromise the adhesion to substrate [5] due to a porous structure of the Cu/Si interface [6]. An effective solution of this problem may be the use of a diffusion barrier layer of different metals such as V, Cr, Ti, and others [7]. Additional challenging aspect is related to poor Cu oxidation resistance even at low temperatures. For this reason, the coating layer of Ni, Au, Mo can be used to prevent oxidation of the Cu film [8]. Therefore, multilayer metal structures with Cu as an internal and fully protected layer, providing long-term stable electrical properties of the device, are viable from scientific and applied points of view.

Thermal stability of electric contacts for SC is an important component of their functionality. When multilayer structures are considered as contacts, this becomes vital because various environmental conditions are inevitable during the operation of the SC, such as low and high temperatures, different atmospheric composition, exposure time, heating and cooling rate, humidity, *etc.* In addition, the thermal stability of multilayer components is essential for their successful fabrication [9]. Understanding of thermal stability of a multilayer metal device is impossible without studying the diffusion processes inside these structures. The most commonly corresponding diffusion distance is in the range of nanometres and the study of diffusion length allows to characterize the degree of film degradation and can be used as a measure of its thermal stability. In addition, in nanoscale structures with an increased number of components and interfaces, diffusion intermixing and phase formation should be specifically addressed because they greatly affect the physical and functional properties of the material. Interfacial reactions between components can lead not only to inhomogeneity of phase composition and formation of new phases, sometimes atypical to the corresponding equilibrium phase diagrams of bulk materials, but also to degradation of the functional properties of the elements. Furthermore, the chemical composition of the fabrication and exploitation environment may affect the structural characteristics and diffusion kinetics in nanostructured materials at elevated temperatures [10]. Therefore, the implementation of Cu-based thin-film elements in advanced devices for microelectronics and photovoltaics is greatly restricted by the lack of ample understanding and good control of their diffusion kinetics and thermal stability under aggressive thermal conditions in various environments.

Thermal treatment of thin films in Ar atmosphere is widespread. [11–14]. By varying the processing environment, the control over the

phase transformations kinetics and temperature intervals, structural properties, surface roughness and thermal stability have been achieved. However, the annealing environment can affect the diffusion kinetics and thus thermal stability of the structure [15]. It is therefore necessary to give due consideration to studying the thermal stability of particular transition metal contacts when exposed to Ar.

This study examined the effect of Ar-annealing on the structure, phase composition, diffusion behaviour and thermal stability of functional transition metal nanosize film system Ni (25 nm)/Cu (25 nm)/V (25 nm). The system was deposited by DC magnetron sputtering on a single crystal Si (100) substrate. In order to simulate in laboratory conditions, the extremely aggressive thermal effect on functional elements annealing was carried out under Ar flow (200 Pa) and a wide temperature range of 200–550°C. A further comparison was made for the same structures annealed in vacuum (10^{-3} Pa). Such conditions are much more extreme than the actual fabrication and operational ones, although they provided the important information on the stability of studied system in a broad temperature range. The feasibility of suggested multilayer arrangement with Cu layer in the middle and Ni in the upper part as oxidation barrier and V in the lower part as diffusion barrier with substrate is discussed.

2. METHODS

Ni (25 nm)/Cu (25 nm)/V (25 nm) thin films were deposited by the DC magnetron sputtering on single crystal Si (100) substrates at room temperature from high-purity targets of Ni (99.995 at.%), Cu (99.99 at.%) and V (99.95 at.%). Deposition rates were 0.5 nm/s, 0.27 nm/s and 0.065 nm/s for Cu, Ni and V, respectively. The vacuum level was $2.0 \cdot 10^{-5}$ Pa before deposition, while the argon flow during the deposition process was $6.0 \cdot 10^{-1}$ Pa. The thicknesses of the film layers were calculated from known sputtering rates and further verified by depth profiling. The layer-by-layer chemical analysis was performed by secondary ion mass spectrometry using Ion Time-of-Flight IV system with a primary beam of 1 keV O^+ positive ions. Heat treatment was carried out in the temperature range of 200–550°C for 15 minutes in a vacuum of $2 \cdot 10^{-3}$ Pa and in an argon atmosphere (200 Pa). Structural and phase analysis was performed using x-ray diffraction (XRD) using the grazing incidence geometry in copper radiation (1.5405 Å) on the Rigaku Ultima IV device. For a more detailed study of the thermally-induced formation of structure and phase composition, synchrotron radiation with a wavelength of 1.08 Å and the grazing incidence wide-angle x-ray scattering geometry (GIWAXS) on the materials science beamline BL44B2 (RIKEN SPring-8 synchrotron radiation facility, Japan) were used. Debye–Scherrer camera with a radius of 286.48 mm and an ‘im-

age plate' detector with dimensions of 400×200 mm was applied for XRD analysis [16]. The angle between the beam and the surface of the sample was 0.5°. The vertical and horizontal dimensions of the beam were 0.01 mm and 3.0 mm, respectively.

3. EXPERIMENT

Figure 1 shows the results of XRD studies of Ni/Cu/V thin films after deposition and heat treatment in vacuum (*a*) and argon atmosphere (*b*). The increased value of the lattice constant of the f.c.c. Cu film in the initial state (Cu thin film lattice constant = 0.3596 nm) compared to the bulk (Cu bulk lattice constant = 0.3615 nm [17]) is likely due to the formation of tensile stresses in vacuum condensates, which relax during further annealing [18]. As the temperature increases upon annealing in vacuum (Fig. 1, *a*), a gradual shift of the Cu (111) peak towards high diffraction angles and a corresponding decrease in the Cu lattice parameter are observed. At the same time, the position of Ni diffraction peaks remains unchanged throughout the whole temperature range. This diffraction pattern is typical for the Cu-based Ni–Cu solid solution formation processes and has been previously observed for submicron films [19–21].

Diffraction data of the Ni (25 nm)/Cu (25 nm)/V (25 nm) thin films after deposition and annealing in Ar atmosphere in the 350–550°C temperature range are shown in Fig. 1, *b*. Similarly, to the vacuum annealing, the Cu peak shift towards high angles is observed, but this effect is noticeably recorded at a lower temperature (400°C instead of 500°C). The diffraction peak position of Ni (111) is unchanged through

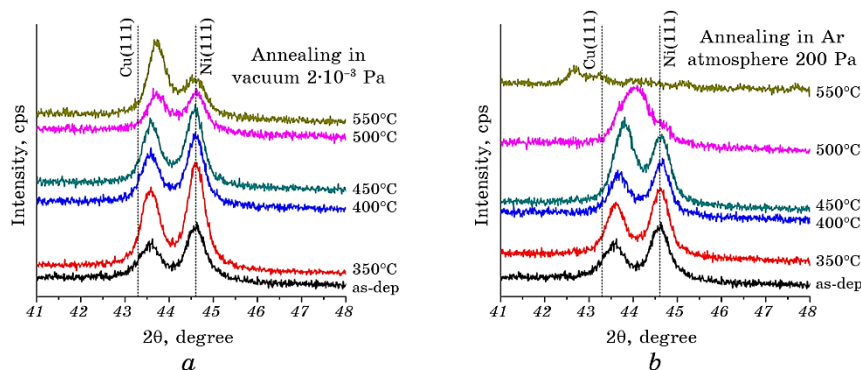


Fig. 1. X-ray pattern of the Ni/Cu/V thin film in the initial state and after annealing in vacuum (*a*) and in an argon atmosphere (*b*) at temperatures of 350°C, 400°C, 450°C, 500°C, and 550°C (wavelength of 1.54 Å, dotted line corresponds to the peak position of Cu [17] and Ni [22] bulk materials).

the whole temperature range similar to vacuum annealing. The disappearance of peaks of both Cu and Ni after annealing in Ar at 550°C makes it drastically different from the result of vacuum annealing.

It should be noted that diffraction peaks from Cu oxide phase are not observed in both annealing atmospheres, which confirms the effectiveness of using Ni top layer to protect Cu film from oxidation.

At elevated temperatures there is also an obvious change in the intensity ratio of the Cu and Ni peaks and this change starts sooner (at lower temperature) in the Ar atmosphere. Initially (as deposited), the stronger peak of Ni becomes less intense than the peak of Cu at 450°C in Ar (Fig. 1, *b*), while in vacuum this result becomes apparent only at 550°C (Fig. 1, *a*). According to the atomic scattering factor, the intensity of the Cu (111) diffraction peak should be higher than that of the Ni (111) at temperature up to 400°C [23]. However, when applying Ni as a top layer, it leads to the decrease of the Cu diffraction peak intensity in initial state, *i.e.*, $I_{\text{Ni}} > I_{\text{Cu}}$ for all reflection orders. As the annealing temperature increases, the diffraction peaks intensity ratio changes: the Cu (111) peak intensity becomes higher, and Ni (111) becomes proportionally smaller. This is most likely result of the Cu-based Ni–Cu solid solution formation, since the changes are observed only in the Cu crystal lattice period, but not vice versa. The observed intensities redistribution may be associated with different diffusion mechanisms of Ni and Cu atoms.

The XRD data in the Fig. 2 show the temperature dependence of the lattice parameters of Ni and Cu in different annealing atmosphere. There is no significant change in the lattice parameter of Ni and Cu at temperatures up to 350°C. The change in the Cu lattice period (Fig. 1, *a*) from 0.3596 nm in the initial state to 0.3585 nm within the temper-

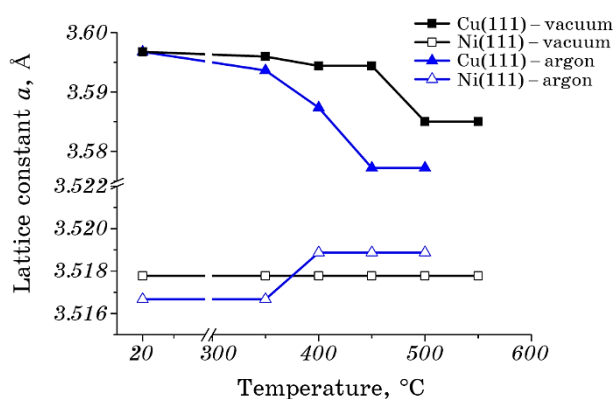


Fig. 2. Ni and Cu lattice parameters of the Ni/Cu/V system as a function of temperature based on XRD data after annealing in vacuum and argon for 15 minutes.

ature range of 350–450°C are defined. The Ni lattice parameter stays unchanged in vacuum in the entire temperature interval. However, a significant change in the lattice parameter of Cu is observed in vacuum at 400°C and at 450°C: in argon atmosphere $a = 0.3577$ nm, and in vacuum $a = 0.3594$ nm. Therefore, a higher concentration of Ni in the formed solid solution is observed when the films annealed in argon compared to vacuum.

It is apparent, that annealing thin film structures in Ar tends to be more vigorous in modifying the initial structures compared to vacuum annealing. Similar structural changes in thin films occurred in Ar at lower temperatures than they started in vacuum. For this reason, further experiments were performed for thin films annealed in argon to reveal the underlying mechanisms of such behaviour.

More detailed structural phase analysis was performed using synchrotron radiation. The advantages of synchrotron radiation for the study of nanosize multilayer films are discussed elsewhere [24]. Fig. 3 (left panel) shows 2D diffraction patterns of the Ni (25 nm)/Cu (25 nm)/V (25 nm) system after heat treatment in an argon atmosphere (200 Pa) in the temperature range of 200–500°C for 15 minutes, obtained using image-plate detector and radiation wavelength of 1.08 Å.

These results were supplemented by traditional XRD data. The analysis of Debye diffraction rings allowed to exclude the potentially possible formation of the grains' predominant orientation, which is evidenced by the uniform distribution of the intensity of all diffraction rings. To specify the structural parameters, the dependence of the diffraction peaks' intensity on the 2θ angle shown in Fig. 3 was used.

While the traditional XRD analysis allowed to detect only the highest intensity (111) peaks of Ni and Cu phases in studied thin films, the use of synchrotron radiation enabled to determine the diffraction of the 2nd and 3rd orders and, thus, more accurately calculate the lattice parameters using diffraction peaks at high angles. In the initial state, only the fcc Ni and f.c.c. Cu peaks are present. The b.c.c. V peaks are not observed, which indicates on its amorphous or fine-grained structure, most likely attributed to the particularly slow deposition rate of the growing film on cold substrate. The onset temperature of diffusion-induced solid solutions formation between Ni and Cu according to these data is 400°C. The composition is gradually homogenized with the formation of Ni_xCu_y solid solution upon further increase of the annealing temperature up to 500°C, which is evidenced by the merging of the diffraction peaks from two f.c.c. phases. However, it is still possible to distinguish the signals from residual Cu and Ni f.c.c. phases.

The crystallites size of Cu and Ni phases was evaluated based on the synchrotron radiation XRD data using the Scherrer equation [25]. In the initial state, the Cu lattice parameter is 0.361 nm, and for Ni—0.352 nm. The Ni–Cu solid solution formation is accompanied by a de-

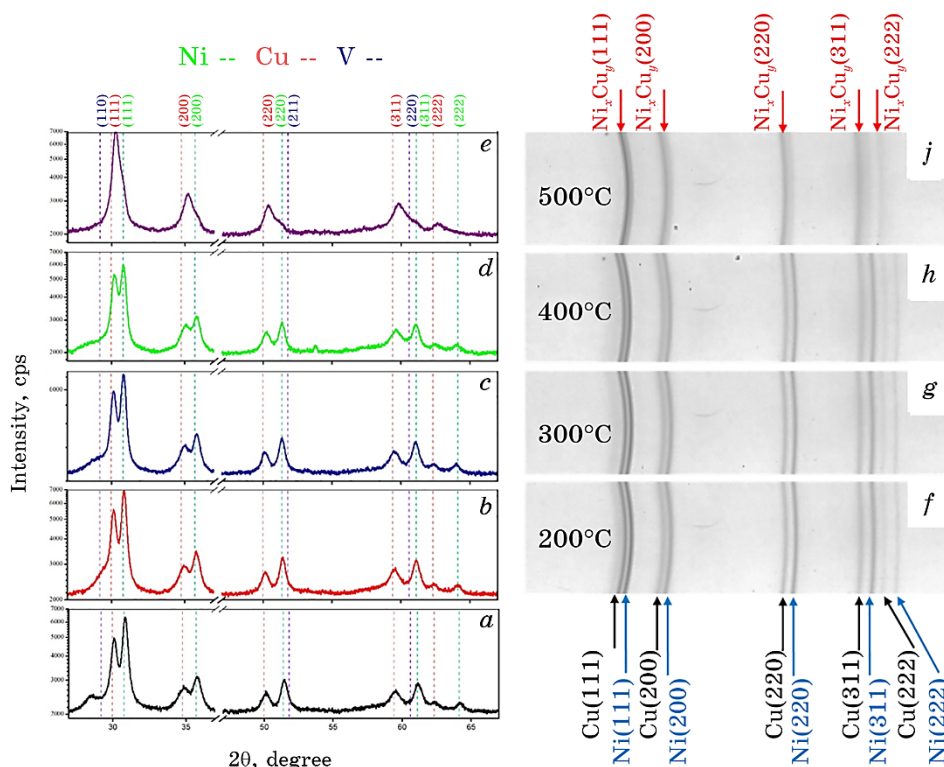


Fig. 3. Diffraction patterns of the Ni/Cu/V thin film system after deposition (a) and heat treatment in argon atmosphere at temperatures of 200° (b), 300° (c), 400° (d), 500° (e), obtained using synchrotron radiation (wavelength 1.08 Å) and the corresponding 2D scans of Debye diffraction rings (f, g, h, j).

crease in the Cu lattice period to 0.359 nm at 500°C, while the Ni lattice constant remains unchanged until the formation of the homogeneous solid solution. The crystallites size of Ni is 29–35 nm in the temperature range 20–400°C. The microstrain value decreases from 0.32% to 0.25% when the temperature change from room up to 400°C, which likely indicates on the slight stress relaxation during annealing. The average size of Cu crystallites varies from 10 to 16 nm, and the microstrains, respectively, from –0.1 to +0.1%, within the same temperature range.

Based on the synchrotron radiation XRD data (Fig. 4), and according to the estimation of the lattice constants ratio using Vegard's law [26], a solid solution of $\text{Cu}_{77}\text{Ni}_{23}$ composition is formed after annealing in argon at 500°C.

Since XRD analysis provides averaged information about the structure of the entire volume of the thin film, for a more detailed study of

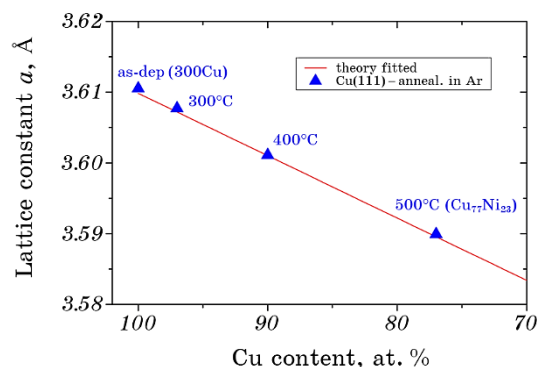


Fig. 4. Lattice constant of Cu-based solid solution as a function of the atomic concentration of Cu in Ni calculated from the synchrotron radiation XRD data.

the diffusion processes as a function of temperature, the layer-by-layer elemental analysis of the nanosize Ni/Cu/V systems using the SIMS technique was performed (Fig. 5). The intensity distribution of secondary ions of the main components (Ni^+ , Cu^+ , V^+), as well as the secondary complex ions (NiCu^+ , CuV^+ and NiV^+) was analysed.

The trilayer structure of the film with almost absent mutual diffusion of the components is clearly seen in the initial condition. However, a minor signal of Ni appeared at the Cu/V interface is most likely the result of condensation stimulated fast diffusion of some Ni atoms through the Cu grain boundaries upon deposition [27]. Diffusion of Ni in the initial state is undesirable. It is most likely a result of magnetron deposition and probably can be prevented in further experiments by adjusting of the sputtering parameters. The slope of the curves observed at the interfaces is due to the resolution of the used layer-by-layer technique. The leaps of intensity seen in the surface area are associated with oxidation processes, as SIMS technique is highly sensitive to the interatomic interaction and chemical bonding energy [24]. It should be also noted that the thickness of each metal layer in initial state is similar and equal to 25 nm, however their etching time (x -axis) is different, especially for V layer due to the fact that V has the lowest sputtering coefficient ($\text{V} = 85 \text{ Å/s}$, $\text{Ni} = 190 \text{ Å/s}$, $\text{Cu} = 320 \text{ Å/s}$).

The Cu and Ni atoms mutual diffusion is evident when the annealing temperature increases up to 300°C. Besides, the Ni atoms spread more intensively into the Cu layer and segregate in the Cu/V interface region. It follows from the comparison of SIMS and XRD data, that the diffusion interaction at a temperature of 300°C occurs through the grain boundary mechanism, since the angular positions of the corresponding Ni and Cu diffraction peaks remain constant. Cu diffuses to the outer surface and oxidizes, which creates an additional driving

force for diffusion [23, 28]. The diffusion of Cu atoms into V layer starts simultaneously.

The mutual diffusion of Ni and Cu atoms continues at temperature of 400°C. In addition, two diffusion interaction regions at Cu/Ni and Cu/V interfaces are still clearly observed at this temperature. The diffusion of Ni atoms into the Cu layer is more intense, which is con-

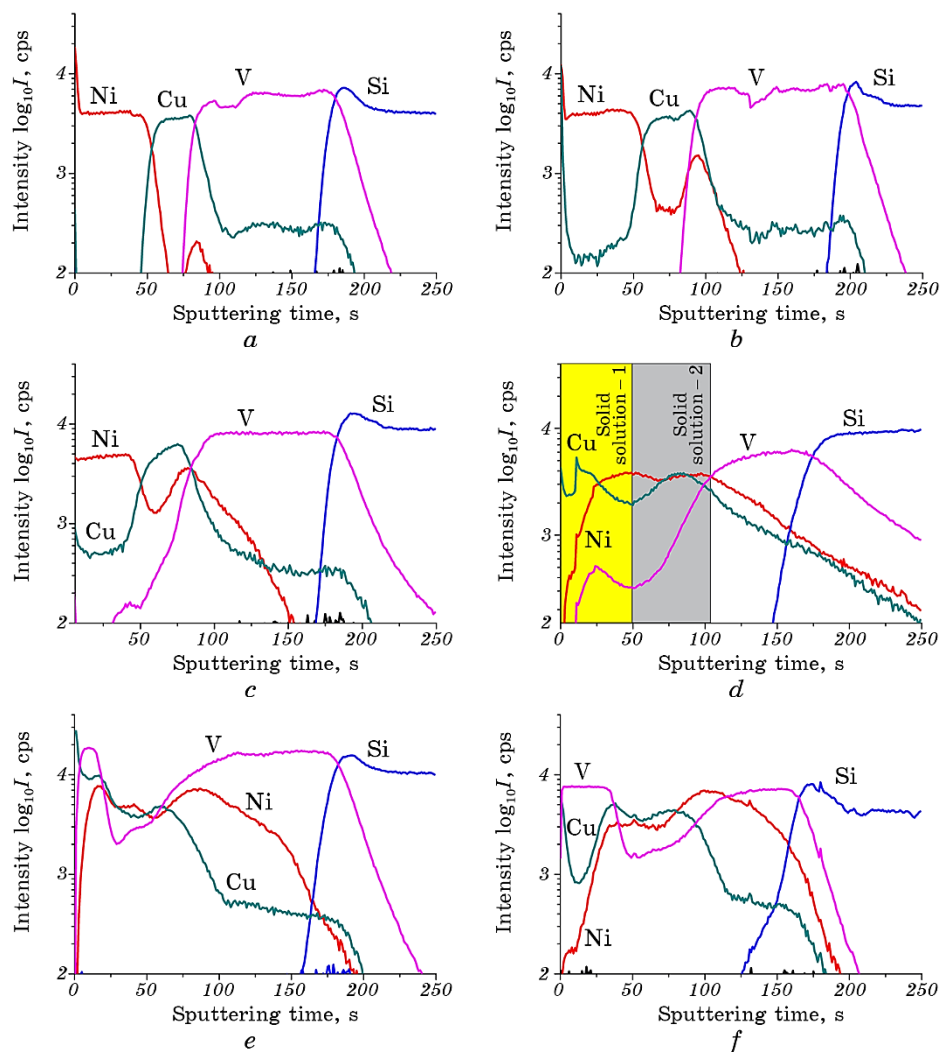


Fig. 5. The intensity of Ni^+ , Cu^+ , V^+ and Si^+ secondary ions current as a function of the sputtering time of Ni/Cu/V/Si thin films after deposition (a) and annealing in an Ar atmosphere at temperatures of 300°C (b), 400°C (c), 450°C (d), 500°C (e), 550°C (f). The regions of the two Cu–Ni solid solutions formed at 450°C (d) are marked in yellow and grey colours.

firmed by the results of synchrotron analysis, where the Cu peak shift is fixed at 400°C and, as a result, a Cu-based Ni–Cu substitution solid solution is formed. The concentration of Ni atoms in the Cu layer is equalized at a temperature close to 450°C. The most pronounced diffusion interaction is observed in the film volume (particularly, in the Cu layer) due to the diffusion mobility of Ni in Cu. In the temperature range of 300–400°C, Ni atoms diffuse through the Cu layer and accumulate at the Cu/V interface, while V acts as a diffusion barrier between the interacted layers and the substrate. As the annealing temperature increases further, a certain critical concentration of Ni at the interface with V layer is accumulated when the Cu and V profiles at this interface are blurred. The position of the Cu/V interface is shifted towards the substrate. At 450°C, not only the two regions of the solid solution with concentration of components are observed, but also the V diffusion towards the free surface begins with its gradual accumulation in the near-surface region. A significant intensification of the vanadium diffusion activity is observed approaching to temperatures $\sim 0.3\text{--}0.35 T_{\text{melting}}$, where $T_{\text{melting}} = 1910^\circ\text{C}$. This corresponds to the onset of the diffusion activation by the volume mechanism. A V layer with a small content of Cu atoms is formed in the near-surface area when the temperature reaches 500–550°C. The argon atmosphere contributes to the accumulation of impurities in the film from the residual atmosphere. Moreover, vanadium has a strong susceptibility to oxidation and adsorption of impurities when it comes to the surface under thermal exposure. These two factors can cause the disappearance of diffraction peaks of Ni and Cu at 550°C in Ar due to a decrease in the crystallinity of the studied thin film because of high impurities content. To be fair, the obtained results at 550°C are not sufficient enough to satisfactorily explain the disappearance of diffraction peaks. It should be noted that Cu atoms are observed on the outer surface in the entire temperature range. This may be due to the fact that Cu has a lower surface energy (1.825 J/m²) than Ni (2.34 J/m²) and V (2.55 J/m²) [29]. Therefore, the results of SIMS depth profiling studies showed that the use of top and bottom barrier layers (Ni to prevent oxidation and V to prevent diffusion with the substrate) upon annealing in argon atmosphere turned out to be not very hostile up to 400°C, after which the development of various diffusion processes is irresistibly activated and the thermal stability of the system is violated.

4. DISCUSSION

It is well acknowledged that annealing in chemically inert Ar is a common pathway to minimize the oxidation of thin-film functional elements in microelectronics technologies, especially for ‘noble Me–transition Me’ layers combinations [13]. However, the results demon-

strated in present study show that thermal exposure of transition metal thin film in argon can undesirably affect the diffusion-mediated thermal stability compared to the similar vacuum annealing.

Most of the thin-film materials contain impurities that physically or chemically adsorb during condensation or heat treatment from atmosphere being partially in their molecular state. Impurities play a significant role and can accelerate diffusion reactions, especially in the case of nanoscale systems [30]. During thermal treatment in vacuum, degassing of impurities occurs much faster than in an argon atmosphere. This is due to the fact that the partial pressure of saturated vapour impurities in the material in argon atmosphere is much lower than in vacuum, which significantly reduces the probability of their evaporation [31]. Furthermore, volatile chemical compounds have a higher tendency to decompose in vacuum. Annealing of defects and impurities in vacuum, in comparison with argon atmosphere, slows down the diffusion intermixing between conductive and barrier layers. As a result, the Ni/Cu/V thin film structure remains more thermally stable in a vacuum. Due to the annealing of volatile chemical compounds, there is a certain deviation from the original composition, and such non-uniformity of chemical composition has a huge effect on heterogeneous nucleation [32]. In addition, the heat transfer of materials through the surface is higher in argon compared to vacuum, which contributes to a faster establishment of the temperature equilibrium over the entire area of thin-film material. Due to these factors, the stresses arising in the material can additionally accelerate the diffusion interplay between the film components during thermal exposure in an Ar atmosphere compared to the vacuum.

Since the diffusivity of Ni in Cu is higher than of Cu in Ni, the both grain boundary and bulk diffusion of Ni atoms into the Cu layer at 200–550°C is taking place, herewith Cu diffuses only through the Ni grain boundaries. The XRD analysis characterizes a bulk diffusion, and the SIMS technique characterizes both bulk and grain boundary diffusion through the averaged depth elemental distribution. It follows from SIMS data that Cu diffusion into the Ni layer is observed, while Ni crystal lattice remains unchanged according to the XRD data, indicating on the grain boundary mechanism of Cu mass transfer. The presented data and analysis support that vacuum annealing leads to slower interdiffusion between components and, as a consequence, thin film structures retain their thermal sustainability better compared to the argon ambient.

5. CONCLUSIONS

The structural phase transformations and layer intermixing during heat treatment of Ni/Cu/V/Si (100) thin films are studied in the tem-

perature range from 200°C to 550°C for 15 minutes in inert Ar atmosphere and vacuum (10^{-3} Pa) using a combination of structural (XRD) and chemical (SIMS) experimental techniques. The diffusion of Cu atoms to the Ni boundaries and diffusion of Ni atoms in the Cu grains volume in the temperature range of 300–500°C causes the formation of Cu-based solid solutions with different Ni concentrations regardless of the annealing atmosphere. Vacuum annealing compared to Ar reduces the temperature of the Ni in Cu substitutional solid solution formation by 100°C and reduces the Ni concentration in this solution. The V adhesion layer prevents the Cu and Ni atoms intermixing with the substrate and averts the silicide formation below 400°C in argon. Further increase of annealing temperature leads the V diffusion towards the outer surface and its accumulation in the near-surface region. Ni top layer prevents Cu oxidation during annealing in both atmospheres. Studied trilayer structures appeared to be thermally more sustainable under vacuum annealing compared to Ar.

ACKNOWLEDGMENTS

This publication is based on work supported by a grant (G-202108-68019) from the U.S. Civilian Research & Development Foundation (CRDF Global). Any opinions, findings and conclusions or recommendations expressed in this material are those of the authors and do not necessarily reflect the views of CRDF Global.

This study has been also partially supported by the Ministry of Education and Science of Ukraine grant (0121U110283).

The synchrotron radiation experiments were performed at RIKEN SPring-8 Center (BL44B2 beamline) in frames of collaboration between Igor Sikorsky KPI and SPring-8 on the base of Memorandum of Understanding since 29th July 2019.

The authors would like to thank Dr. O. Dubikovskiy for his support with SIMS experiments.

REFERENCES

1. C. Nacereddine, A. Layadi, A. Guittoum, S. M. Cherif, T. Chauveau, D. Billet, J. Ben Youssef, A. Bourzami, and M. H. Bourahli, *Mater. Sci. Eng.: B*, **136**, Iss. 2–3: 197 (2007).
2. S. Tepner, N. Wengenmeyr, M. Linse, A. Lorenz, M. Pospischil, and F. Clement, *Adv. Mater. Technol.*, **5**, No. 10: 2000654 (2020).
3. A. U. Rehman and S. H. Lee, *Crystalline Silicon Solar Cells with Nickel/Copper Contacts (Solar Cells New Approaches and Reviews)* (Ed. Leonid A. Kosyachenko) (IntechOpen: 2015).

4. M. Mebarki and A. Layadi, *Materials Research Express*, **6**, No. 11: 115505 (2019).
5. B. Phua, X. Shen, P.C. Hsiao, C. Kong, A. Stokes, and A. Lennon, *Solar Energy Materials and Solar Cells*, **215**: 110638 (2020).
6. J. Colwell, P.C. Hsiao, X. Shen, W. Zhang, X. Wang, S. Lim, and A. Lennon, *Solar Energy Materials and Solar Cells*, **174**: 225 (2018).
7. H. Ono, T. Nakano, and T. Ohta, *Appl. Phys. Lett.*, **64**, No. 12: 1511 (1994).
8. Jian Li, J. W. Mayer, and E. G. Colgan, *J. Appl. Phys.*, **70**, No. 5: 2820 (1991).
9. J. Cho, H. S. Radhakrishnan, R. Sharma, M. R. Payo, M. Debucquoy, A. Van der Heide, I. Gordon, J. Szlufcik, and J. Poortmans, *Solar Energy Materials and Solar Cells*, **206**: 110324 (2020).
10. A. Tynkova, S. Sidorenko, S. Voloshko, A. R. Rennie, and M. A. Vasylyev, *Vacuum*, **87**: 69 (2013).
11. I. A. Vladymyrskyi, M. V. Karpets, F. Ganss, G. L. Katona, D. L. Beke, S. I. Sidorenko, T. Nagata, T. Nabatame, T. Chikyow, G. Beddies, M. Albrecht, and Iu. M. Makogon, *J. Appl. Phys.*, **114**, No. 16: 164314 (2013).
12. I. O. Kruhlov, L. M. Kapitanchuk, T. Ishikawa, S. I. Sidorenko, and S. M. Voloshko, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **43**, No. 2: 183 (2021) (in Ukrainian).
13. S. K. Kurinec, I. Toor, Y. K. Chao, H. Shillingford, P. Holloway, S. Ray, K. Beckham, *Thin Solid Films*, **162**: 247 (1988).
14. A. K. Orlov, O. O. Zhabynska, I. A. Vladymyrskyi, S. M. Voloshko, S. I. Sidorenko, K. Kato, and T. Ishikawa, *Thin Solid Films*, **658**: 12 (2018).
15. Y. Tran and C. D. Wright, *J. Magn. Magn. Mater.*, **331**: 216 (2013).
16. K. Kato, Y. Tanaka, M. Yamauchi, K. Ohara, and T. Hatsui, *J. Synchrotron Rad.*, **26**: 762 (2019).
17. M. E. Straumanis and L. S. Yu, *Acta Cryst. Section A: Crystal Physics, Diffraction, Theoretical and General Crystallography*, **25**, No. 6: 676 (1969).
18. D. Fuks, S. Dorfman, Y. F. Zhukovskii, E. A. Kotomin, and A. M. Stoneham, *Surf. Sci.*, **499**, Iss. 1: 24 (2002).
19. S. I. Sidorenko, S. M. Voloshko, and M. A. Vasiliev, *Defect and Diffusion Forum*, **156**: 215 (1998).
20. S. M. Voloshko, S. I. Sidorenko, and I. N. Makeeva, *Phys. Metals*, **14**, No. 10: 1136 (1995).
21. S. M. Voloshko, S. I. Sidorenko, and I. N. Makeeva, *Functional Materials*, **2**, No. 4: 453 (1995).
22. J. Häglund, A. F. Guillermet, G. Grimvall, and M. Körling, *Phys. Rev. B*, **48**, No. 16: 11685 (1993).
23. S. A. Firstov, N. A. Krapivka, M. A. Vasiliev, S. I. Sidorenko, and S. M. Voloshko, *Powder Metall. Met. Ceram.*, **55**, No. 7–8: 458 (2016).
24. A. K. Orlov, I. O. Kruhlov, O. V. Shamis, I. A. Vladymyrskyi, I. E. Kotenko, S. M. Voloshko, S. I. Sidorenko, T. Ebisu, K. Kato, H. Tajiri, O. Sakata, and T. Ishikawa, *Vacuum*, **150**: 186 (2018).
25. P. Scherrer, *Kolloidchemie Ein Lehrbuch* (Berlin, Heidelberg: Springer: 1912), p. 387 (in German).
26. N. W. Ashcroft and A. R. Denton, *Phys. Rev. A*, **43**, No. 6: 3161 (1991).
27. B. Hugsted, L. Buene, T. Finstad, O. Lønsjø, and T. Olsen, *Thin Solid Films*, **98**, No. 2: 81 (1982).

28. A. I. Oleshkevych, A. M. Gusak, S. I. Sidorenko, and S. M. Voloshko, *Ukr. J. Phys.*, **55**, No. 9: 1005 (2010) (in Ukrainian).
29. G. Guisbiers and M. José-Yacaman, *Use of Chemical Functionalities to Control Stability of Nanoparticles* (Molecular Sciences and Chemical Engineering: 2018).
30. M. V. Akdeniz and A. O. Mekhrabov, *Acta Mater.*, **46**, Iss. 4: 1185 (1998).
31. Y. Çelik, W. Escoffier, M. Yang, E. Flahaut, and E. Suvacı, *Carbon*, **109**: 529 (2016).
32. S. I. Sidorenko, S. M. Voloshko, S. O. Zamulko, and A. I. Oleshkevych, *Diffusion and Interfaces Stability in Thin Film Metallic Contacts* (Kyiv: Naukova Dumka: 2014), p. 199.

METALLIC SURFACES AND FILMS

PACS numbers: 43.35.+d, 61.72.Ff, 81.65.-b, 83.10.-y, 83.10.Tv

Модифікація поверхневих шарів неіржавійної криці 40X13 комбінацією термічного й ультразвукового ударного впливу

А. П. Бурмак*, М. О. Васильєв**, В. І. Закієв*^{***}, М. М. Ворон****,
С. М. Волошко*

**Національний технічний університет України*
«Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського»,
просп. Перемоги, 37,
03056 Київ, Україна

***Інститут металофізики ім. Г. В. Курдюмова НАН України,*
бульв. Академіка Вернадського, 36,
03142 Київ, Україна

****Національний авіаційний університет,*
просп. Любомира Гузара, 1,
03058 Київ, Україна

*****Фізико-технологічний інститут металів та сплавів НАН України,*
бульв. Академіка Вернадського, 34/1,
03142 Київ, Україна

Досліджено вплив ультразвукового ударного оброблення (УЗУО) на мікротвердість, шерсткість та структурно-фазовий стан поверхні неіржавійної криці 40X13. Ультразвукове ударне оброблення проводилось у інертному середовищі за однакових умов — амплітуда торця концентратора

Corresponding author: Andriy Petrovych Burmak
E-mail: abyrmak@gmail.com

**National Technical University of Ukraine ‘Igor Sikorsky Kyiv Polytechnic Institute’,*
37 Peremohy Ave., UA-03056 Kyiv, Ukraine

***G. V. Kurdyumov Institute for Metal Physics, N.A.S. of Ukraine,*
36 Academician Vernadsky Blvd., UA-03142 Kyiv, Ukraine

****National Aviation University,*
1 Lyubomyr Huzar Ave., UA-03058 Kyiv, Ukraine

*****Physico-Technological Institute of Metals and Alloys, N.A.S. of Ukraine,*
34/1 Academician Vernadsky Blvd., UA-03142 Kyiv, Ukraine

Citation: A. P. Burmak, M. O. Vasylyev, V. I. Zakiev, M. M. Voron, and S. M. Voloshko, Modification of Surface Layers of Stainless Steel AISI 420 by a Combination of Thermal and Ultrasonic Impact Influence, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **44**, No. 6: 751–768 (2022) (in Ukrainian). DOI: [10.15407/mfint.44.06.0751](https://doi.org/10.15407/mfint.44.06.0751)

складала 25 мкм, тривалість оброблення — 50 с. Використовувались зразки криці 40X13 після пом'якшувального термічного оброблення за температури відпалу 800°C (вихідний стан), після додаткового гартування від температури 980°C з охолодженням в маслі та після додаткового гартування від температури 980°C з наступним відпалом за температури 250°C упродовж години. Встановлено, що після УЗУО відбувається суттєве зменшення шерсткості модифікованої поверхні та підвищення мікротвердості для усіх випадків порівняно із вихідним станом. З врахуванням даних рентгеноструктурної аналізи обговорюються основні чинники деформаційного зміцнення поверхневих шарів неіржавійної криці 40X13 за різних комбінацій термічного та ультразвукового ударного впливу.

Ключові слова: неіржавійна криця, морфологія поверхні, мікротвердість, деформація, напруження, ультразвукове ударне оброблення, термічний вплив.

The influence of ultrasonic impact treatment (UIT) on the microhardness, roughness and structural-phase state of the stainless steel AISI 420 surface is studied. Ultrasonic impact treatment is performed in an inert environment under the same conditions—the amplitude of the hub end was 25 μm , the duration of treatment—50 s. Samples of AISI 420 steel are used after softening heat treatment at annealing temperature of 800°C (initial state), after additional hardening from 980°C with oil cooling and after additional hardening from 980°C with subsequent annealing at 250°C for one hour. As established, that after UIT there is a significant decrease in the roughness of the modified surface and increase in microhardness for all cases compared to the initial state. Taking into account the data of x-ray diffraction analysis the main factors of stainless steel AISI 420 surface layers deformation hardening under different combinations of thermal and ultrasonic impact are discussed.

Key words: stainless steel, surface morphology, microhardness, deformation, stress, ultrasonic impact treatment, heat treatment.

(Отримано 31 березня 2022 р.; остаточн. варіант — 27 квітня 2022 р.)

1. ВСТУП

Криця 40X13 відноситься до неіржавійних, корозійностійких криць мартенситного класу і є поширеним матеріалом у різних галузях машинобудування. Дана криця має задовільне співвідношення характеристик міцності та пластичності, хорошу корозійну стійкість в атмосфері повітря, у воді та в ряді кислот і використовується для виготовлення більшості сучасних деталей машин, елементів конструкцій та технологічного інструменту. Як правило, такі вироби працюють в умовах циклічних навантажень, під впливом окисних процесів, а також абразивних частинок [1]. При цьому максимальні пошкодження та інтенсивне зношування локалізовані у поверхневому робочому шарі деталі. У зв'язку з цим особливої акту-

альности набувають завдання поверхневого зміцнення за рахунок зміни властивостей та механізму зношування тільки робочого шару.

Опір руйнуванню під впливом циклічної деформації є однією з найважливіших механічних характеристик конструкційних матеріалів [2]. Оскільки втомна тріщина зароджується як правило в поверхневих шарах, то модифікація поверхні є перспективним засобом збільшення витривалості таких матеріалів [3–5]. Численні дослідження впливу інтенсивної пластичної деформації на втому конструкційних матеріалів свідчать про те, що формування зміцненого шару уповільнює кінетику зародження та поширення втомних тріщин і суттєво підвищує циклічну довговічність [6]. Іншим негативним фактором є накопичення напружень розтягу в поверхневих шарах та в зоні зварних з'єднань. Залишкові напруження розтягу можуть зрештою привести до процесів руйнування в зварних конструкціях, включаючи крихке руйнування, втому, корозійне розтріскування під напругою і розтріскування від повторного нагрівання [7].

Тому оптимізація поверхневої структури має значення для поліпшення терміну служби металевих матеріалів. При цьому великий інтерес представляють нові технології оброблення металевих поверхонь, засновані на створенні нанокристалічної структури в поверхневих шарах [8]. Зазвичай інтенсивна пластична деформація (ІПД) здійснюється за умов високого тиску з великою гідростатичною компонентою, що перешкоджає руйнуванню зразка. Найбільш поширеними в даний час способами створення гігантських величин деформації масивних металевих матеріалів є кручення під тиском в камері Бріджмена, рівно-каналне кутове пресування, гвинтова екструзія та акумульована прокатка. Однак ці методи не мають технологічної перспективи та використовуються в основному для дослідження експериментальних зразків.

Найбільш високими технологічними можливостями володіє метода ІПД заснована на використанні ультразвукових коливань [9]. Ультразвукове ударне оброблення є ефективною методою зниження величини залишкових розтягувальних напружень в деталях, конструкціях та зварних з'єднаннях. В процесі УЗУО ультразвукові коливання з низькою амплітудою та високою частотою через бойки безперервно впливають на поверхню металу, що обумовлює пластичну деформацію поверхневого шару, зменшення розміру зерна, деформацію кристалічної ґратниці. Крім того, в процесі УЗУО шкідливі залишкові напруження розтягу ефективно усуваються і в поверхневому шарі формуються стискальні напруження, які сприяють підвищенню мікротвердості, стійкості до корозії та втомної міцності [7–10].

Сучасні погляди на еволюцію мікроструктури конструкційних та інструментальних вуглецевих криць під час інтенсивної пластичної

деформації поверхні представлені в огляді [11]. Зазначимо кілька вдалих прикладів модифікації поверхні криць. Так в роботі [7] показано ефективність застосування ультразвукового ударного оброблення для зниження величини розтягувальних напружень в зварних з'єднаннях труб з неіржавійної криці 316L. УЗУО проведена ударною головкою з 4 бойками. Визначення рівня залишкових напружень проведено методом $\sin^2\psi$ на рентгенівському дифрактометрі. Застосування УЗУО дозволило знизити рівень напружень в зварному з'єднанні з ~ 200 МПа до ~ 600 МПа. Глибина модифікованого шару досягала при цьому 4 мм.

В роботі [12] поверхню зразків неіржавійної криці SUS301 зміцнено методом УЗУО з використанням кульок. Це уможливило зменшити шерсткість вихідної поверхні з 0,708 мкм до 0,024 мкм та підвищити мікротвердість з 269,52 HV до 415,38 HV. Авторами [13] УЗУО застосовано для зміцнення поверхні неіржавійної криці 316. В процесі УЗУО значення R_a і R_z зменшується з 4,04 мкм і 25,7 мкм у вихідному стані до 0,578 мкм і 4,4 мкм, відповідно. Мікротвердість поверхні зростає з 2,4 ГПа до 4,5 ГПа. Величина залишкових напружень в поверхневому шарі зменшується з ~ 180 МПа до ~ 700 МПа.

Мікротвердість та структурно-фазовий стан аустенітної криці 12X18H10T після інтенсивної пластичної деформації за допомогою УЗУО впродовж різного часу та у різних середовищах досліджено в роботі [14]. Встановлено, що після УЗУО на повітрі та в аргоні спостерігається формування нетипових комірчастих структур з розміром комірок 200–700 нм, що забезпечує величину мікротвердості на рівні ~ 4 ГПа.

У дослідженні [15] показано ефективність застосування УЗУО для підвищення мікротвердості та ступеня деформації неіржавійної криці AISI 321. В процесі оброблення в інертному середовищі мікротвердість зростає з 1,8 ГПа у вихідному стані до 4,7 ГПа після 250 с оброблення. Товщина зміцненого шару становить 150–250 мкм в залежності від тривалості оброблення.

Метою даної роботи є дослідження еволюції мікротвердості, морфології поверхні, залишкових макронапружень, ступеню деформації, структурно-фазового складу неіржавійної криці 40X13 після різних комбінацій термічного та ультразвукового ударного впливу.

2. МАТЕРІАЛ І ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНА МЕТОДИКА

В якості матеріалу для дослідження обрано неіржавійну криця 40X13 наступного хемічного складу (% ваг.): Fe $\sim 84\%$; Cr $\sim 12\text{--}14\%$; C $\sim 0,35\text{--}0,44\%$; Si $\sim 0,6\%$; Mn $\sim 0,6\%$; Ni $\sim 0,6\%$; S $\sim 0,025\%$. Зразки для дослідження виготовлялися з гарячекатаних прутків і

піддавалися пом'якшувальному термічному обробленню у вигляді відпалу за температури 800°C (вихідний стан). Після такого відпалу криця має зернисту структуру, що складається із суміші феритної матриці, зернистого перліту з великими та дрібними частинками карбіду $(\text{Cr, Fe})_{23}\text{C}_6$ [16]. При цьому спостерігається чергування крупнозернистого та дрібнозернистого фериту. У великих (до 10 мкм) феритних зернах поліедричної форми карбідні виділення, розміром приблизно 200 нм, розташовуються, як правило, поблизу або за межами зерен. Карбіди більшого розміру 1,5 мкм розташовуються за межами зерен. Також наявна невелика кількість карбідів усередині дрібних зерен фериту.

Також досліджувалися зразки криці 40X13 після додаткового гартування від температури 980°C з охолодженням в маслі та після гартування від температури 980°C з наступним відпалом за температури 250°C упродовж години (табл. 1, режими 1, 3, 5).

Автори [17] показали, що на відміну від зернистої структури криці 40X13 після пом'якшувального відпалу, внаслідок загартування криця набуває високої твердості завдяки утворенню мартенситу з незначною кількістю карбідів, що не розчинилися, і залишкового аустеніту. У матриці мартенсит має переважно голчасту форму, проте зустрічається також мартенсит у вигляді пластин шириною менше 200 нм. Нерозчинені карбіди мають переважно форму глобулів, максимальний розмір яких не перевищує 500 нм. Поряд із великими частинками карбідів спостерігаються також дуже дрі-

ТАБЛИЦЯ 1. Режими термічного та комбінованого оброблення.

TABLE 1. Conditions of heat and combined treatment.

№	Умови оброблення	Позначення
1	Пом'якшувальне термічне оброблення за температури відпалу 800°C — вихідний стан	ТО-1
2	Пом'якшувальне термічне оброблення за температури відпалу 800°C та УЗУО в інертному середовищі ($\tau = 50$ с, $A = 25$ мкм)	ТО-1 + УЗУО
3	Гартування від температури 980°C з охолодженням в маслі	ТО-2
4	Гартування від температури 980°C з охолодженням в маслі та наступним УЗУО в інертному середовищі ($\tau = 50$ с, $A = 25$ мкм)	ТО-2 + УЗУО
5	Гартування від температури 980°C з наступним відпалом за температури 250°C упродовж години	ТО-3
6	Гартування від температури 980°C з наступним відпалом за температури 250°C упродовж години та УЗУО в інертному середовищі ($\tau = 50$ с, $A = 25$ мкм)	ТО-3 + УЗУО

бні частинки, що мають витягнуту форму. У стані відпущеного мартенситу нанорозмірні частинки карбїду розміром до 40 нм розподіляються по межах мартенситних пластин [18]. Такі частинки розміром до 10 нм виявлені також по дислокаціях всередині мартенситних кристалів.

Ультразвукове ударне оброблення проводилось у інертному середовищі для запобігання окисненню [19] на приладі УЗГ-300 за методикою [20, 21]. Для УЗУО використовувались зразки у вигляді циліндрів діаметром 10 мм і висотою 5 мм ($\pm 0,1$ мм). Амплітуда торця концентратора складала $A = 25$ мкм, тривалість оброблення — 50 с. В процесі навантаження зразок одержував 10^4 – 10^5 ударів. Для УЗУО використовувались зразки після пом'якшувального термічного оброблення за температури відпалу 800°C , після додаткового гартування від температури 980°C з охолодженням в маслі та після гартування від температури 980°C з наступним відпалом за температури 250°C упродовж години (табл. 1, комбіновані режими 2, 4, 6).

Вимірювання мікротвердості поверхні зразків проводилось на приладі ПМТ-3 за методом Віккерса із навантаженням 100 г.

Крім того, фізико-механічні властивості поверхні зразків досліджувались методом інструментального індентування з використанням універсального мікро/нано твердоміра «Micron-Gamma» [22–24]. Корекція експериментальних діаграм індентування здійснювалась згідно методики, що описана у роботі [25]. Аналіза і оброблення зареєстрованих діаграм індентування для визначення твердості H_{IT} й контактного модулю пружності E проводились за методикою, що детально викладена у [26].

Для оцінки морфології поверхневих шарів криці використовували інтерференційний профілометр «Micron-Alpha» [27]. Прилад уможлиблює безконтактною методом реєструвати тривимірну топографію поверхні з нанометровою роздільною здатністю. Розміри поля сканування становили 210×150 мкм.

Рентгеноструктурна фазова аналіза проведена з використанням дифрактометру Rigaku Ultima IV, з графітовим монохроматором, у мідному випромінюванні ($\lambda_{\text{CuK}\alpha} = 0,15418$ нм) з використанням схеми фокусування за Бреґгом–Брентано. Умови проведення досліджень: інтервал кутів $2\theta = 20^\circ$ – 120° , крок зйомки — $0,04^\circ$, час вимірювання в точці — 2 с; тривалість зйомки одного зразка — 90 хв.

Аналіза одержаних рентгенівських спектрів та проведення кількісної та якісної фазової аналізи здійснено з використанням програмного забезпечення PDXL, міжнародної бази даних дифракції ICDD (PDF-2) та відкритої бази кристалографічних даних COD. Розрахунок розміру областей когерентного розсіяння (ОКР) та ступеня деформації кристалічної ґратниці проведено за методом Холдера–Ваґнера. Кількісна фазова аналіза проведена методом RIR (Reference Intensity Ratio), яка полягає у порівнянні відношення

інтенсивностей найбільш сильних рефлексів фази і корунду в їх суміші з масовими частками.

Визначення величини напружень 1-го роду проведено методом $\sin^2\psi$ з використанням дифрактометру Rigaku Ultima IV. Для аналізу використано дифракційний максимум (211), значеннях кутів $\psi = 0, -10, -20, -30, -38$. Оброблення одержаних спектрів проведено з використанням програмного забезпечення Rigaku. Для розрахунку величини напружень 1-го роду використано значення модуля Юнга $E = 214$ ГПа та коефіцієнта Пуассона $\mu = 0,3$.

3. РЕЗУЛЬТАТИ ТА ЇХ ОБГОВОРЕННЯ

На рисунку 1, а наведено мікротвердість неіржавійної криці 40X13 після різних режимів термічного та комбінованого оброблення визначену за методом Віккерса. У вихідному стані мікротвердість становить 2 ГПа (ТО-1), після гартування зростає до 7,2 ГПа (ТО-2), а після гартування з відпалом зменшується до 5,8 ГПа (ТО-3). Після комбінованого оброблення максимальне зростання мікротвердості до 13 ГПа фіксується для зразка, який зазнав гартування з наступним УЗУО (ТО-2 + УЗУО).

Саме для цього випадку фіксується і максимальний рівень залишкових напружень понад 4 ГПа (рис. 1, б). Під час застосування усіх видів комбінованого оброблення напруження в поверхневому шарі зростають порівняно з вихідним станом. Можна зробити ви-

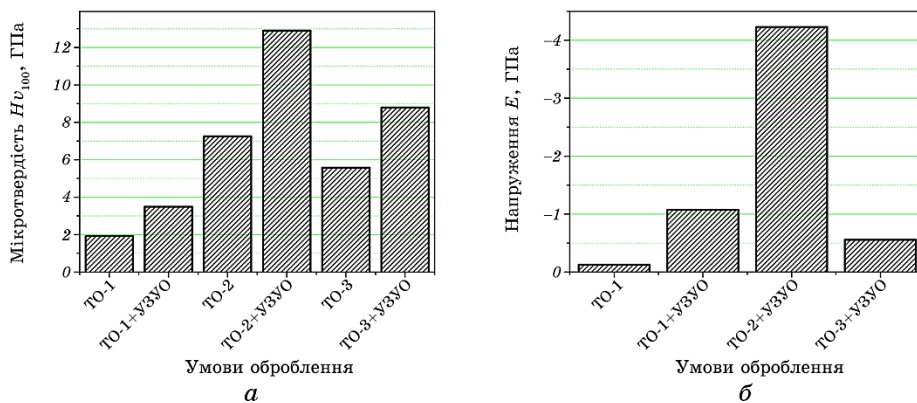


Рис. 1. Зміна мікротвердості (а) та залишкових напружень (б) зразків з неіржавійної криці 40X13 після різних режимів термічного оброблення та УЗУО в інертному середовищі упродовж 50 с.

Fig. 1. Change of microhardness (a) and residual stresses (b) of AISI 420 samples after different modes of heat treatment and UIT in an inert environment for 50 s.

сненок, що формування стискувальних напружень в поверхневому шарі є одним з важливих факторів зміцнення за даних умов оброблення. Відомо, що саме напруження стиснення дають змогу підвищити тріщиностійкість та втомну міцність матеріалів після УЗУО.

На рисунку 2 представлені результати щодо тривимірного рельєфу поверхні криці 40Х13 у вихідному стані, після УЗУО в аргоні, після гартування та УЗУО в аргоні, після гартування з відпалом та УЗУО в аргоні.

Для кількісної оцінки рельєфу сформованих поверхонь використовували параметри шерсткості R_a та R_z . Розрахунок параметрів шерсткості проводили за п'ятьма паралельно розташованими базовими лініями в межах зареєстрованих ділянок. Усереднені значення визначених параметрів наведені в табл. 2.

Як можна бачити з наведених результатів, за всіх умов обробки

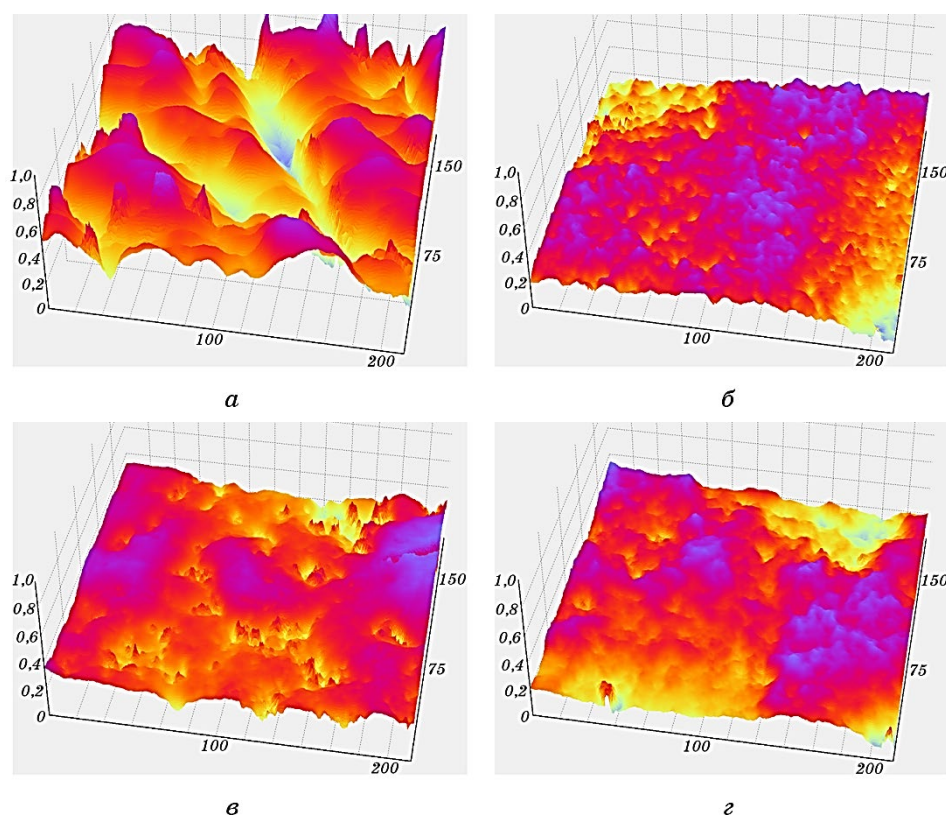


Рис. 2. Тривимірні топографії поверхні зразків неіржавійної криці 40Х13: *а* — ТО-1; *б* — ТО-1 + УЗУО; *в* — ТО-2 + УЗУО; *г* — ТО-3 + УЗУО.

Fig. 2. Three-dimensional topographies of the surface of AISI 420 stainless steel samples: *a*—HT-1; *б*—HT-1 + UIT; *в*—HT-2 + UIT; *г*—HT-3 + UIT.

відбувається зменшення шерсткості поверхні порівняно з вихідним станом, що може підвищити довговічність. В процесі УЗУО за рахунок пластичної деформації вихідних макронерівностей, набутих в результаті токарного оброблення, формується поверхня, що має виступи та западини незначної висоти, тобто спостерігається достатньо рівномірний рельєф деформованого поверхневого шару. У вихідному стані шерсткість становить $R_a = 0,093$ мкм, $R_z = 0,267$ мкм. Після УЗУО в інертному середовищі за тривалості оброблення 50 с ці параметри досягають мінімальних значень — $R_a = 0,023$ мкм та $R_z = 0,065$ мкм.

Після гартування від температури 980°C з охолодженням в маслі та наступним УЗУО в інертному середовищі формується дещо інший характер поверхневого рельєфу криці. Так, на поверхні спостерігаються западини глибиною $0,1\text{--}0,2$ мкм. Западини можуть суттєво впливати на втомну міцність деталей чи готових виробів, оскільки вони є концентраторами напружень, а коефіцієнт концентрації напружень залежить від радіусу западини та висоти нерівностей поверхні. Усереднені значення параметрів шерсткості при цьому становлять — $R_a = 0,032$ мкм та $R_z = 0,096$ мкм.

Якщо після гартування від температури 980°C застосувати відпал за температури 250°C упродовж години, а після цього провести УЗУО в аргоні, то нерівності поверхні згладжуються і параметри R_a та R_z приблизно відповідають тим значенням, що спостерігаються після УЗУО вихідного зразка. Така оптимізація рельєфу поверхне-

ТАБЛИЦЯ 2. Параметри шерсткості поверхні криці 40X13 у вихідному стані та після різних комбінацій термічного та ультразвукового ударного впливу.

TABLE 2. Surface roughness parameters of AISI 420 stainless steel in the initial state and after various combinations of thermal and ultrasonic impact treatment.

Режими оброблення	R_a , мкм	R_z , мкм
Пом'якшувальне термічне оброблення за температури відпалу 800°C — вихідний стан	0,093	0,267
Пом'якшувальне термічне оброблення за температури відпалу 800°C та УЗУО в інертному середовищі ($\tau = 50$ с, $A = 25$ мкм)	0,023	0,065
Гартування від температури 980°C з охолодженням в маслі та наступним УЗУО в інертному середовищі ($\tau = 50$ с, $A = 25$ мкм)	0,032	0,096
Гартування від температури 980°C з наступним відпалом за температури 250°C упродовж години та УЗУО в інертному середовищі ($\tau = 50$ с, $A = 25$ мкм)	0,023	0,058

вих шарів та зменшення параметрів шерсткості поверхні може підвищити довговічність та втомну міцність виробів [28].

На рисунку 3, *а* наведені зареєстровані діаграми індування зразків неіржавійної криці 40Х13 у вихідному стані та після різних режимів термічного оброблення з наступним УЗУО. Для прикладу представлені також мікрофотографії відбитків індентора Берковича (рис. 3, *б, в*) на поверхні вихідного зразка після УЗУО та зразка після гартування від температури 980°C з охолодженням в маслі з наступним УЗУО. Випробування проводились з навантаженням 50 сН зі швидкістю навантаження 5 сН/с не менше шести разів для кожного зразка з кроком між відбитками 50 мкм.

В таблиці 3 наведено механічні характеристики за результатами індування з використанням індентора Берковича (середні значення твердості H_{IT} , контактного модулю пружності E та розбіжність значень у %) зразків неіржавійної криці 40Х13 у вихідному стані, після УЗУО в інертному середовищі та після різних режимів термічного оброблення з наступним УЗУО. Середні значення визна-

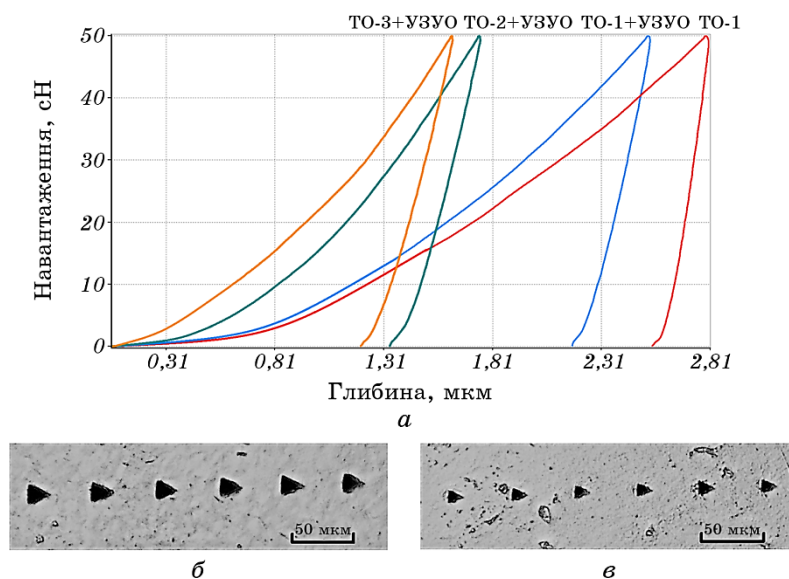


Рис. 3. Типові діаграми індування зразків неіржавійної криці 40Х13 у вихідному стані та після різних режимів комбінованого оброблення (*а*); мікрофотографії відбитків індентора на поверхні криці у вихідному стані, після УЗУО (*б*) та після гартування в маслі та УЗУО (*в*).

Fig. 3. Typical indentation diagrams of AISI 420 stainless steel samples in the initial state and after different modes of combined processing (*a*); photomicrographs of indenter impressions on the steel surface in the initial state, after UIT (*b*) and after hardening in oil and UIT (*c*).

ТАБЛИЦЯ 3. Механічні характеристики за результатами інструментального індентування.**TABLE 3.** Mechanical characteristics based on the results of instrumental indentation.

Режими оброблення	H_{IT} , ГПа	H_{IT} , %	E , ГПа	E , %
ТО-1 (вихідний стан)	2,878	3,2	195	4,3
ТО-1 + УЗУО	3,754	7,3	190	4%
ТО-2	7,5	6,9	185	5,7%
ТО-2 + УЗУО	10,722	6,5	187	7,2%
ТО-3	6,2	5,2	198	4,7
ТО-3 + УЗУО	8,6	6,4	197	6,8%

чалися за результатами щонайменше 6-ти вимірювань в областях з найменшою шерсткістю поверхні.

Експериментальні результати свідчать, що УЗУО обумовлює зміцнення поверхневих шарів зразків неіржавійної криці як у вихідному стані, так і після різних видів термічного оброблення. При цьому, УЗУО не впливає на значення модулю пружності, які залишаються майже незмінними і лише незначно зменшуються на 8–10 ГПа для загартованого зразка (ТО-2, ТО-2 + УЗУО). Середнє значення твердості H_{IT} зростає 1,3 рази після УЗУО зразка у вихідному стані (ТО-1 + УЗУО). За умови УЗУО тих зразків, які пройшли попереднє термічне оброблення значення твердості H_{IT} зростають приблизно в 1,34–1,42 рази (ТО-2 + УЗУО, ТО-3 + УЗУО). Порівняно із вихідним станом (ТО-1) найбільший ефект зміцнення в 3,7 разів спостерігається після УЗУО загартованого зразка (ТО-2 + УЗУО).

Таким чином дослідження зразків неіржавійної криці 40X13 методом інструментального індентування підтверджують ефект зміцнення поверхневих шарів внаслідок УЗУО. Одержані дані задовільно узгоджуються із тими, що визначені за методом Віккерса (рис. 1). Також слід відзначити, що УЗУО в інертному середовищі суттєво не впливає на модуль пружності неіржавійної криці.

Розрахована за даними рентгеноструктурної аналізи ступінь деформації кристалічної ґратниці α -Fe добре корелює із значеннями мікротвердості і зростає з 0,08% у вихідному стані до 0,4% після комбінації гартування з УЗУО (рис. 4, а). Після гартування з наступним відпадом та УЗУО це значення є дещо меншим — 0,3%. Тому значне збільшення мікротвердості після УЗУО криці, яка піддається гартуванню, може обумовлюватись суттєвою деформацією кристалічної ґратниці α -Fe. Домінуючим фактором зміцнення під час УЗУО в інертному середовищі зразка у вихідному стані є збільшення вмісту карбідних фаз Fe_3C , $Cr_{23}C_6$ з 9% ваг. до 17% ваг.

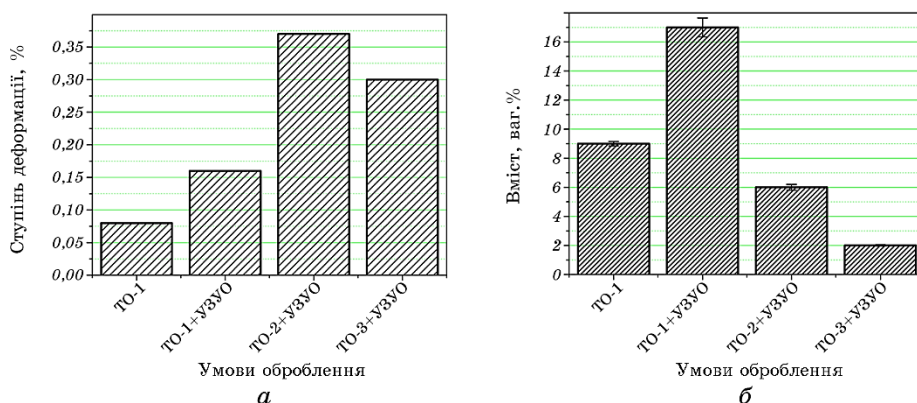


Рис. 4. Ступінь деформації кристалічної ґратниці (а) та вміст карбідних фаз Fe_3C , Cr_{23}C_6 (б) в неіржавійній криці 40Х13 після різних режимів термічного оброблення та УЗУО в інертному середовищі ($\tau = 50$ с, $A = 25$ мкм).

Fig. 4. The lattice strain (a) and the content of carbide phases Fe_3C , Cr_{23}C_6 (b) in AISI 420 stainless steel after different modes of heat treatment and UIT in an inert environment ($\tau = 50$ s, $A = 25$ μm).

після 50 с такого оброблення. Після застосування додаткового термічного оброблення вихідного зразка та наступного УЗУО такого ефекту не спостерігається — кількість карбідних фаз зменшується.

Аналіза дифрактограм (рис. 5, 6) показує збільшення параметра кристалічної ґратниці α -фази від $a = 0,2864$ нм до $a = 0,2870$ нм у поверхневому інтенсивно деформованому шарі після УЗУО вихідного зразка. Спостережуване збільшення фізичного розширення дифракційних ліній від матричної α -фази скоріш за все обумовлюється великою кількістю дефектів (високою густиною дислокацій) та деформаційною фрагментацією субзеренної структури (зменшенням областей когерентного розсіювання). Розмір ОКР α -фази у поверхневому шарі криці 40Х13 після УЗУО зменшується з 496 нм (вихідний стан) до 298 нм, а розмір ОКР-фази Fe_3C — з 426 нм до 124 нм. Формування загартованого мартенситу обумовлює зміну вмісту вуглецю та суттєву деформацію ґратниці. Після УЗУО в аргоні загартованої криці період ґратниці α -Fe збільшується до 0,2878 нм, а розмір ОКР зменшується до 203 нм.

Після гартування та відпалу з наступним УЗУО поверхневий шар складається з подрібненого відпущеного мартенситу. У цьому модифікованому шарі основною є α -фаза Fe, кількість якої складає 98% (у вихідному стані 91%, а після УЗУО вихідного зразка — 83%). При цьому кількість карбідних фаз Fe_3C , Cr_{23}C_6 зменшується до 2% (у вихідному стані — 9%, після УЗУО — 17%). Розмір ОКР α -Fe складає 216 нм, а розмір ОКР-фази Fe_3C — 215 нм. Відзначається

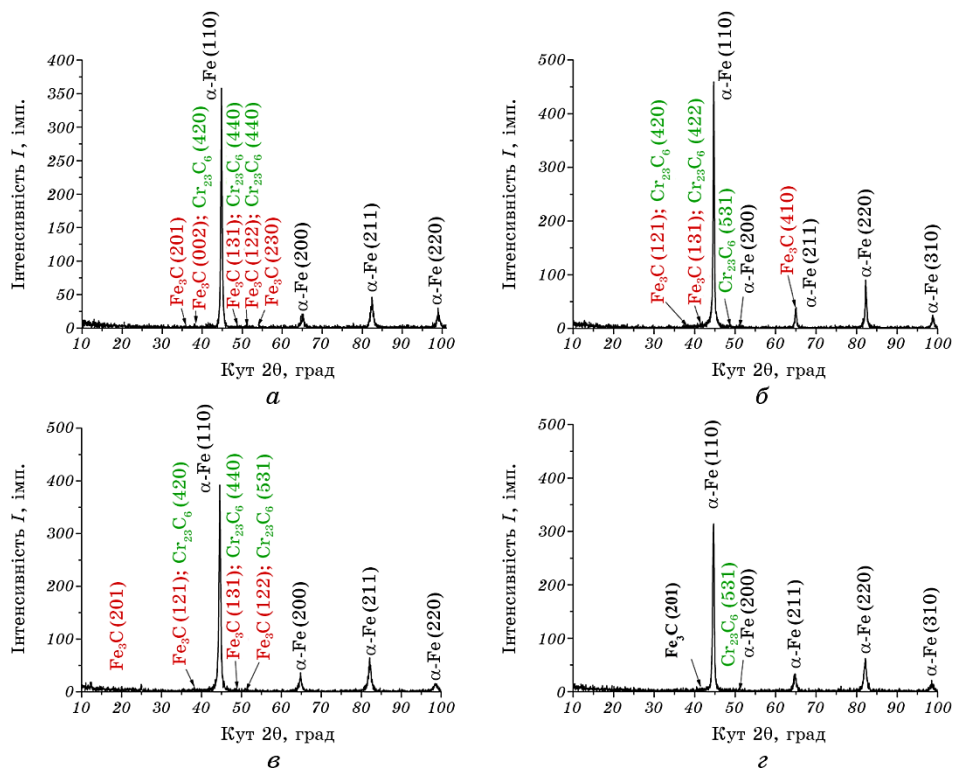


Рис. 5. Дифрактограми зразків неіржавійної криці 40X13: *а* — вихідний стан; *б* — після УЗУО в аргоні; *в* — після гартування від температури 980°C з охолодженням в маслі та УЗУО в аргоні; *г* — після гартування від температури 980°C з наступним відпалом за температури 250°C упродовж години та УЗУО в аргоні ($\tau = 50$ с, $A = 25$ мкм).

Fig. 5. XRD patterns of AISI 420 stainless steel samples: *a*—initial state; *б*—after UIT in argon; *в*—after hardening from a temperature of 980°C with cooling in oil and UIT in argon; *г*—after quenching from a temperature of 980°C, followed by annealing at room temperature 250°C for an hour and UIT in argon ($\tau = 50$ s, $A = 25$ μm).

незначне збільшення параметра ґратниці $\alpha\text{-Fe}$ до 0,2879 нм порівняно із загартованим станом та зменшення інтенсивності рефлексів карбіду. Останній ефект можна пояснити частковим розчиненням карбіду з проникненням атомів Карбону та Хрому до ґратниці α -фази. Цьому сприяє також виникнення стискувальних напруг у поверхневому шарі після УЗУО [29].

Як випливає з літературних даних, основною фізичною причиною підвищення міцності низьколегованих криць з різною концентрацією вуглецю у процесі ІПД є формування наноструктури для

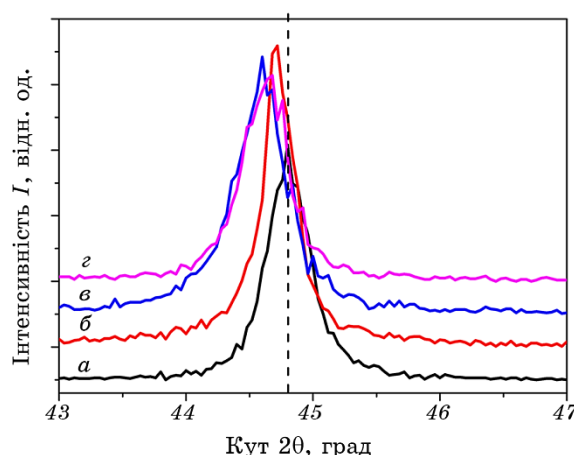


Рис. 6. Зміна положення дифракційного максимуму (110) α -Fe: *a* — вихідний стан зразка неіржавійної криці 40X13; *б* — після УЗУО в аргоні; *в* — після гартування від температури 980°C з охолодженням в маслі та УЗУО в аргоні; *г* — після гартування від температури 980°C з наступним відпадом за температури 250°C упродовж години та УЗУО в аргоні.

Fig. 6. Changing the position of the diffraction maximum (110) α -Fe: *a* — initial state; *б* — after UIT in argon; *в* — after hardening from a temperature of 980°C with cooling in oil and UIT in argon; *г* — after quenching from a temperature of 980°C, followed by annealing at room temperature 250°C for an hour and UIT in argon ($\tau = 50$ s, $A = 25$ μ m).

всіх фазових складових [30]. Це, по-перше, деформаційне руйнування вихідних зерен перліту, і, по-друге, утворення атмосфер Коттрелла навколо дислокацій високої густини та сегрегація атомів Карбону на субмежах після часткового руйнування та подрібнення карбідів. Дислокації у сильно деформованих зернах фериту на два порядки більше, ніж у вихідних зернах. Відомо, що дислокації сприяють розчиненню атомів Карбону у сусідніх прошарках фериту. Це пов'язано з тим, що енергія зв'язку між атомами С та Fe в цементиті нижча, ніж енергія взаємодії між атомом С та дислокацією. Отже, дислокації, що рухаються, можуть захоплювати атоми Карбону зі зменшенням розміру цементиту в процесі пластичної деформації з подальшим перетворенням його на ферит.

Наявність безлічі диспергованих частинок цементиту, які значно полегшують зародження дислокацій у фериті під час деформації, сприяє подрібненню зерен фериту. Накопичене багаторазове ковзання поступово подрібнює цементит до нанорозмірних частинок [31]. У зв'язку з цим можна припустити, що інтенсивна деформація поверхні легіваної криці 40X13 обумовлює формування суб- і нанокристалічної структури в зернах фериту, перліту і мартенситних

кристалах, подрібнення карбідних фаз, а також суттєве підвищення густини дислокацій. Всі ці фактори обумовлюють синергетичний ефект суттєвого збільшення мікротвердості поверхневого шару для всіх структурних станів дослідженої криці.

Більш докладні структурні дослідження будуть представлені у наступній роботі.

4. ВИСНОВКИ

Зразки неіржавійної криці 40X13 у різних станах після пом'якшувального термічного оброблення за температури відпалу 800°C (стан поставки), після додаткового гартування від температури 980°C з охолодженням в маслі та після додаткового гартування від температури 980°C з наступним відпалом за температури 250°C упродовж години піддавались впливу ультразвукового ударного оброблення в інертному середовищі (амплітуда торця концентратора складала 25 мкм, тривалість оброблення — 50 с).

Для усіх комбінацій термічного та ультразвукового ударного впливу спостерігається суттєве зменшення шерсткості модифікованої поверхні та підвищення мікротвердості порівняно із вихідним станом. Максимальне зростання мікротвердості до 13 ГПа фіксується для зразка, який зазнав гартування з наступним УЗУО. Саме для цього випадку фіксується і максимальний рівень залишкових напружень — понад 4 ГПа. З результатами вимірювань мікротвердості за Віккерсом якісно корелюють дані інструментального індентування.

За даними рентгеноструктурної аналізи визначено зміни параметру ґратниці та вмісту різних фаз, ступеню деформації кристалічної ґратниці, значень залишкових напружень стиснення та розмір ОКР. Синергетичний ефект суттєвого збільшення мікротвердості поверхневого шару в результаті УЗУО для всіх досліджених структурних станів криці 40X13 пов'язується із формуванням суб- і нанокристалічної структури в зернах фериту, перліту і мартенситних кристалах, подрібненням карбідних фаз, а також підвищенням густини дислокацій.

ПОДЯКА

Роботу виконано в рамках держбюджетної теми КПП ім. Ігоря Сікорського № 2405ф (0121U109752) «Структурно-фазові механізми керування комплексом поверхневих властивостей конструкційних і функціональних сплавів комбінованими тепловими, йонними та деформаційними впливами».

ЦИТОВАНА ЛІТЕРАТУРА

1. A. D. Koval, V. G. Efremenko, M. N. Brykov, M. I. Andrushchenko, R. A. Kulikovskii, and A. V. Efremenko, *J. Friction Wear*, **33**: 153 (2012).
2. В. А. Кукареко, *Обработка металлов. Материаловедение*, № 3 (68): 99 (2015).
3. M. Klesnil and P. Lukác, *Fatigue of Metallic Materials. Materials Science. 2nd Rev. Ed.* (Amsterdam: Elsevier Science Publ.: 1992), vol. 71.
4. В. М. Финкель, *Физические основы торможения разрушения* (Москва: Металлургия: 1977).
5. D. L. Davidson and J. Lankford, *International Materials Reviews*, **37**: 45 (1992).
6. А. В. Белый, В. А. Кукареко, А. Патеюк, *Инженерия поверхностей конструкционных материалов концентрированными потоками ионов азота* (Минск: Белорусская наука: 2007).
7. Chuan Liu, Changhua Lin, Weihua Liu, Shuang Wang, Yuefeng Chen, Jianfei Wang, and Jianxin Wang, *International Journal of Pressure Vessels and Piping*, **192**: 104420 (2021).
8. E. S. Statnikov, O. V. Korolkov, and V. N. Vityazev, *Ultrasonics*, **44**, Suppl. 1: e533 (2007).
9. B. N. Mordyuk, S. M. Voloshko, V. I. Zakiev, A. P. Burmak, and V. V. Mohylko, *J. Mater. Eng. Perform.*, **30**: 1780 (2021).
10. М. О. Васильєв, Б. М. Мордюк, С. І. Сидоренко, С. М. Волошко, А. П. Бурмак, *Металлофиз. новейшие технол.*, **37**, № 9: 1269 (2015).
11. М. О. Vasylyev, B. M. Mordyuk, S. M. Voloshko, and D. A. Lesyk, *Progress in Physics of Metals*, **22**, No. 4: 562 (2021).
12. Liang Li, Miru Kim, Seungjun Lee, Taegyu Kim, Jaebeom Lee, and Deugwoo Lee, *Surface Coatings Technol.*, **330**: 204 (2017).
13. G. Q. Wang, M. K. Lei, and D. M. Guo, *Procedia CIRP*, **45**: 323 (2016).
14. М. О. Васильєв, Б. М. Мордюк, С. І. Сидоренко, С. М. Волошко, А. П. Бурмак, Н. В. Франчік, *Металлофиз. новейшие технол.*, **39**, № 7: 905 (2017).
15. М. А. Vasylyev, B. N. Mordyuk, S. I. Sidorenko, S. M. Voloshko, and A. P. Burmak, *Surface Coatings Technol.*, **343**: 57 (2018).
16. Ю. О. Геллер, А. Г. Рахштадт, *Материаловедение* (Москва: Металлургия: 1989).
17. Г. В. Шляхова, С. А. Баранникова, Л. Б. Зуев, *Вестник Тамбовского университета. Серия Естественные и технические науки*, **21**, № 3: 1447 (2016).
18. В. А. Клименов, Ж. Г. Ковалевская, О. Б. Перевалова, Ю. Ф. Иванов, В. А. Кукареко, *ФММ*, **102**: 621 (2006).
19. М. О. Vasylyev, S. I. Sidorenko, S. M. Voloshko, and T. Ishikawa, *Usp. Fiz. Met.*, **17**: 209 (2016).
20. М. О. Васильєв, Б. М. Мордюк, С. М. Волошко, В. І. Закієв, А. П. Бурмак, Д. В. Пефті, *Металлофиз. новейшие технол.*, **42**, № 3: 381 (2020) (in Ukrainian).
21. М. О. Васильєв, Б. М. Мордюк, С. І. Сидоренко, С. М. Волошко, А. П. Бурмак, *Металлофиз. новейшие технол.*, **39**, № 1: 49 (2017).
22. I. Zakiev, M. Storchak, G. A. Gogotsi, V. Zakiev, and Y. Kokoieva, *Ceramics International*, **47**, Iss. 21: 29638 (2021).

23. I. Zakiev and E. Aznakayev, *JALA—Journal Association for Laboratory Automation*, **7**, No. 5: 44 (2002).
24. M. Storchak, I. Zakiev, V. Zakiev, and A. Manokhin, *Measurement*, **191**: 110745 (2022).
25. S. A. Firstov, S. R. Ignatovich, and I. M. Zakiev, *Strength Mater.*, **41**: 147 (2009).
26. М. О. Васильєв, Б. М. Мордюк, С. М. Волошко, В. І. Закієв, А. П. Бурмак, Д. В. Пефті, *Металлофиз. новейшие технол.*, **41**, № 11: 1499 (2019).
27. V. Zakiev, A. Markovsky, E. Aznakayev, I. Zakiev, and E. Gursky, *Proc. SPIE 5959, Medical Imaging (Congress on Optics and Optoelectronics) (23 September 2005)* (Poland, Warsaw: 2005), vol. 595916.
28. V. O. Dzyura, P. O. Maruschak, I. M. Zakiev, and A. P. Sorochak, *International IJE Transactions B: Applications*, **30**, No. 8: 1170 (2017).
29. Y. Samih, G. Marcos, N. Stein, N. Allain, E. Fleury, C. Dong, and T. Grosdidier, *Surface Coatings Technol.*, **259**: 737 (2014).
30. V. N. Gridnev and V. G. Gavriljuk, *Phys. Met.*, **4**: 74 (1982).
31. V. G. Gavriljuk, *Mater. Sci. Eng. A*, **345**: 81 (2003).

REFERENCES

1. A. D. Koval, V. G. Efremenko, M. N. Brykov, M. I. Andrushchenko, R. A. Kulikovskii, A. V. Efremenko, *J. Friction Wear*, **33**: 153 (2012).
2. V. A. Kukareko, *Obrabotka Metallov. Materialovedenie*, No. 3 (68): 99 (2015) (in Russian).
3. M. Klesnil and P. Lukác, *Fatigue of Metallic Materials. Materials Science. 2nd Rev. Ed.* (Amsterdam: Elsevier Science Publ.: 1992), vol. 71.
4. V. M. Finkel', *Fizicheskie Osnovy Tormozheniya Razrusheniya* (Moscow: Metallurgiya: 1977) (in Russian).
5. D. L. Davidson and J. Lankford, *International Materials Reviews*, **37**: 45 (1992).
6. A. V. Byeli, V. A. Kukareko, and A. Pateyuk, *Inzheneriya Poverkhnostey Konstruktsionnykh Materialov Kontsentrirrovannymi Potokami Ionov Azota* [A Surface Engineering Structural Materials with Concentrated Streams of Nitrogen Ions] (Minsk: Belorusskaya Nauka: 2007) (in Russian).
7. Chuan Liu, Changhua Lin, Weihua Liu, Shuang Wang, Yuefeng Chen, Jianfei Wang, and Jianxin Wang, *International Journal of Pressure Vessels and Piping*, **192**: 104420 (2021).
8. E. S. Statnikov, O. V. Korolkov, and V. N. Vityazev, *Ultrasonics*, **44**, Suppl. 1: e533 (2007).
9. B. N. Mordyuk, S. M. Voloshko, V. I. Zakiev, A. P. Burmak, and V. V. Mohylko, *J. Mater. Eng. Perform.*, **30**: 1780 (2021).
10. M. O. Vasyliiev, B. M. Mordyuk, S. I. Sidorenko, S. M. Voloshko, and A. P. Burmak, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **37**, No. 9: 1269 (2015) (in Ukrainian).
11. M. O. Vasylyev, B. M. Mordyuk, S. M. Voloshko, and D. A. Lesyk, *Progress in Physics of Metals*, **22**, No. 4: 562 (2021).
12. Liang Li, Miru Kim, Seungjun Lee, Taegyu Kim, Jaebeom Lee, and Deugwoo Lee, *Surface Coatings Technol.*, **330**: 204 (2017).

13. G. Q. Wang, M. K. Lei, and D. M. Guo, *Procedia CIRP*, **45**: 323 (2016).
14. M. O. Vasylyev, B. M. Mordyuk, S. I. Sydorenko, S. M. Voloshko, A. P. Burmak, and N. V. Franchik, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **39**, No. 7: 905 (2017) (in Ukrainian).
15. M. A. Vasylyev, B. N. Mordyuk, S. I. Sidorenko, S. M. Voloshko, and A. P. Burmak, *Surface Coatings Technol.*, **343**: 57 (2018).
16. Yu. O. Geller and A. G. Rahshtadt, *Materialovedenie* (Moscow: Metallurgiya: 1989) (in Russian).
17. G. V. Shlyahova, S. A. Barannikova, and L. B. Zuev, *Vestnik Tambovskogo Universiteta. Seriya Estestvennye i Tekhnicheskie Nauki*, **21**, No. 3: 1447 (2016) (in Russian).
18. V. A. Klimenov, Zh. G. Kovalevskaya, O. B. Perevalova, Yu. F. Ivanov, and V. A. Kukareko, *FMM*, **102**: 621 (2006) (in Russian).
19. M. O. Vasylyev, S. I. Sidorenko, S. M. Voloshko, and T. Ishikawa, *Usp. Fiz. Met.*, **17**: 209 (2016).
20. M. A. Vasylyev, B. N. Mordyuk, S. M. Voloshko, V. I. Zakiev, A. P. Burmak, and D. V. Pefti, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **42**: No. 3: 381 (2020) (in Ukrainian).
21. M. O. Vasylyev, B. M. Mordyuk, S. I. Sidorenko, S. M. Voloshko, and A. P. Burmak, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **39**, No. 1: 49 (2017) (in Ukrainian).
22. I. Zakiev, M. Storchak, G. A. Gogotsi, V. Zakiev, and Y. Kokoieva, *Ceramics International*, **47**, Iss. 21: 29638 (2021).
23. I. Zakiev and E. Aznakayev, *JALA—Journal Association for Laboratory Automation*, **7**, No. 5: 44 (2002).
24. M. Storchak, I. Zakiev, V. Zakiev, and A. Manokhin, *Measurement*, **191**: 110745 (2022).
25. S. A. Firstov, S. R. Ignatovich, and I. M. Zakiev, *Strength Mater.*, **41**: 147 (2009).
26. M. O. Vasylyev, B. M. Mordyuk, S. M. Voloshko, V. I. Zakiyev, A. P. Burmak, and D. V. Pefti, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **41**, No. 11: 1499 (2019) (in Ukrainian).
27. V. Zakiev, A. Markovsky, E. Aznakayev, I. Zakiev, and E. Gursky, *Proc. SPIE 5959, Medical Imaging (Congress on Optics and Optoelectronics) (23 September 2005)* (Poland, Warsaw: 2005), vol. 595916.
28. V. O. Dzyura, P. O. Maruschak, I. M. Zakiev, and A. P. Sorochak, *International IJE Transactions B: Applications*, **30**, No. 8: 1170 (2017). <https://doi.org/10.5829/idosi.ije.2017.30.08b.08>
29. Y. Samih, G. Marcos, N. Stein, N. Allain, E. Fleury, C. Dong, and T. Grosdidier, *Surface Coatings Technol.*, **259**: 737 (2014). <https://doi.org/10.1016/j.surfcoat.2014.09.065>
30. V. N. Gridnev and V. G. Gavriljuk, *Phys. Met.*, **4**: 74 (1982).
31. V. G. Gavriljuk, *Mater. Sci. Eng. A*, **345**: 81 (2003). [https://doi.org/10.1016/S0921-5093\(02\)00358-1](https://doi.org/10.1016/S0921-5093(02)00358-1)

PHYSICS OF STRENGTH AND PLASTICITY

PACS numbers: 61.25.Mv, 61.66.-f, 61.72.-y, 62.20.-x, 64.75.-g, 89.20.Bb

About Al–Si Alloys Structure Features and Ductility and Strength Increasing After Deformation Heat Processing

V. V. Kaverinsky, Z. P. Sukhenko, G. A. Bagluk, and D. G. Verbylo

*I. M. Frantsevich Institute for Problems in Materials Science, N.A.S. of Ukraine,
3 Academician Krzhizhanovsky Str.,
UA-03142 Kyiv, Ukraine*

A technique of deformation heat processing for Al–Si based alloys is proposed which can significantly increase their both ductility and strength and also reveals additional reserves for their strength and hardness increasing through cold work hardening. The method includes serial of small hot plastic deformations with intermediate cooling and short annealing. This makes the silicon inclusion rather small with shape close to spherical, which leads to the ductility increasing. Then a work hardening processing could be performed for the material. Finally, both ductility and strength appear higher than in the initial cast state.

Key words: Al–Si alloys, deformation heat processing, mechanical properties, silicon inclusions, microstructure.

Запропоновано спосіб деформаційно-термічного оброблення стопів системи Al–Si, що дає можливість значно підвищити одночасно їх пластичність та міцність, а також відкриває додаткові можливості підвищення їх міцності та твердості за рахунок деформаційного зміцнення. Метод включає серію малих гарячих пластичних деформацій з проміжним охолодженням і короткочасними відпалами. Це дає можливість одержати досить дрібні включення кремнію форми близької до сферичної, що і приводить до збільшення пластичності та міцності. Потім для матеріалу може бути виконана холодна деформація для додаткового зміцнення. В результаті і пластичність, і міцність виявляються значно вищими, ніж у вихідному литому стані.

Corresponding author: Vladyslav Volodymyrovych Kaverinsky
E-mail: insamhlaithe@gmail.com

Citation: V. V. Kaverinsky, Z. P. Sukhenko, G. A. Bagluk, and D. G. Verbylo, About Al–Si Alloys Structure Features and Ductility and Strength Increasing After Deformation Heat Processing, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **44**, No. 6: 769–784 (2022). DOI: [10.15407/mfint.44.06.0769](https://doi.org/10.15407/mfint.44.06.0769)

Ключові слова: Al–Si стопи, деформаційно-термічне оброблення, механічні властивості, включення кремнію, мікроструктура.

(Received February 23, 2022; in final version, March 2, 2022)

1. INTRODUCTION

Low ductility is a well-known peculiarity of Al–Si alloys (silumins). Despite of their indisputable advantages as low density, good corrosion behaviour, decent strength properties at relatively low cost their low plasticity restricts their implementation areas and made for them bad reputation of a material for low quality products. Being an eutectic alloy type with quite low (comparing with some other Al alloys) foundry shrinkage silumins are widely used for cast products. Special casting techniques and modifiers could increase the material strength and/or ductility. However, in spite even seeming at a first glance significant growth of ductility, it indeed remains rather low, which does not really make the material able to plastic deformation processing. Here we have some examples. In work [1] it was declared on 1.5 times of ductility increasing for alloy AK9M2. Actually, its values grew from 1.2 to 1.8%. In work [2] the observed change of relative extension was from 0.5...0.7% to 0.9...1.1% for AK8M3 alloy.

Most of the studies of Al–Si alloys properties improvement are focused on the cast state [3–5] which is not surprising, because they are used primary for cast products. However, brittle at normal temperature Al–Si alloys could be affected to a hot deformation processing that has mentioned even in [6]. As known, plastic deformation has an effect on the material structure. The main idea here is to crush silicon inclusions, which are the main cause of these alloys brittleness, at the temperature where the material is plastic enough.

Despite the idea is time after time appeared since 30's of XX century this technique still not become widely spread. However, in recent years is observed an increasing of interest to it. A method of Al–Si alloys deformation heat processing by forging was presented in [7]. The proposed technique consists of the following sequence: annealing at $500 \pm 10^\circ\text{C}$ for 2 hours, hot deformation by forging at a temperature of $510\text{--}550^\circ\text{C}$ (beginning of forging) to $350\text{--}400^\circ\text{C}$ (end of forging); an optional intermediate annealing at $510\text{--}550^\circ\text{C}$, a final post-deformation annealing at $520 \pm 10^\circ\text{C}$ for 2 hours. This method leads to the formation of polygonal inclusions of silicon fairly evenly distributed in the structure. It allows to increase the plasticity values of the material to $\delta = 4\text{--}16\%$ (depending on silicon content). Increasing of the strength is up to 15–75% compared with the cast state, but only for alloys with high silicon content (20–30%), the simultaneous increase in ductility for which is insignificant.

Another example of recently published research of Al–Si alloys forging technique is [8]. There the casted samples were forged at 300°C with deformation degree of 15%, 25%, and 35%. Then the samples were annealed at 535°C for 5 h, followed by aging at 170°C for 2 h. In the structure were obtained close to spherical shape silicon inclusions with various sizes (actually, about 2–5 μm , according to the given photos of the structure). At the most deformed samples they reached relative extension values up to 12%.

There also exist several others studies on this topic. This proffers that Al–Si alloys could be effectively affected to plastic deformation, which leads to shredding and spheroidization of silicon inclusions and ductility increasing. Nevertheless, attempts to reproduce Al–Si forging techniques do not always succeed. The practice shows, that the samples of such alloys could be prone to cracking even during hot deformation. So, statements about the super plasticity of such alloys at temperatures higher than 430°C, like in [6], look somewhat overpriced.

In this work we tried to develop a technique of Al–Si alloys deformation heat treatment that significantly increases their ductility and reveals the additional resources for their work hardening. Moreover, it should reduce the likelihood of the material brittle fracture, especially during the first deformation stages, when the plasticity is still not high enough. Some attention is also given to the initial cast structure of the material affected to such processing.

2. RESEARCH MATERIAL AND METHODOLOGY

The chemical composition of the studied material is given in Table 1.

Material for some of the samples was modified using a NaCl + KCl surface flux before the casting. Composition of the flux was ~45% of NaCl and 55% of KCl that has an eutectic melting point at about 660°C, which is close to aluminium melting temperature. This might give an addition of some thousandth's parts of Na and K.

Another cast structure modification type studied here was treatment of the melt through adding of ~0.5 g/kg of AgNO_3 in a melting capsule of Al. It was supposed that owing to its thermal decomposition and reaction with Al disperse particles of silver might be obtained which could be substrates during the aluminium crystals nucleation at the beginning of the alloy solidification. Also, a 'stormy' reaction may give the melt additional mixing.

TABLE 1. Chemical composition of the studied material (in % wt.).

Al	Si	Mn	Mg	Cu	Fe
Base	6.8–7.1	0.1–0.2	0.05–0.1	0.3–0.5	0.5–0.8

Others samples were not modified in these ways.

Some samples were additionally alloyed with about 2% of Cu and 1% of Ag, also they had an increased amount of Mn up to 0.7%. This was made to study the features of an additional effect of disperse and solid solution hardening in comparison with the effects of strength growth obtained through the deformation heat processing.

The specimens were casted into a clay mould two at once. Each cast sample had its own funnel in the mould to fascinate air exit during the casting. A schematic sketch of the mould is given on Fig. 1. The metal casting temperature was about 700–750°C.

Casted samples were separated from solidified funnels and their surface layer was deleted by mechanical processing. Thus, their dimensions become about 8.5×8.5×40.0 mm.

Obtained in this way cast specimens were objected to deformation heat treatment. In general, its technique consisted in the following operations:

- heating to the temperature from 490 to 540°C;
- hot deformation by forging elongation from the heating temperature to ~400–430°C. Its degree varied from 3–4% to 18–20%;
- cooling to 40–60°C or even to the home temperature;
- next heating to 490–540°C with keeping in a furnace 10–15 min and following hot deformation.

The described heating deformation and cooling cycles proceeded until the desired resulting deformation degree was obtained.

Here were studied resulting deformations degrees from 25 to 70%.

After the serial of the hot deformations some of the samples were objected to the cold deformation for work hardening.

The obtained samples both as cast and after different regimes of deformation heat treatment were subjected to a technological upsetting test. The test consisted in pressing of a piece of the sample with initial

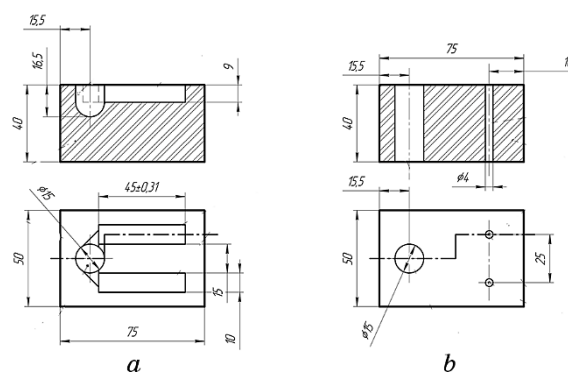


Fig. 1. A schematic sketch of the used mould: bottom half (a); top half (b).

height of 8 mm until visible cracks occurred. The ratio between the initial height and obtained after the critical upsetting (when crack appear) was estimated for each sample.

Tensile tests were performed to estimate the standard mechanical properties of the material: ultimate tensile strength, yield strength, relative extension, and constriction ratio.

Microstructure of the samples was studied through the optical microscopy with magnification $\times 40$, $\times 100$, and $\times 1000$. To revile the microstructure etching was performed at KOH 7% solution with temperature 60–70°C. For more contrast view of the silicon inclusions an additional etching at 2% solution of AgNO₃ was performed for some of the samples.

3. RESEARCH RESULTS AND DISCUSSION

The microstructure study for the cast samples showed a significant influence of K, Na additions, as it supposed to be. An effect of AgNO₃ adding was also observed. Figure 2 shows a comparison of the as cast structure.

From the given microstructure illustrations it is clearly seen that K, Na additions qualitatively change the shape of the silicon inclusions making them polyhedral or even ‘skeleton shape’. The inclusions remain rather large, about 30–100 μm . AgNO₃ addition does not as much qualitatively change the silicon inclusions shape—we still can see ‘needles’. However, they become significantly smaller and more ramified. The main effect AgNO₃ addition makes on the cast dendrite structure that become denser and disperse.

Numerically it could be said, that dendrite structure density (dendrites per mm^2) in not modified material was $228 \pm 63 \text{ mm}^{-2}$ and in modified one it become $848 \pm 291 \text{ mm}^{-2}$.

But the more important interest of this research is the structure behaviour after the proposed deformation heat treatment. Unexpected was the fact that K, Na modified samples appear the most ‘naughty’ during the hot forging. They became soft but brittle and crumbled under the strikes. Such behaviour was observed mostly at heating to 530–560°C for hot forging. Decreasing the forging beginning temperature to 490–510°C allowed partially eliminate this drawback. The observed fracture is likely be caused by so called hot fragility that may occur at Al based alloys with Na and K impurities, which was made deliberately here. According to [6] even less than 0.01% of Na or K is enough.

As experiments have shown, even hot deformation could cause cracks appearing and brittle fracture of Al-Si alloys. So, one of the main tasks was working out of a deformation regime such materials could withstand without fracture, taking into account the facts that the specimens

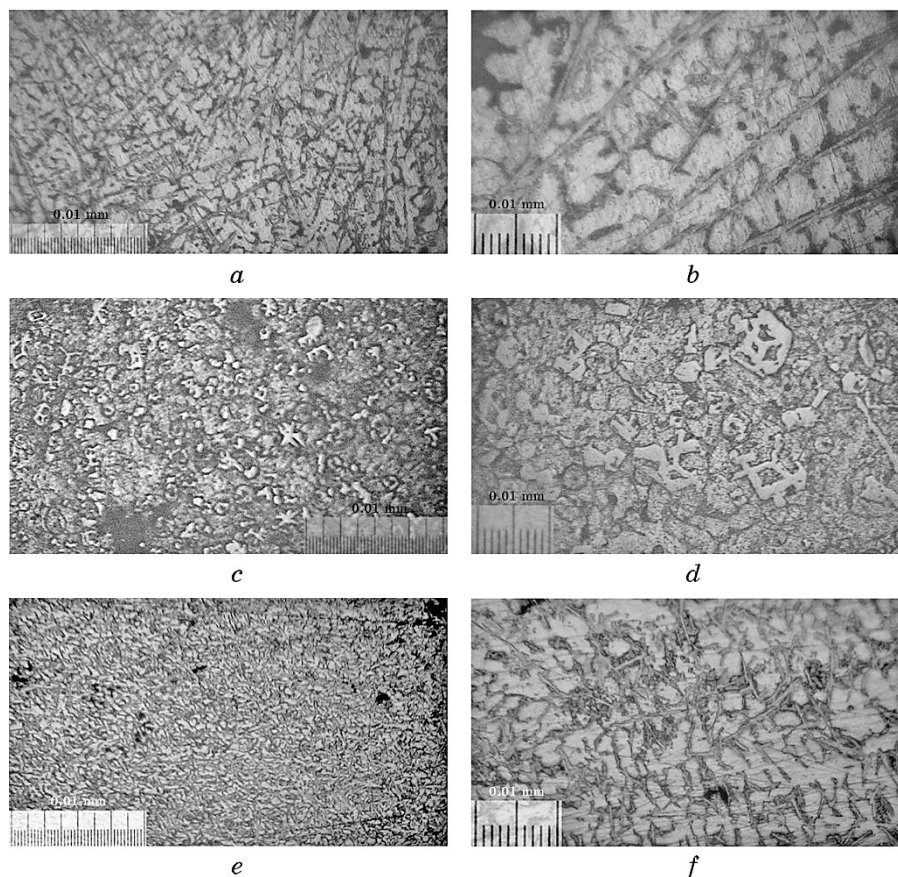


Fig. 2. Cast microstructure of the studies Al-Si alloy samples with different types of modification: *a*—no modification, $\times 40$; *b*—no modification, $\times 100$; *c*—NaCl + KCl flux treatment, $\times 40$; *d*—NaCl + KCl flux treatment, $\times 100$; *e*—AgNO₃ treatment, $\times 40$; *f*—AgNO₃ treatment, $\times 100$.

are affected to strike impact during forging and their temperature decreases rather fast because of their small size and contact with cold forging equipment. In this case the end of forging temperature is hardly being controlled precisely. Such visual signs as the glow colour of the heated metal or the colours of surface oxide films do not work in this case. It could be only estimated by rather crude calculations. An estimated cooling curve of an aluminium sample of the given dimensions with initial temperature 520°C placed on an iron incus in air environment with temperature 20°C is shown on Fig. 3.

We can see that that the sample cooled to 450°C less than in 50 seconds. Lower temperatures are not desirable for hot deformation of such material, especially on early stages when the silicon inclusions are not

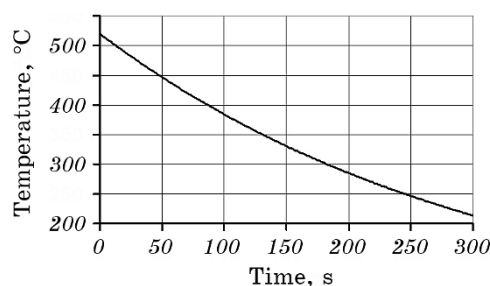


Fig. 3. An estimated cooling curve for 8.5×8.5×40 mm specimen.

yet crushed and spheroidized enough and the plasticity is rather low. Hence, on the first stages deformation degree should be low. So, surely being at the safe temperature range deformations could be reached at a single stage are not more than 5%. Actually, they were 3–4%. Bigger deformations, as the practice showed, may cause brittle cracks. Then, when the material gains enough plasticity the temperature of ending forging could be decreased to 400 or even to 350°C. That allows making greater deformations—up to 18–20% at a single stage.

The typical samples structures after the deformation heat processing are shown on Fig. 4. From all of the given illustrations we can see spheroidization and shredding of the silicon inclusions. However, the common structure is different and it depends on the initial cast state and the deformation–heat treatment. A significant summary hot deformation of the AgNO₃ modified samples leads to overcoming the initial dendrite structure and creation of equiaxial grains with spherical silicon inclusion between them. The average grain size in this case is about 40–50 μm and silicon inclusion size is 5–10 μm. In non-modified samples we can observe rather coarse matrix structure without clearly seen grains boundaries. The inclusions spheroidization is obvious, but they have larger size up to about 20 μm, but the smallest ones are less than 5 μm.

In samples after an additional work hardening followed the hot deformation we can see deformed matrix grains (Fig. 4, *e, f*). Less hot deformation degree at this case leads to obtaining comparatively larger average grain size—about 70–80 μm. Silicon inclusions are rather small, but less orboid and additionally crushed. We can see their shape clearly on the Fig. 5 that was taken at greater magnification (×1000 with oil immersion).

Some of the inclusions in this case are not evenly disperse over the matrix but form ‘crushed lines’ as we can see at Fig. 5, *a* or fractured conglomerates as it shown on Fig. 5, *b*. Others could be rather separated but not all of them have equiaxial polygonal or close to spherical shape. Size of this inclusions is often less than 10 μm and the smallest ones are less than 1 μm.

In the samples that were affected by NaCl + KCl flux treatment during the casting despite significant summary hot deformation (50%) the silicon inclusions are comparatively bigger than in the others cases considered there. Their average size is 15–10 μm . However, it is significantly smaller than they were at the as cast state. They are rather equiaxial polygonal and quit evenly distributed in the matrix. The grain boundaries are not clearly manifested, but the average grain size could be estimated to be about 70–90 μm .

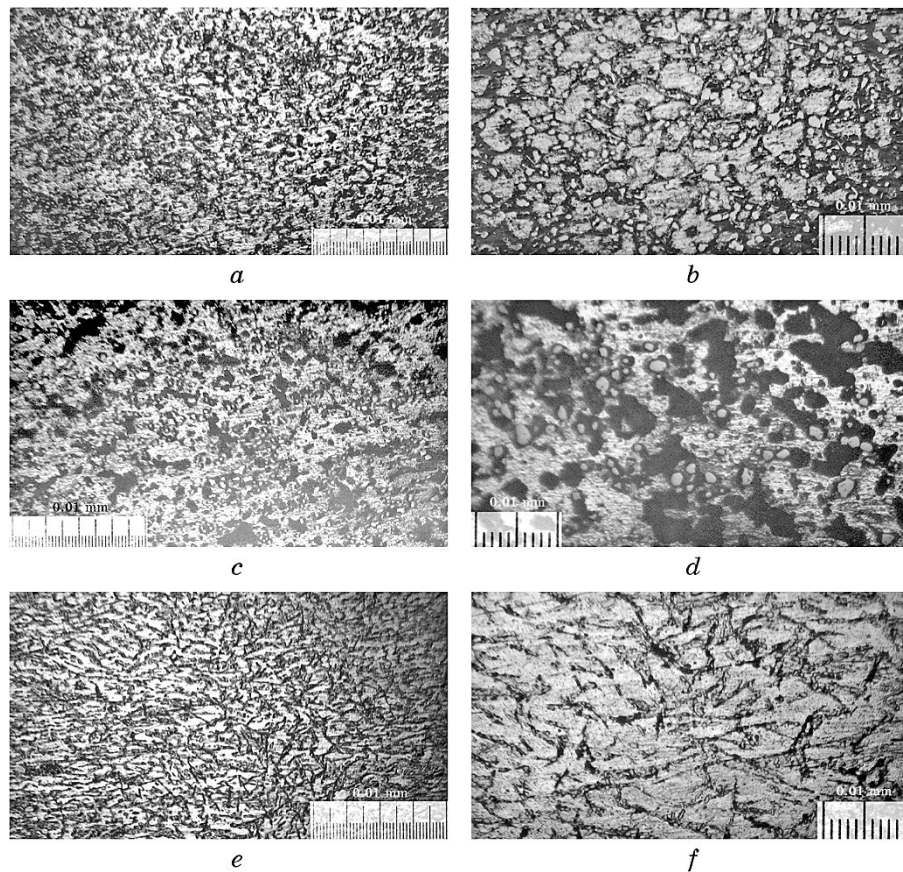
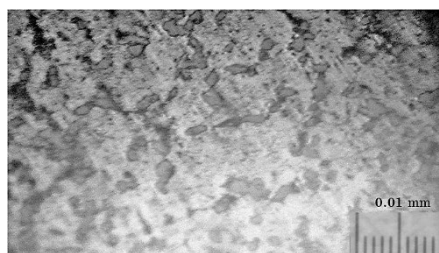


Fig. 4. Typical microstructure of the samples after the deformation heat processing: *a*—47% summary hot deformation, AgNO_3 treatment, $\times 40$; *b*—47% summary hot deformation, AgNO_3 treatment, $\times 100$; *c*—38% summary hot deformation, no modification, $\times 40$; *d*—38% summary hot deformation, no modification, $\times 100$; *e*—30% summary hot deformation + 15% work hardening, AgNO_3 treatment, $\times 40$; *f*—30% summary hot deformation + 15% work hardening, AgNO_3 treatment, $\times 100$; *g*—50% summary hot deformation, NaCl + KCl flux treatment, $\times 100$.



g

Continuation of Fig. 4.

The average values of the main mechanical properties of the studied samples in a cast state and after the deformation heat treatment measured through tensile tests are given in Table 2.

The samples affected the tensile tests are actually not the same as ones for which the microstructure photos are given above, but quite similar to make some conclusions.

The cast samples showed an extremely low ductility at tensile tests. Their relative elongation and constriction ratio are close to zero. Also, no explicit yield strength was observed for them. The basic non-modified and not alloyed cast samples type (No. 4) has very low ultimate tensile strength—about 89.0 MPa. It could be significantly increased by the studied here AgNO_3 modifying and some alloying with Cu and Ag (No. 5). However, the strength value remains significantly less than it is observed in all of the samples type after the deformation heat treatment.

Even not modified samples after summary 52% hot deformation show a significant growth of the material ultimate tensile strength which becomes averagely 196.4 MPa. Also here appears explicit yield strength. More remarkable that the material acquires some plasticity—the relative elongation has become 6.22% and the constriction ratio 22.45%. Modified samples affected greater summary hot deformation (~70%) and subsequent annealing at about 540°C during 2 hours (No. 6) acquires even more ductility. However, their strength becomes lower, but still higher as it was for not alloyed cast samples and it is close to the alloyed ones after quenching and aging (No. 5).

The observed plasticity growth makes possible an additional work hardening, which is demonstrated with samples of type Nos. 2, 3, and No. 7 from the table above. It should be noticed, that these sample acquire rather close values of ultimate tensile strength after the corresponding deformation heat treatment. Type No. 3 that was affected modifying during the casting and greater hot deformation shows more plasticity remain after the work hardening but the ductility of Nos. 2

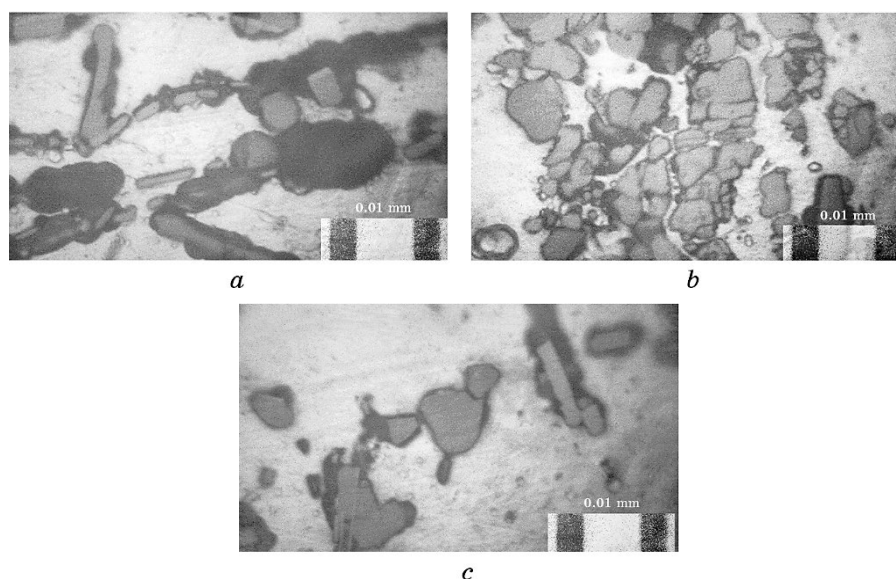


Fig. 5. Typical silicon inclusions in the sample with 30% summary hot deformation + 15% work hardening, $\times 1000$.

and 7 is almost exhausted after even less cold deformation. Less hot deformation degree and also non-modified cast state cause the fact that samples of type No. 7 earlier exhaust their plasticity margin with lower final strength values.

Strength of the material could be even more increased by alloying that makes possible hardening through quenching and aging. This is demonstrated by samples of type No. 8 which were alloyed with some amount of Cu and Ag as it was for the specimen No. 5. Their averaged tensile strength after the deformation heat treatment becomes 333.3 MPa. Their plasticity is rather low but it is a bit higher than in the as cast state.

Samples modified with NaCl + KCl flux sowed a high tendency to hot brittleness during the deformation. Cracks appear from time to time and some specimens even have fallen apart. Also, when machining (turning) of the tensile test samples they were likely to tear. Thus, they were excluded from the most of mechanical properties study. It only could be said that in technological upsetting tests they show very low plasticity—visible cracks appear after about 17–28% of upsetting.

The average hardness of the samples is given in Table 3.

For deeper comprehension of the material plasticity behaviour technological upsetting tests were performed. Its results are shown in Table 4.

TABLE 2. Main mechanical properties of the studied samples in a cast state and after deformation heat treatment.

No.	Sample type	σ_y , MPa	σ_u , MPa	δ , %	ψ , %
1	52% summary hot deformation, non-modified	128.0	196.4	6.22	22.45
2	30% summary hot deformation + 12% work hardening, non-modified	251.6	275.7	0.94	0.93
3	48% summary hot deformation + 27% work hardening (AgNO ₃ treatment)	229.5	273.0	3.30	9.30
4	Cast, non-modified, not alloyed	–	89.0	~0	~0
5	Cast, AgNO ₃ treatment, + ~2% Cu + ~1% Ag + + ~0,7% Mn, quenching from 510°C and natural aging	–	139.0	~0	~0
6	70% summary hot deformation + ~2 h annealing at 540°C, (AgNO ₃ treatment)	63.7	137.1	22.57	58.79
7	25% summary hot deformation + 9% work hardening, non-modified	222.4	260.8	0.06	0.06
8	38% summary hot deformation + 6% work hardening + ~2% Cu + ~1% Ag + ~0,7% Mn, quenching from 510°C and natural aging (AgNO ₃ treatment)	288.5	333.3	1.42	1.40

Analysis of the obtained complex of the mechanical properties showed that in the studied case correlation between hardness and tensile or yield strength exists but is not very strict, as it could be seen from the plot on Fig. 6.

The cause of such behaviour seems to be following. The alloying with subsequent quenching and aging increase both hardness and strength in as cast or deformed state. Its effect is mostly conditioned by precipitation hardening and some solid solution hardening. Reason of the strength increasing after hot deformation of such alloy is different. Growth of strength properties after cold deformation is merely a work hardening that is accompanied with hardness growth and ductility decreasing. The observed increasing of strength and plasticity after the hot deformation by the proposed technique is mostly caused by changing of the silicon inclusions morphology. Large sized sharp plates of silicon in the as cast material although having some strengthening effect also work like stress concentrators and micro defects. That is the most reason of low plasticity of such materials and this also does not allow them to fully show their strengthening effect. However, it does not so much affect the material hardness. Shredded and spheroidized silicon inclusions have significantly less effect as stress concentrators and less likely forming sharp chips during tensile deformation. Hence, this prevents premature material fracture. Another reason of the strength increasing after the hot deformation may be in changing of the metallic

TABLE 3. Hardness of the studied samples in a cast state and after deformation heat treatment.

No.	Hardness, HV
1	50.3
2	96.8
3	117.4
4	67.0
5	112.4
6	49.2
7	106.1
8	131.0

matrix structure. Instead of rough dendrites there appear equiaxial grains also affected by primary recrystallization. High temperature annealing leads to the collective recrystallization (grain growth) and takes away all the residual deformation stress, which leads to some strength decline.

The results analysis shows that the strength highly depends of both hot and cold deformation degree. There might also occurs their non-additive effect but it is not proofed enough. The dependence is not linear. Summary hot deformation degree up to 40% gives the material additional strength increasing. Higher hot deformations give it additional ductility, however there not observed more strength growth and it could appear even less than it may be obtained after lesser hot deformation. Cold deformation is able to allot the material merely an additional strength as much as the plasticity allows it. Hardness of the alloy is mostly affected by cold deformation (work hardening). The alloying also increases it. However, the hot deformation might even somewhat de-

TABLE 4. Results of upsetting tests for the samples in a cast state and after deformation heat treatment.

No.	Upsetting degree before cracks appear, %
1	83.3
2	59.1
3	74.6
4	29.8
5	31.2
6	92.1
7	42.3
8	61.9

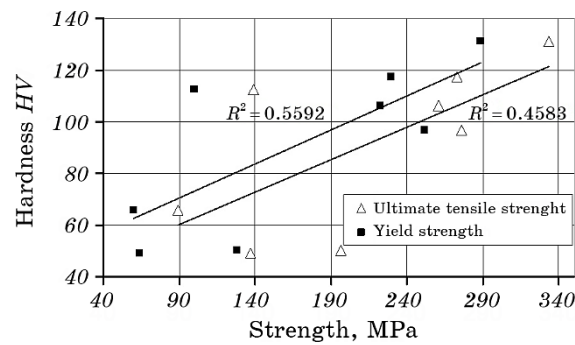


Fig. 6. Correlation between hardness and strength properties for the studied samples.

crease the observed hardness. Hardness of the material after the hot deformation remains on the level about 50 HV, which is close to one of the cast material after annealing at temperatures higher than 500°C, which was also observed in our previous study [9]. It is even less than in the as cast state. Some additional investigations were performed for this phenomenon comprehension. In the Table 5 are given the results of additional hardness and micro hardness of the metallic matrix measurements.

In as cast state the metal matrix has some residual thermal stress that results in its hardness increasing. The value of common hardness in this case is very close to the metal matrix micro hardness. Annealing removes them and the metal matrix micro hardness becomes significantly lower. However, it is quite less than the common hardness. The proposed hot deformation treatment technique works like some kind annealing that removes the residual thermal stress and the metal matrix hardness decline. We can also see that its growth with the summary hot deformation degree, which may be the result of the matrix grain structure refinement. But the common hardness stands by the same value about 50 HV as it is observed for the annealed state. Work hardening increases the metal matrix micro hardness to the values higher than the hardness in the annealed state. As a result, the common hardness appears close to this metal matrix micro hardness (a bit higher). The same thing is observed for the as cast material. Hence, there is a specific barrier, which is for this material at about 50 HV. It varies depending on silicon content. For example, for the alloy with 3.5% of Si it will be around 35...36 HV and for one with 9.0% Si—about 56...57 HV. Thus, we come to the conclusion that the common resulting hardness of this material could be mostly conditioned by silicon content or metal matrix hardness. There is a barrier value of hardness that depends on the silicon content. Lower it the common hardness is completely conditioned by

TABLE 5. Common hardness and metal matrix micro hardness.

Sample type	Hardness, HV	Metal matrix microhardness, HV
52% summary hot deformation	50.3	48.2
29% summary hot deformation	50.2	43.4
As cast state	67.0	65.9
Annealing for 1.5 h at 520–540°C	49.2	41.8
48% summary hot deformation + + 27% work hardening	117.4	114.2
Annealing for 3 h at 520–540°C (3.5% Si)	35.2	29.5
60% summary hot deformation (3.5% Si)	35.6	33.3
Annealing for 1.5 h at 520–540°C (9.0% Si)	56.1	40.2
25% summary hot deformation (9.0% Si)	56.7	44.6

silicon content, higher it mostly caused by the metal matrix hardness with only a slight effect of silicon.

In the dependence of the ductility properties (δ and ψ) there was nothing unexpected—they are increasing with hot deformation degree growth, and subsequent work hardening declines them. Values of δ and ψ are in strict linear correlation between each other.

Technological upsetting tests showed that even in the as cast state the material could have some plasticity even at the home temperature. However, it is significantly less than it is observed for all the studied samples after the deformation heat treatment.

4. CONCLUSIONS

1. A technique of deformation heat treatment was proposed for Al–Si alloys that allows significant both strength and ductility increasing. The method consists in a serial of small hot deformations with intermediate cooling and short annealing between the deformations. The hot deformations beginning temperature should be about 490–540°C. The hot deformations finishing temperature should be about 450°C the first stages and could be reduced to 400 or even 350°C for the final stages when the material obtains enough plasticity. Owing to the ductility acquisition the material could be affected to work hardening to increase its strength even more. Samples affected 70% of summary hot defor-

mation could withstand up to 90% upsetting degree at the home temperature. However, it reduces the final plasticity. Strength and hardness of this alloy could be even more increased though alloying which makes possible a hardening by quenching and aging.

2. The growth of both ductility and strength increasing after the hot deformation is mostly caused by changing of the silicon inclusions morphology. They are shredding and their shape becomes polyhedral close to spherical. Such inclusions still not as much effect as stress concentrators and micro defects tearing the metal matrix during deformation. Intermediate cooling between the hot deformations lead to some changing of Si content in the solid solution. According to the phase diagram its equilibrium content at the heating temperature is about 1% and at the home temperature it is about 0.01%. So there occurs some dissolution of the silicon inclusions surface when heating and re-deposition when cooling. This effect might additionally promote the inclusions spheroidization.

3. The initial cast structure has an effect to the structure and properties in the deformed state. Finer, modified with disperse parcels, structure allows obtaining of smaller silicon inclusions and disperse equiaxial grains of the metal matrix. It results in greater values of its plasticity after the hot deformation and bigger residual ductility after the work hardening. Such material could withstand greater degree of cold plastic deformation. However, treatment of the melt with NaCl + KCl flux was not benefit for the case. Nevertheless, it affects the cast structure, especially silicon inclusions shape, the size of the inclusions remains rather large. Also, samples modified in such a way show a high tendency to hot brittleness during hot deformation.

4. It was observed an unusual behaviour of the material hardness after the hot deformation. Although the material tensile and yield strength increasing, the hardness do not grow and becomes even less than in the as cast state remaining on the level of annealed cast product. The only way to increase the hardness in this case is alloying and/or work hardening. Nevertheless, the hardness of the metal matrix could slightly grow with the hot deformation degree increasing, the common hardness remains on the same level. It was found out that for the studied material there exist a barrier value of the hardness which mostly depends on silicon content only. If the metal matrix hardness is lower than this barrier value the common hardness is standing on it. If the metal matrix hardness overcomes this value, it becomes mostly affect the common hardness, which will be only slightly greater than the metal matrix hardness.

5. Dependence of the strength properties from the hot deformation degree is nonlinear. Increasing the summary hot deformation degree to the values up to 40% results in the additional strength growth. Higher summary hot deformation degrees could additionally increase the ductility, but do not give an additional effect to the material strength.

There could be obtained even less strength values than after lesser hot deformation.

REFERENCES

1. O. L. Scuibida, *Visnyk NTU KhPI* [Buletin of NTU KhPI], No. 15: 29 (2014) (in Ukrainian).
2. A. A. Mityaev, I. P. Volchok, R. A. Frolov, K. N. Loza, O. V. Hnatenko, and V. V. Lukinov, *Nauka ta Progres Transportu*, **54**, No. 6: 87 (2014).
3. W. R. Osyrio, I. R. Garcia, P. R. Goulart, and A. Garcia, *Mater. Chem. Phys.*, **106**, Nos. 2–3: 343 (2007).
4. R. Gecu, S. Acar, A. Kisasoz, G. K. Altug, and A. Karaaslan, *Trans. Nonferrous Metals Society of China*, **28**, No. 3: 385 (2018).
5. B. Dang, X. Zhang, Y. Z. Chen, C. X. Chen, H. T. Wang, and F. Liu, *Scientific Reports*, No. 6: Article number: 30874 (2016).
6. L. F. Mondolfo, *Aluminium Alloys: Structure and Properties* (Elsevier: 1976).
7. A. N. Prudnikov, M. V. Popova, and V. A. Prudnikov, *Bulletin of the Siberian State Industrial University*, No. 3: 11 (2017).
8. Y. Liu, J. Li, H. Sun, J. Cheng, X. Ren, and P. Jiang, *J. Mater. Res. Technol.*, No. 14: 2571 (2021).
9. V. V. Kaverynskyi, A. I. Trotsan, and Z. P. Sukhenko, *Metallurgicheskaya i Gornorudnaya Promyshlennost* [Metallurgical and Mining Industry], No. 3: 48 (2020).

PACS numbers: 46.55.+d, 47.10.A-, 81.20.Wk, 81.40.Lm, 81.40.Pq, 83.50.-v

Modelling and Simulation of the Plastic Flows in Metal

M. O. Kurin, O. O. Horbachov, A. V. Onopchenko, and T. V. Loza

*National Aerospace University 'Kharkiv Aviation Institute',
17 Chkalov Str.,
UA-61070 Kharkiv, Ukraine*

One of the most important problems in cutting theory is modelling behaviour of cut material accompanied by significant plastic deformations. Determination the chip patterns formation allows to build a theory of entire complex of processes and phenomena occurring in cutting zone. Various schemes, methods and types of processing define a wide variety of implementation schemes with a wide range of orientation cutting edge relative to velocity vector of main working movement. In this regard, it becomes necessary to analyse basic schemes of metal flow around plate. Combination of various schemes can be used to obtain any processing scheme using the principle of superposition. Before, we have developed a new method constructing velocity fields, which is devoid of drawbacks and contradictions of other methods determining the displacements velocity fields. Thus, it becomes necessary to obtain particle velocity fields for basic schemes using the hyperbola method.

Key words: hyperbola method, plastic deformation, potential flow, velocity fields, vortex flow.

Однією з найважливіших проблем теорії різання є моделювання поведінки матеріалу, що зрізується при різанні, що супроводжується значними пластичними деформаціями. Визначення утворення стружки дає можливість побудувати теорію всього комплексу процесів і явищ, що відбуваються в зоні різання. Різноманітні схеми, методи та види оброблення визначають різноманітні схеми реалізації з широким діапазоном орієнтації ріжучої кромки відносно вектора швидкості основного робочого руху. У зв'язку з цим виникає необхідність проаналізувати основні схеми обтікання металу навколо пластини. Комбінація різних схем може бути ви-

Corresponding author: Oleksiy Oleksandrovych Horbachov
E-mail: o.horbachov@khai.edu

Citation: M. O. Kurin, O. O. Horbachov, A. V. Onopchenko, and T. V. Loza, Modelling and Simulation of the Plastic Flows in Metal, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **44**, No. 6: 785–806 (2022). DOI: [10.15407/mfint.44.06.0785](https://doi.org/10.15407/mfint.44.06.0785)

користана для одержання будь-якої схеми оброблення за принципом суперпозиції. Раніше нами була розроблена нова метода побудови полів швидкості, яка позбавлена недоліків і протиріч інших метод визначення переміщень полів швидкостей. Таким чином, виникає необхідність одержати поля швидкості частинок для базових схем методою гіперболи.

Ключові слова: метода гіперболи, пластична деформація, потенційний потік, поля швидкостей, вихровий потік.

(Received February 24, 2022; in final version, May 2, 2022)

1. INTRODUCTION

The most important general problem of any type machining of metals is to determine the main technological parameters, which include energy-power characteristics, such as deforming force, work, power, as well as the optimal parameters of the processing mode. Metal forming operations [1] are distinguished by the importance of such components as the maximum allowable degree of deformation workpiece [2], as well as its shape and initial dimensions [3].

The optimal technological parameters of mode turning [4], milling and drilling [5] should be understood as such processing parameters that, at maximum productivity [6], guarantee at least required quality of products [7], and ideally, the most favourable characteristics of the surface layer [8], providing an increase in resource characteristics and levelling negative impact of technological heredity [9] of previous operations. Real technological processes have operations [10] in which processing modes can rarely be called optimal [11], so the need to ensure quality of surface layer [12] forces us to assign processing modes to detriment of productivity [13], especially in grinding operations.

Determination of energy-power characteristics is fundamental to purpose of technological processing modes [14], therefore, the choice of equipment and equipping the operation, as well as the parts obtained quality depends on the magnitude of these factors [15]. Calculation of the power characteristics cannot be carried out without determining stress-strain state of the metal during processing [16]. Based on above considerations, it can be concluded that in order to effectively predict the power characteristics of various processes and operations of pressure, rolling and cutting, it is necessary to develop mathematical models reflecting relationship between functional characteristics of process and technological parameters of the processing modes. Correct construction of model is possible if a structural and logical scheme. One determines the methods and sequence of theoretical and experimental studies. The most suitable methods for calculating plastic deformation processes are methods based on a closed system equations of continuum mechanics [17]. In this case, the deformed metal is consid-

ered as an idealized continuous medium [18] with averaged mechanical properties of a real metal. In fact, a four-dimensional space is introduced to describe the deformation process. The deformation process as a whole can be described by introducing function of four variables describing the field of displacement velocities. In most cases, solving applied technological problems for constructing desired velocity field, one can do with functions of two or three variables, especially when describing stationary processes. Analysis of process kinematics and initial prerequisites, as well as a rational choice of the coordinate system make it possible to quickly obtain displacement velocity field. Calculating stress-strain state of the metal and energy-power characteristics is based on velocity field.

2. LITERATURE REVIEW. FORMULATION OF THE PROBLEM

The chip formation process, which ensures the formation of a new surface, is accompanied by significant elastoplastic deformations, deformation rates, friction forces along the front and rear surfaces of the tool, build-up, an increase in hardness of deformable metal layers and significant heat release in the contact zone [19]. The emergence and development of mechanical, thermal and thermomechanical phenomena in the cutting zone is accompanied by occurrence of such important contact processes as adsorption, adhesion, desorption, redox processes, thermal destruction of cutting fluid, *etc.* This complex phenomenon has a significant impact on tool wear and the quality of the machined surface. [20]. Therefore, an important problem of cutting mechanics is to simulate behaviour of the cut layer during various technological processing operations, under conditions of significant plastic deformations.

A wide variety of geometric shapes of cutting inserts, which are widely used in modern cutting and differ in a wide range of angles and geometry of chip breakers, requires the construction of velocity fields that would describe the contact of removed chips with the wedge [21]. A detailed description of such contact requires a breakdown of the rake face of the tool into elementary components the pattern of velocity fields in the flow around which is known. Further, the subsequent construction of an integral picture is required, taking into account tool bit peculiarities and the kinematics of processing.

In the mechanics of a deformable body, a postulate is formulated [22], which reflects key requirement for the velocity fields of displacements in the plastic flow of metal. The essence of this postulate boils down to the following: the velocities field of particle displacement during plastic flow of metal, taking into account its incompressibility in considered region, should be solenoidal or vortex, which is mathematically expressed as follows:

$$\begin{cases} \nabla V = 0, \\ \nabla \times V = 0. \end{cases} \quad (1)$$

A large number of plotted particle displacement velocity fields that satisfy condition (1) have shown their effectiveness for investigation state of the material of a part and chips with various processing methods. Previously, we developed the hyperbole method [23] and noted its versatility, which makes it possible to solve a large class of problems in the analysis of deformation fields arising in deformation zone during various mechanical operations. Thus, the hyperbole method made it possible to effectively research the process of chip flow and its deformation when a wedge is introduced into the material for free and non-free cutting, as well as when an abrasive grain is introduced, which is important in the research of abrasive processing methods [24].

It is easy to see that direction of metal flow during deformation can be approximated by a hyperbola [25], just like flow of metal chips during cutting, if we analyse the macrostructure of the metal and direction of the fibres in part after forming processes [26]. At the same time, variety of metal forming operations [27] from dividing operations and punching to multi-strand stamping including the tools used in this case raise issue of finding an approximating flow curve for each operation individually. In most cases, the desired curve cannot be described by one branch of the hyperbola [28] (Fig. 1) within the selected coordinate system. As well, in certain operations of metal forming by pressure using tool the working surface of which or its part is a circle or an arc. In our opinion, all variety of metal production lines can be reduced to solving several problems that satisfactorily describe behaviour of the metal during deformation, namely: the flow around a wedge, plane and cylinder.

3. STRUCTURE OF INVESTIGATION OF ENERGY-POWER PARAMETERS OF MACHINING PROCESSES

An increase the efficiency of technological processes is inevitably associated with optimization of processing modes [29] and the prediction of power factors [30]. Many works are devoted to research the plastic flow of metal [31], the main results of which are presented in review [32].

The theoretical calculation of power factors is most rational to carry out according to methodology described in [33].

In this case, the deformable metal is considered as an idealized continuous medium with averaged mechanical properties of a real metal. Actually, in this instance, a four-dimensional space is introduced to describe the deformation process, and deformation process in general can be described by introducing function of four variables:

$$f(x, y, z, ct) = 0.$$

A theoretical analysis of the majority of technological processes along with the conducted experiments allows us to determine the nature of dependence velocity of particles plastic deformable metal on coordinates. The velocity of particles in four-dimensional space can be represented through a velocity vector:

$$\mathbf{V} = v_x \mathbf{i} + v_y \mathbf{j} + v_z \mathbf{k} + v_t \mathbf{n}. \quad (2)$$

The law constancy of a volume during the deformation is expressed by the continuity equation:

$$\operatorname{div} \mathbf{V} = 0. \quad (3)$$

Using Eqs. (2) and (3), we can determine the form of functional dependence of speed on coordinates. Thus, the particles velocity field of material is determined, which makes it possible to calculate the strain rates and their intensity using the formulas:

$$\begin{aligned} \varepsilon_{q_1 q_1} &= \frac{1}{H_1} \frac{\partial V_{q_1}}{\partial q_1} + \frac{V_{q_2}}{H_1 H_2} \frac{\partial H_1}{\partial q_2} + \frac{V_{q_3}}{H_1 H_3} \frac{\partial H_1}{\partial q_3}, \\ \varepsilon_{q_1 q_2} &= \frac{1}{H_2} \frac{\partial V_{q_1}}{\partial q_2} + \frac{1}{H_1} \frac{\partial V_{q_2}}{\partial q_1} - \frac{V_{q_1}}{H_1 H_2} \frac{\partial H_1}{\partial q_1} - \frac{V_{q_2}}{H_1 H_2} \frac{\partial H_2}{\partial q_1}, \end{aligned} \quad (4)$$

where q_1, q_2 , and q_3 are orthogonal curvilinear coordinates.

In this case, the coupling equations hold:

$$x = x(q_1, q_2, q_3), \quad y = y(q_1, q_2, q_3), \quad z = z(q_1, q_2, q_3),$$

$$H_k = \sqrt{\sum_{i=1}^3 \left(\frac{\partial x_i}{\partial q_k} \right)^2}$$

— Lamé parameters,

$$\varepsilon_i = \frac{\sqrt{2}}{3} \sqrt{(\varepsilon_{q_1 q_2} - \varepsilon_{q_2 q_2})^2 + (\varepsilon_{q_2 q_2} - \varepsilon_{q_3 q_3})^2 + (\varepsilon_{q_3 q_3} - \varepsilon_{q_1 q_1})^2 + \frac{3}{2}(\varepsilon_{q_1 q_2}^2 + \varepsilon_{q_2 q_3}^2 + \varepsilon_{q_3 q_1}^2)}. \quad (5)$$

Next, it is necessary to determine components of deformation to find the energy-power process parameters:

$$e_{11} = \int \varepsilon_{11} dt, \quad e_{22} = \int \varepsilon_{22} dt,$$

and deformation intensity:

$$e_i = \frac{\sqrt{2}}{3} \sqrt{(e_{11} - e_{22})^2 + (e_{22} - e_{33})^2 + (e_{33} - e_{11})^2 + \frac{3}{2}(e_{12}^2 + e_{23}^2 + e_{31}^2)}.$$

An important characteristic machining processes is work of deformation which allows us to determine the power parameters. The total work of deformation is determined by integrating elementary work by volume:

$$A = \int \int \int \left(\rho V \frac{\partial V}{\partial t} + P_x \frac{\partial V}{\partial x} + P_y \frac{\partial V}{\partial y} + P_z \frac{\partial V}{\partial z} \right) dV dt. \quad (6)$$

Two functions were introduced in [5] by author. The first is called speed function:

$$L = \rho V \frac{\partial V}{\partial t}. \quad (7)$$

Part of equation (6) expresses the energy dissipation function:

$$E = P_x \frac{\partial V}{\partial x} + P_y \frac{\partial V}{\partial y} + P_z \frac{\partial V}{\partial z}. \quad (8)$$

The speed function is work aimed at increasing kinetic energy of elementary volume of metal in deformation process. The energy dissipation function is that part of work that take place into the material's own deformation. Taking into account (7) and (8), we rewrite equation (6) in the following form:

$$A = \int \int \int (L + E) dV dt. \quad (9)$$

If deformation is carried out at a low speed, then velocity function has a sufficiently small value in comparison with the energy dissipation function and can be neglected. In this case, work of deformation will be determined through the function of energy dissipation:

$$A = \int \int \int E dV dt. \quad (10)$$

Investigations in the deformation zone flow of deformed metal [34], especially in particular case of the formation and flow of chips [35] with different variants of flow around the cutting wedge [36], will allow constructing the initial velocity field, investigating in detail the stress-strain state in deformation zone and energy-force characteristics of the process. This approach will also make it possible to design model of the formation, development and annihilation of dislocations, which are the key to understanding the whole range of contact processes, such as hardening [37], adsorption, adhesion, *etc.*

3.1. Wedge Flows

For the convenience of work, the designations in parametric equations describing coordinates and velocity components will be marked with indices corresponding to position of curve in the plane quadrants. In this case, first number denotes the quadrant—beginning of movement along curve, and second—the end. The plastic flow of a metal upon penetration wedge into a rigid-plastic body has symmetry and geometric similarity relative to the axis of symmetry of the wedge, which is quite obvious and confirmed by recently developed model of crystal plasticity with gradient enhancement [38]. This flow is most typical for separation operations of metal forming or cutting.

The equation for branches of hyperbolas lying in quadrants 21 can be written by the system of equations:

$$\begin{cases} x_{21}(t) = a \sinh(\omega t + C) \cos \alpha + b \cosh(\omega t + C) \sin \alpha, \\ y_{21}(t) = -a \sinh(\omega t + C) \sin \alpha + b \cosh(\omega t + C) \cos \alpha. \end{cases} \quad (11)$$

where ω , C is some constants, t is time, a is semi-major axis, and b is semi-minor axis.

The components of speed movement are obtained by differentiating system (11) with respect to time [23]:

$$\begin{cases} V_{x21}(t) = a\omega \cosh(\omega t + C) \cos \alpha + b\omega \sinh(\omega t + C) \sin \alpha, \\ V_{y21}(t) = b\omega \sinh(\omega t + C) \cos \alpha - a\omega \cosh(\omega t + C) \sin \alpha. \end{cases} \quad (12)$$

The field of particle velocities during flow around edge of the wedge can be represented as:

$$\begin{cases} V_{x21}(x, y) = V_0(\omega(x, y)(e^2 - 1))^{-1/2} [(x \cos \alpha - y \sin \alpha)e^2 \sin \alpha + y], \\ V_{y21}(x, y) = V_0(\omega(x, y)(e^2 - 1))^{-1/2} [(x \cos \alpha - y \sin \alpha)e^2 \cos \alpha - x], \\ \omega(x, y) = \frac{e^2 \{x_0 \cos \alpha + [\sin^2 \alpha (1 - e^2)((a(x, y))^2 (e^2 \sin^2 \alpha - 1) - x_0^2)]^{1/2}\}^2}{(1 - e^2 \sin^2 \alpha)^2} + \\ \quad + (a(x, y))^2, \\ a(x, y) = [(x \cos \alpha - y \sin \alpha)^2 e^2 - (x^2 + y^2)]^{1/2} (1 - e^2)^{-1/2}. \end{cases} \quad (13)$$

where V_0 is cutting speed, e is eccentricity of hyperbola, x_0 is coordinate determines the plastic flow beginning.

In order to obtain equation of the hyperbolas branches located in quadrants 34, it is necessary to change the signs to opposite in the equation $y(t)$ of system (11), then we get:

$$\begin{cases} x_{34}(t) = a \sinh(\omega t + C) \cos \alpha + b \cosh(\omega t + C) \sin \alpha, \\ y_{34}(t) = a \sinh(\omega t + C) \sin \alpha - b \cosh(\omega t + C) \cos \alpha. \end{cases} \quad (14)$$

System (12) will take the form:

$$\begin{cases} V_{x_{34}}(t) = a\omega \cosh(\omega t + C) \cos \alpha + b\omega \sinh(\omega t + C) \sin \alpha, \\ V_{y_{34}}(t) = a\omega \cosh(\omega t + C) \sin \alpha - b\omega \sinh(\omega t + C) \cos \alpha. \end{cases} \quad (15)$$

The field of particle velocities during flow around edge will take the form:

$$\begin{cases} V_{x_{34}}(x, y) = V_0(\omega(x, y)(e^2 - 1))^{-1/2}[(x \cos \alpha + y \sin \alpha)e^2 \sin \alpha - y], \\ V_{y_{34}}(x, y) = V_0(\omega(x, y)(e^2 - 1))^{-1/2}[-(x \cos \alpha - y \sin \alpha)e^2 \cos \alpha + x], \\ \omega(x, y) = \frac{e^2 \{x_0 \cos \alpha + [\sin^2 \alpha (1 - e^2)((a(x, y))^2 (e^2 \sin^2 \alpha - 1) - x_0^2)]^{1/2}\}^2}{(1 - e^2 \sin^2 \alpha)^2} + \\ \quad + (a(x, y))^2, \\ a(x, y) = [(x \cos \alpha + y \sin \alpha)^2 e^2 - (x^2 + y^2)]^{1/2} (1 - e^2)^{-1/2}. \end{cases} \quad (16)$$

3.2. Flow around a Plate with Horizontal Component Only

The equation of hyperbola located in quadrants 21 is identical to the previously obtained system (1)–(3). To obtain equation for the branches of hyperbolas located in the 3rd quadrant in the form of system (11), we will use the following algorithm. First of all, in the adopted coordinate system, is necessary to change sign in equation $y(t)$ of system (11), then it is necessary to take into account that true angle $[\gamma] = \pi - \gamma$, and the true one $[\alpha] = -\pi/2 + \gamma/2$, but taking into account that $a = -\gamma/2$, $[\alpha] = -\pi/2 - \alpha$, $b_{33} = a \operatorname{tg}((\pi - \gamma)/2)$ is the hyperbola parameter. After substituting $[\alpha]$ and b_{33} into system (11), we obtain the equations describing the desired trajectory of motion:

$$\begin{cases} x_{33}(t) = -a \sinh(\omega t + C) \sin \alpha - \frac{a^2}{b} \cosh(\omega t + C) \cos \alpha, \\ y_{33}(t) = -a \sinh(\omega t + C) \cos \alpha + \frac{a^2}{b} \cosh(\omega t + C) \sin \alpha. \end{cases} \quad (17)$$

Differentiating system (17) with respect to time, we obtain the speeds:

$$\begin{cases} V_{x33}(t) = -\omega[a \cosh(\omega t + C) \sin \alpha + \frac{a^2}{b} \sinh(\omega t + C) \cos \alpha], \\ V_{y33}(t) = \omega[\frac{a^2}{b} \sinh(\omega t + C) \sin \alpha - a \cosh(\omega t + C) \cos \alpha]. \end{cases} \quad (18)$$

Using the technique described in [23], we obtain from system (18) the velocity field in Euler coordinates:

$$\begin{cases} V_{x33}(x, y) = V_0(\omega(x, y)(e^2 - 1))^{-1/2} [\cos \alpha(x \sin \alpha + y \cos \alpha) - (e^2 - 1)y], \\ V_{y33}(x, y) = -V_0(\omega(x, y)(e^2 - 1))^{-1/2} [e^2 \sin \alpha(x \sin \alpha - y \cos \alpha) - (e^2 - 1)x], \\ \omega(x, y) = ((e^2 - 1)(e^2 \sin^2 \alpha - 1))^{-2} e^2 \{ [\cos^2 \alpha (x_0^2 (e^2 - 1) - (a(x, y))^2 (1 - \\ - e^2 \sin^2 \alpha))]^{1/2} - x_0 \sin \alpha (e^2 - 1) \}^2 + (a(x, y))^2, \\ a(x, y) = \sqrt{(x^2 + y^2)(e^2 - 1) - (y \cos \alpha + x \sin \alpha)^2 e^2}. \end{cases} \quad (19)$$

3.3. Flow around a Plate with Vertical Component Only

To get the trajectory 23 from equations (11) describing the motion along the hyperbola, it is necessary to swap $x(t)$ and $y(t)$ and change sign in expressions to the opposite, then we get:

$$\begin{cases} x_{23}(t) = -(-a \sinh(\omega t + C) \sin \alpha_{23} + b_{23} \cosh(\omega t + C) \cos \alpha_{23}), \\ y_{23}(t) = -(a \sinh(\omega t + C) \cos \alpha_{23} + b_{23} \cosh(\omega t + C) \sin \alpha_{23}). \end{cases} \quad (20)$$

Evidently $[\gamma] = \pi/2 - \gamma$ is valid angle, and $[\alpha_{23}] = -[\gamma]/2 = -\pi/4 + \gamma/2 = -\pi/4 - \alpha$; hyperbola parameter $b_{23} = \text{atg}(\pi/4 - \gamma/2) = a(a - b)/(a + b)$. Then we get the equation: $\sin \alpha_{23} = -2^{-1/2}(\cos \alpha + \sin \alpha)$ and $\cos \alpha_{23} = 2^{-1/2}(\cos \alpha - \sin \alpha)$. After substitution, system (20) will take the following form:

$$\begin{cases} x_{23}(t) = -\frac{\sqrt{2}a}{2} \sinh(\omega t + C)(\cos \alpha + \sin \alpha) - \\ -\frac{\sqrt{2}a(a - b)}{2(a + b)} \cosh(\omega t + C)(\cos \alpha - \sin \alpha), \\ y_{23}(t) = -\frac{\sqrt{2}a}{2} \sinh(\omega t + C)(\cos \alpha - \sin \alpha) + \\ +\frac{\sqrt{2}a(a - b)}{2(a + b)} \cosh(\omega t + C)(\cos \alpha + \sin \alpha). \end{cases} \quad (21)$$

The velocities will look like this:

$$\left\{ \begin{aligned} V_{x23}(t) &= -\frac{\sqrt{2}\omega}{2} [a \cosh(\omega t + C)(\cos \alpha + \sin \alpha) + \\ &\quad + a \frac{a-b}{a+b} \sinh(\omega t + C)(\cos \alpha - \sin \alpha)], \\ V_{y23}(t) &= \frac{\sqrt{2}\omega}{2} [a \frac{a-b}{a+b} \sinh(\omega t + C)(\cos \alpha + \sin \alpha) - \\ &\quad - a \cosh(\omega t + C)(\cos \alpha - \sin \alpha)]. \end{aligned} \right. \quad (22)$$

System (22) is transformed into the following:

$$\left\{ \begin{aligned} V_{x23}(x, y) &= V_0(\omega(x, y))^{-1/2} (2 - e^2)^{-1} (-(y \sin 2\alpha - x \cos 2\alpha)e^2 + 2y\sqrt{e^2 - 1}), \\ V_{y23}(x, y) &= -V_0(\omega(x, y))^{-1/2} (2 - e^2)^{-1} (-(x \sin 2\alpha + y \cos 2\alpha)e^2 - 2x\sqrt{e^2 - 1}), \\ \omega(x, y) &= \frac{((2 - e^2)Y_0(\sin \alpha + \cos \alpha) - (1 + \sqrt{e^2 - 1})\zeta(x, y))^2}{2(e^2 \sin 2\alpha - 2\sqrt{e^2 - 1})^2} \times \\ &\quad \times \frac{2e^2}{e^2 + 2\sqrt{e^2 - 1}} - (a(x, y))^2 \frac{e^2 - 2\sqrt{e^2 - 1}}{e^2 + 2\sqrt{e^2 - 1}}, \\ a(x, y) &= \left(\frac{2\sqrt{e^2 - 1}(x^2 + y^2) - e^2(\sin 2\alpha(x^2 - y^2) + 2xy \cos 2\alpha)}{e^2 - 2\sqrt{e^2 - 1}} \right)^{1/2}, \\ \zeta(x, y) &= ((1 - \sin 2\alpha)Y_0^2(e^2 + 2\sqrt{e^2 - 1}) - (a(x, y))^2(e^2 \sin 2\alpha - 2\sqrt{e^2 - 1}))^{1/2}, \end{aligned} \right.$$

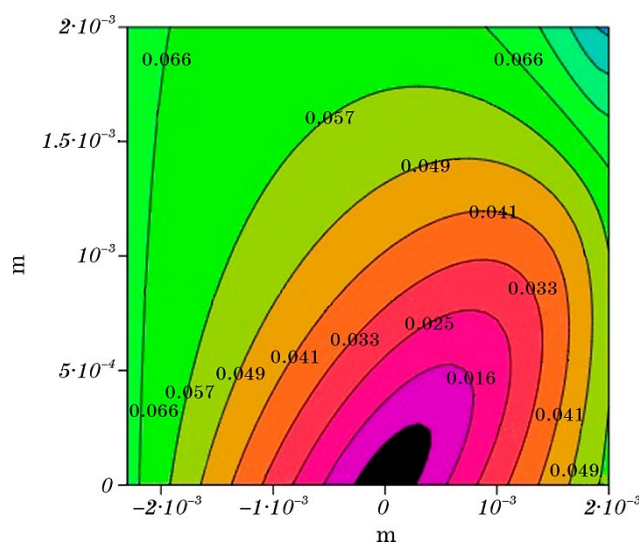


Fig. 1. Displacement velocity field around a wedge (top) quadrants 21.

where Y_0 is coordinate determines the plastic flow beginning.

To describe the trajectory of movement 11, we use same technique, change $y(t)$ to $x(t)$ and change the sign of $y(t)$ to the opposite:

$$\begin{cases} x_{11}(t) = -a \sinh(\omega t + C) \sin \alpha_{11} + b_{11} \cosh(\omega t + C) \cos \alpha_{11}, \\ y_{11}(t) = -(a \sinh(\omega t + C) \cos \alpha_{11} + b_{11} \cosh(\omega t + C) \sin \alpha_{11}). \end{cases} \quad (23)$$

In this case, the actual angle will be $[\gamma] = \gamma + \pi/2$, and $[\alpha_{11}] = -(\pi/2 + \gamma)/2 = -\pi/4 - \gamma/2 = -\pi/4 + \alpha$. Hyperbola parameter $b_{11} = a \operatorname{tg}(\pi/4 + \gamma/2) = a(a+b)/(a-b)$, $\sin \alpha_{11} = 2^{-1/2}(\sin \alpha - \cos \alpha)$ and $\cos \alpha_{11} = 2^{-1/2}(\cos \alpha + \sin \alpha)$. After substitution, we get:

$$\begin{cases} x_{11}(t) = \frac{\sqrt{2}a}{2} \sinh(\omega t + C)(\cos \alpha - \sin \alpha) + \\ + \frac{\sqrt{2}a(a+b)}{2(a-b)} \cosh(\omega t + C)(\cos \alpha + \sin \alpha), \\ y_{23}(t) = -\frac{\sqrt{2}a}{2} \sinh(\omega t + C)(\cos \alpha + \sin \alpha) + \\ + \frac{\sqrt{2}a(a+b)}{2(a-b)} \cosh(\omega t + C)(\cos \alpha - \sin \alpha). \end{cases} \quad (24)$$

The speed will look like:

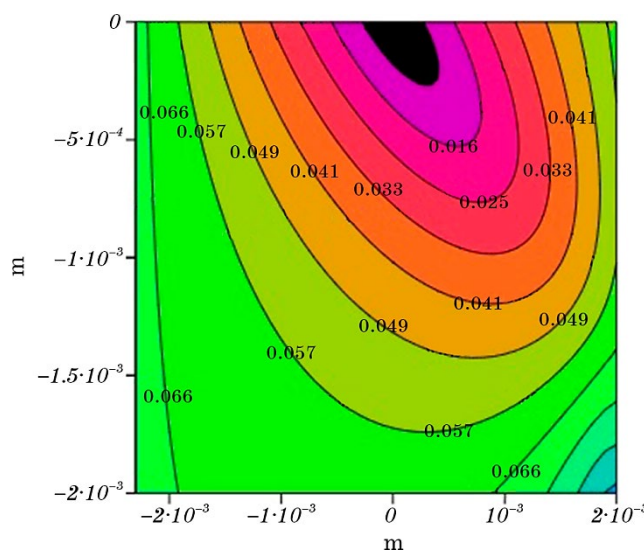


Fig. 2. Displacement velocity field around a wedge (bottom) quadrants 34.

$$\left\{ \begin{array}{l} V_{x11}(t) = \frac{\sqrt{2}\omega}{2} [a \cosh(\omega t + C)(\cos \alpha - \sin \alpha) + \\ + \frac{a(a+b)}{a-b} \sinh(\omega t + C)(\cos \alpha + \sin \alpha)], \\ V_{y11}(t) = \frac{\sqrt{2}\omega}{2} [-a \cosh(\omega t + C)(\cos \alpha + \sin \alpha) + \\ + \frac{a(a+b)}{a-b} \sinh(\omega t + C)(\cos \alpha - \sin \alpha)]. \end{array} \right. \quad (25)$$

System (25) is transformed to the form:

$$\left\{ \begin{array}{l} V_{x11}(x, y) = V_0(\omega(x, y))^{-1/2} (2 - e^2)^{-1} (-(y \sin 2\alpha - x \cos 2\alpha)e^2 + 2y\sqrt{e^2 - 1}), \\ V_{y11}(x, y) = -V_0(\omega(x, y))^{-1/2} (2 - e^2)^{-1} (-(y \cos 2\alpha + x \sin 2\alpha)e^2 - 2x\sqrt{e^2 - 1}), \\ \omega(x, y) = ((2\sqrt{e^2 - 1} - e^2)Y_0(\sin \alpha + \cos \alpha) + (1 + \sqrt{e^2 - 1})(\cos \alpha - \\ - \sin \alpha)\zeta(x, y))^2 \frac{1}{2(e^2 \sin 2\alpha - 2\sqrt{e^2 - 1})^2} \frac{2e^2}{e^2 - 2\sqrt{e^2 - 1}} + (a(x, y))^2, \\ a(x, y) = \left(\frac{-2\sqrt{e^2 - 1}(x^2 + y^2) + e^2(\sin 2\alpha(x^2 - y^2) + 2xy \cos 2\alpha)}{e^2 + 2\sqrt{e^2 - 1}} \right)^{1/2}, \\ \zeta(x, y) = (Y_0^2(e^2 - 2\sqrt{e^2 - 1}) - (a(x, y))^2(e^2 \sin 2\alpha - 2\sqrt{e^2 - 1}))^{1/2}. \end{array} \right. \quad (26)$$

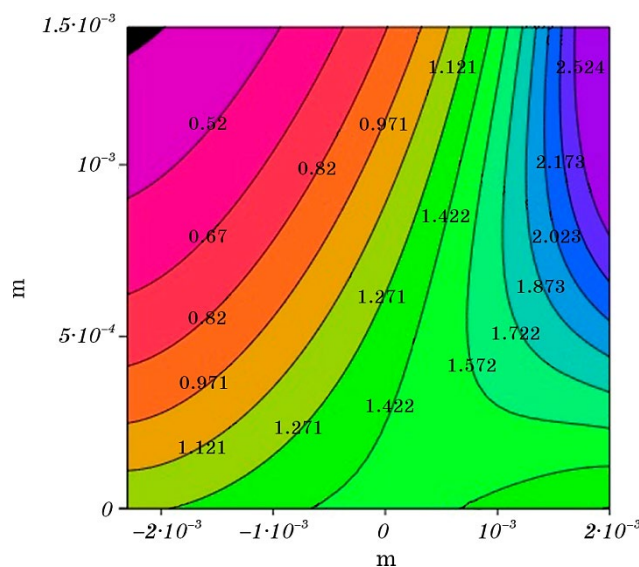


Fig. 3. Deformation intensity around a wedge (top) quadrants 21.

4. INVESTIGATION MATERIAL DEFORMATION PROCESS IN CUTTING ZONE

The systems equations of displacement velocity field above satisfy condition (1) obtained by us, which is quite easy to verify by performing appropriate calculations. Here and below for cases we have got considered will not give intermediate analytical expressions due to the bulkiness of the expressions obtained. We will only outline sequence of mathematical operations that allow us to determine the important physical quantities characterizing the deformed state of chip material.

Based on displacement velocity field, it is easy to calculate a strain rate component, which in the case of specifying the velocity field in Cartesian coordinates, can be calculated using the dependencies:

$$\begin{aligned}\varepsilon_{xx} &= \frac{\partial V_x}{\partial x}, \varepsilon_{yy} = \frac{\partial V_y}{\partial y}, \varepsilon_{xy} = \frac{\partial V_x}{\partial y} + \frac{\partial V_y}{\partial x}, \\ \varepsilon_{zz} &= \frac{\partial V_z}{\partial z}, \varepsilon_{yz} = \frac{\partial V_y}{\partial z} + \frac{\partial V_z}{\partial y}, \varepsilon_{zx} = \frac{\partial V_z}{\partial x} + \frac{\partial V_x}{\partial z}.\end{aligned}\quad (27)$$

Next, we determine the components of deformation for Cartesian coordinates

$$\begin{aligned}e_{xx} &= \int \varepsilon_{xx} dt, e_{yy} = \int \varepsilon_{yy} dt, e_{xy} = \int \varepsilon_{xy} dt, \\ e_{zz} &= \int \varepsilon_{zz} dt, e_{yz} = \int \varepsilon_{yz} dt, e_{zx} = \int \varepsilon_{zx} dt.\end{aligned}\quad (28)$$

Complexes of formulas (27) and (28) allow calculating the intensities

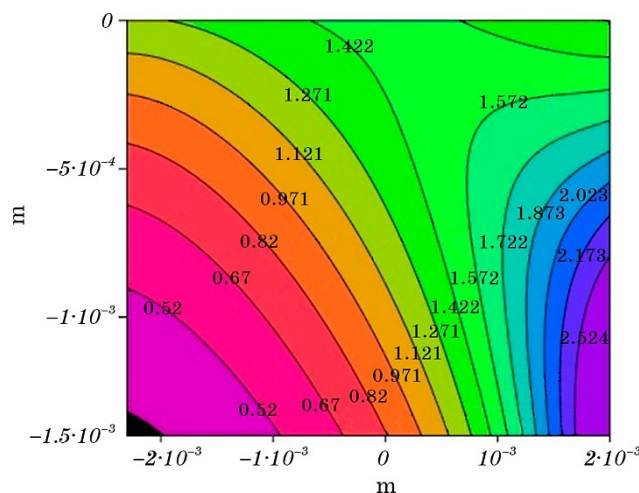


Fig. 4. Deformation intensity around a wedge (bottom) quadrants 34.

of strain rates and strain in Cartesian coordinates:

$$\begin{aligned}\varepsilon_i &= \frac{\sqrt{2}}{3} \sqrt{(\varepsilon_{xx} - \varepsilon_{yy})^2 + (\varepsilon_{yy} - \varepsilon_{zz})^2 + (\varepsilon_{zz} - \varepsilon_{xx})^2 + \frac{3}{2}(\varepsilon_{xy}^2 + \varepsilon_{yz}^2 + \varepsilon_{zx}^2)}, \\ e_i &= \frac{\sqrt{2}}{3} \sqrt{(e_{xx} - e_{yy})^2 + (e_{yy} - e_{zz})^2 + (e_{zz} - e_{xx})^2 + \frac{3}{2}(e_{xy}^2 + e_{yz}^2 + e_{zx}^2)}.\end{aligned}\quad (29)$$

It is enough in the first approximation to analyse displacement velocities field and deformation intensities field to assess the deformed state of material. Let us carry out calculation and construction the fields of displacement velocities and deformation intensities for specific processing conditions. The specified geometric shapes tool interaction modelling will be carried out under identical initial technological conditions. As an example, let us take the processing modes typical for operation of broaching grooves in heat-resistant alloys. Consider the deformation process material in contact with the tool in the form of wedge-plane at a processing speed $V = 4$ m/min. In order to obtain a more visual picture and convenience of analysis, we will choose the tilt angle of working planes for wedge and plate section at velocity horizontal component $\gamma = 60^\circ$ (streamlines 21, 34 and 33). To describe the plastic flow of metal along streamlines 11 and 23, we take $\gamma = 30^\circ$. The plastically deformed zone boundaries, as well as the length of contact of chips with plate front surface are: $|X_0| = |Y_0| = 2.23 \cdot 10^{-3}$ m, $C \approx 0.2 \cdot 10^{-3}$ m. The deformation intensity calculation is performed at

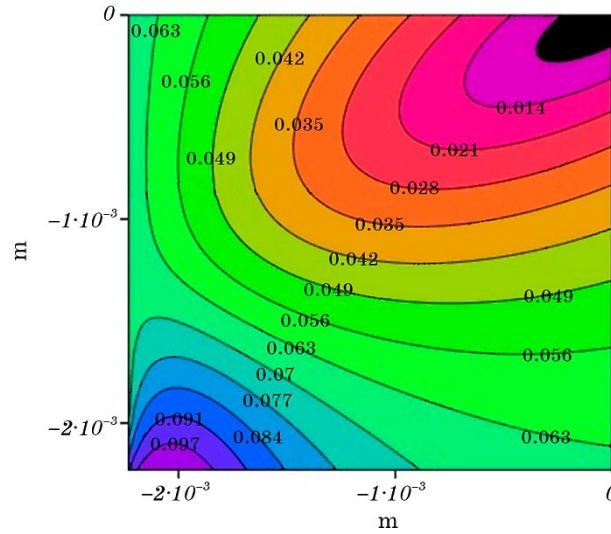


Fig. 5. Displacement velocity field around a plate (horizontal component) quadrants 33.

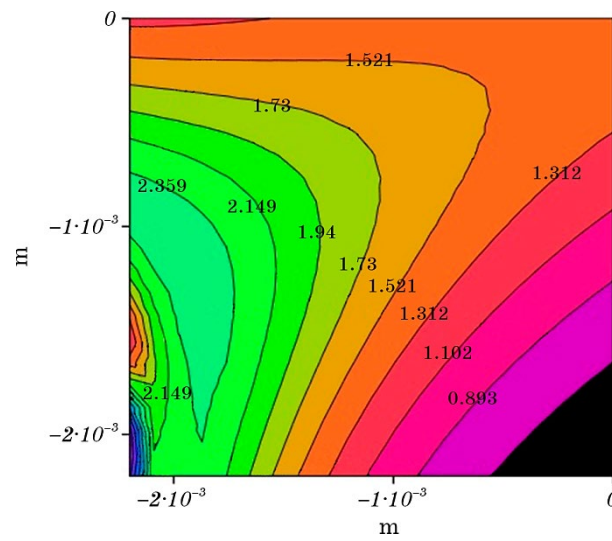


Fig. 6. Deformation intensity around a plate (horizontal component) quadrants 33.

the final moment of time $t_k = (|X_0| + C)/V$.

Let's consider the plotted graphs in detail. It is most convenient to analyse the displacement velocity fields in parallel with deformations (Figs. 1–10). This approach ensures integral picture formation of the

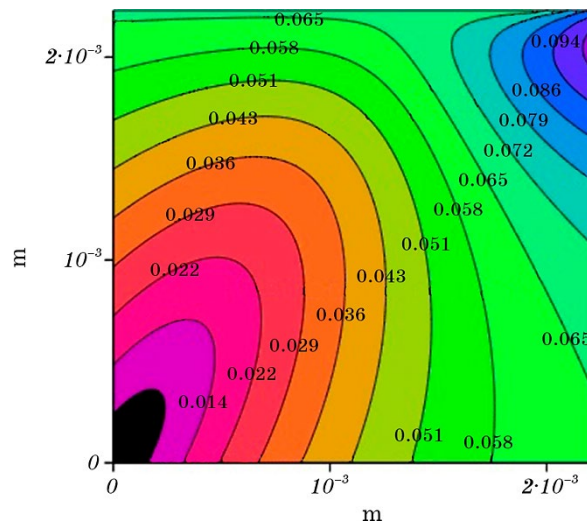


Fig. 7. Displacement velocity field around a plate (vertical component) quadrants 11.

plastic flow of the metal. The streamlines of the displacement velocity fields for all consideration problems have a characteristic slope relative to the ordinate axis, corresponding to inclination plane angle (Figs. 1, 2, 5, 7, 9). For all cases, velocity modulus decrease is noted as we approach the origin of the coordinate system. This is explained by the deceleration of the metal against tool surface in directly contacting layers and a natural resistance decrease metal flow with distance from disturbance source, which is working part of the tool. The strain intensities field repeats tool geometry for all considered cases (Figs. 3, 4, 6, 8, 10). The highest deformation intensity corresponds to the lowest metal flow rate, which is explained by the much larger metal deformations near the shear plane.

Let us analyse in detail the features of obtained fields for each of tasks. Flowing around a wedge the fields of displacement velocities and deformation intensities have symmetry about the OX axis, the isolines inclination angle corresponds to angle wedge. At the start point $|X_0| = |Y_0| = 2.23 \cdot 10^{-3}$ m, the flow rate is equal to processing speed, which corresponds to undeformed material flow rate and it is consistent with the initial conditions.

The flow around plate at horizontal velocity component in octant 33 (Figs. 5, 6) also agrees with the physical concepts we are developing. This reduces speed as it approaches origin where the tool plane is located. The isolines of strain intensity field repeat flow lines material. The magnitude of deformations intensity is greater than in case of flow around a wedge (Figs. 3, 4), with similar technological processing parameters (angle of inclination working plane, coordinate beginning

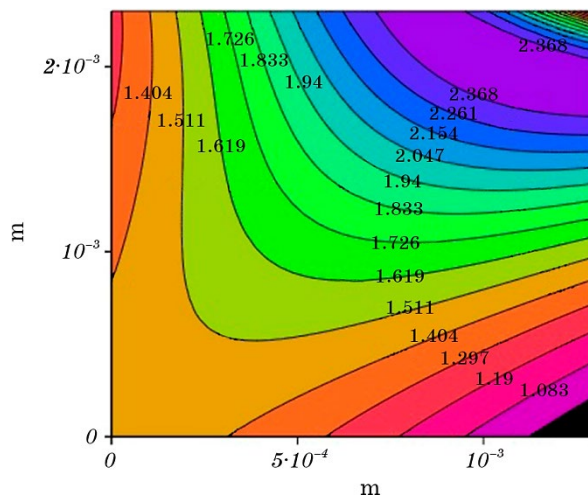


Fig. 8. Deformation intensity around a plate (vertical component) quadrants 11.

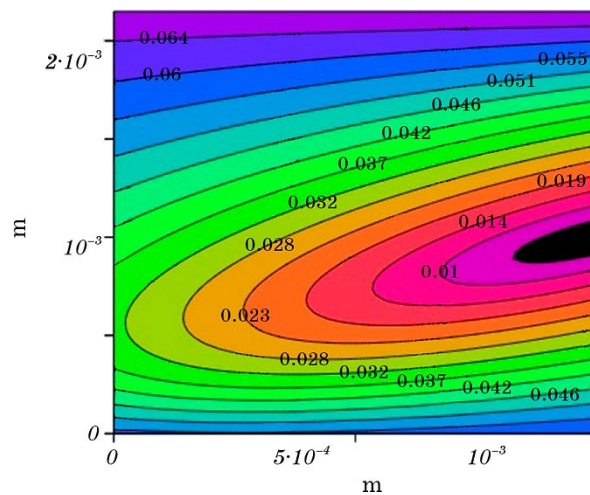


Fig. 9. Displacement velocity field around a plate (vertical component) quadrants 23.

plastic deformation and processing speed). Indeed, the value of minimum deformation intensity at plate flow in octant 33 exceeds analogous value for the wedge by a factor of 1.5, while the core of maximum deformation is located not near tool surface, but near beginning of plastic flow plane.

The deformation increase in comparison with the wedge is explained

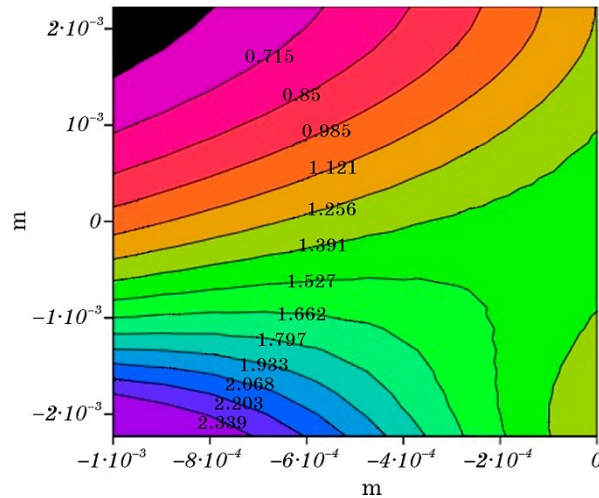
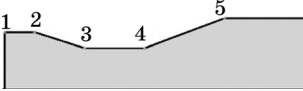


Fig. 10. Deformation intensity around a plate (vertical component) quadrants 23.

TABLE 1. Examples the displacements velocity field construction.

Machining process	Geometry of tool	Approximating line
Turning		12 hyperbola
		23 hyperbola
		12 hyperbola
		23 hyperbola
		34 hyperbola
		45 hyperbola
		12 hyperbola
		23 vortex or potential flow around cylinder
		34 hyperbola

by twofold greater angle of metal rotation of streamlines— 120° versus 60° at wedge. The deformations highest intensity near the plane of deformation beginning is apparently a consequence of the pressure exerted by deformed metal layers along entire perimeter of maximum deformation zone, which in this regard can be considered a deformation core. Distance between deformation intensities isolines decreases precisely near the core of deformations maximum, which indicates the growth of function gradient most intensively in this field region. A more detailed analysis of the deformation mechanism of nucleus formation is possible when considering separately the deformation components.

At the vertical component of velocity (octant 11) the patterns of displacement velocities fields and deformation intensities are symmetric to fields of octant 33 relative to bisector of second and fourth octant central angles (Figs. 7, 8). The strain intensity field is also characterized by presence of deformation core bounded by a closed isoline. Nature values change is like octant 33. Flowing around a plane with a vertical component (23) the deformation rate fields are like flowing around part of a wedge (Fig. 9, 10). We can conclude that all fields have one of the types geometric symmetry (axial or rotational), which confirms correctness of our physical concepts.

Summing up, we can conclude that constructed fields of changes in functional parameters are consistent with physical concepts developed by us in this work, as well as with experimental studies.

Let's consider several examples of constructing displacement velocities field depending on the processing method and geometry of the tool working part (Table 1). At the heart of any cutting tool is a cutting wedge, the geometry of which varies in a wide range depending on the method and processing conditions. As we know the kinematics of metal flow is determined by the insert geometry and the processing speed. Therefore, there is no fundamental difference in processing method choice. It is enough to consider the flow around several chipbreakers of different geometries during turning.

Flow around plates sections formed by the broken line the metal streamlines are well approximated by the branches of hyperbolas. It is equally possible to use displacement velocity fields describing flow around both the potential and vortex cylinders to describe sections of circular arcs.

Developed technique can be applied to mathematical modelling [42], to solve assessing energy-power characteristics problems [43] behaviour structures during machining [44] and contact phenomena such as adsorption and adhesion in the processing zone during cutting.

5. CONCLUSION

Based on results of macrostructure analysis metal and direction of forgings fibres after various types of metal forming operations by pressure, the hyperbola method is proposed for displacement velocity fields constructing and analysing metal deformed state in processing zone. The structure for investigation of energy-power characteristics of metals mechanical processing is presented. It is shown that key system of equations are dependencies describing velocity fields of metal particles satisfy solenoidality requirement. An approach to description metal flow is proposed with various processing methods. The method essence consists in dividing tool working surface of complex geometry into flat and cylindrical shape sections. Problems modelling metal plastic flow are considered when flowing around a wedge; plate at vertical and horizontal components of speed; vortex and potential flow around the cylinder with ductile metal. On the hyperbola method, displacement velocity fields have been developed. It describes metal plastic flow at absolutely solid tool penetration into a rigid-plastic half-space. The material deformation process modelling is carried out for all solved problems under specific processing conditions. The fields of displacement velocities and deformation intensities are constructed. The features of metal flow are noted at modelling various problems. On the choice flowing around a cylindrical surface type general recom-

mendation are given at solving technological problems. Based on the simulation results, it can be concluded that functional parameters changes are consistent with physical concepts developed by us in work and experimental research. Several examples of displacement velocities field construction are considered depending on processing method and the tool working part geometry. For each case a sequence the approximating curves is proposed of streamline.

REFERENCES

1. J. M. Allwood, S. R. Duncan, J. Cao, P. Groche, G. Hirt, B. Kinsey, T. Kuboki, M. Liewald, A. Sterzing, and A. E. Tekkaya, *CIRP Annals*, **65**: 573 (2016).
2. A. Topa and Q. H. Shah, *Int. J. Manufacturing Engineering*, **2014**: 385065 (2014).
3. E. Ghassemali, X. Song, M. Zarinejad, D. Atsushi, and M. J. Tan, *Handbook of Manufacturing Engineering and Technology* (Ed. A. Nee) (London: Springer: 2013).
4. X. Cui and J. Guo, *Int. J. Adv. Manuf. Technol.*, **96**: 4281 (2018).
5. G. M. Miquiz, V. Borja, M. López-Parra, A. C. Ramírez-Reivich, L. Ruiz-Huerta, R. C. Ambrosio Lázaro, A. S. Y. Sánchez, H. Vazquez-Leal, M.-E. Pavon-Solana, and J. Flores Méndez, *Mathematical Problems in Engineering*, **2020**: 8718597 (2020).
6. M. Sajgalik, A. Czan, M. Drbul, I. Danis, M. Miklos, O. Babik, and R. Joch, *Procedia Manufacturing*, **14**: 51 (2017).
7. S. Masoudi, M. J. Esfahani, F. Jafarian, and S. A. Mirsoleimani, *Int. J. Precis. Eng. and Manuf.-Green Tech.*, (2019).
8. Y. J. Lee and H. Wang, *Mater. Des.*, **192**: 108688 (2020).
9. B. Boswell, M. N. Islam, I. J. Davies, and A. Pramanik, *Proc. Institution Mech. Engineers, Part B: J. Engineering Manufacture*, **231**, Iss. 6: 913 (2017).
10. C. Baumgart, J. J. Radziwill, Fr. Kuster, and K. Wegener, *Procedia CIRP*, **58**: 517 (2017).
11. H. Jamshidi and E. Budak, *Procedia CIRP*, **77**: 299 (2018).
12. T. Zaborowski and R. Ochendusko, *Mechanik*, **10**: 135 (2017).
13. V. Larshin and N. Lishchenko, *Advances in Design, Simulation and Manufacturing* (Eds. V. Ivanov, Y. Rong, J. Trojanowska, J. Venus, O. Liaposhchenko, J. Zajac, I. Pavlenko, M. Edl, and D. Perakovic) (Springer: 2019), p. 79.
14. J. Badger, S. Murphy, and G. E. O'Donnell, *Int. J. Machine Tools Manufacture*, **125**: 11 (2018).
15. T. Jin, J. Yi, and P. Li, *Int. J. Adv. Manuf. Technol.*, **88**: 2609 (2017).
16. Yu. N. Alekseev, *Vvedenie v Teoriyu Obrabotki Metallov Davleniem, Prokatkoy i Rezaniiem* [Introduction to the Theory of Metal Processing via the Pressure, Rolling and Cutting] (Kharkiv: KhGU: 1969) (in Russian).
17. A. A. Kabatov, *Voprosy Proektirovaniya i Proizvodstva Konstruktsiy Letatel'nykh Apparatov*, **1**: 67 (2013) (in Russian).
18. A. A. Kabatov, *Tenologiya Almaznogo Vyglazhivaniya Detaley Aviatsionnykh Dvigatelay i Agregatov* [Technology for Diamond Smoothing of Aircraft Engine Parts and Units] (Thesis of Dissert. for PhD) (Kharkiv: National Aerospace University 'Kharkiv Aviation Institute': 2014) (in Russian).

19. J. M. Rodríguez, J. M. Carbonell, and P. Jonsén, *Arch. Computation Methods Eng.*, **27**: 387 (2020).
20. B. Li, *Int. J. Refractory Metals and Hard Materials*, **35**: 143 (2012).
21. T. Mabrouki, C. Courbon, Y. Zhang, J. Rech, D. Nélías, M. Asad, H. Hamdi, S. Belhadi, and F. Salvatore, *Comptes Rendus Mécanique*, **334**, Iss. 4–5: 335 (2016).
22. M. O. Kurin, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **42**, No. 3: 433 (2020).
23. M. O. Kurin, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **40**, No. 7: 859 (2018).
24. S. M. Nizhnik, *Tekhnologiya Shlifovaniya Detaley Aviatsionnykh Dvigatelye s Uchetom Uvelicheniya Aktivnoy Poverkhnosti Abrazivnogo Zerna* [Grinding Technology of Aviation Engine Parts, Taking into Account the Increase of the Active Surface of Abrasive Grain] (Thesis of Dissert. for PhD) (Kharkiv: National Aerospace University 'Kharkiv Aviation Institute': 2018) (in Russian).
25. B. Wang, Z. Li, M. Zheng, B. Zuo, J. Lin, and C. Zhu, *MATEC Web of Conferences*, **21**: 02005 (2015).
26. *Grain Flow in Forgings* (2021) <https://www.milwaukeeforge.com/grain-flow-in-forgings>.
27. *Cold Forging vs. Hot Forging—Considerations, Benefits and Drawbacks* (2014) <https://www.farinia.com/blog/cold-forging-vs-hot-forging-considerations-benefits-and-drawbacks>.
28. N. S. Mahesh, *Forging and Extrusion Processes* https://asremavad.com/wp-content/uploads/2019/08/Forging-and-Extrusion-Processes_www.asremavad.com_.pdf.
29. J. M. Allwood, T. H. C. Childs, A. T. Clare, A. K. M. De Silva, V. Dhokia, I. M. Hutchings, R. K. Leach, D. R. Leal-Ayala, S. Lowth, C. E. Majewski, A. Marzano, J. Mehnen, A. Nassehi, E. Ozturk, M. H. Raffles, R. Roy, I. Shyha, and S. Turner, *J. Materials Processing Technology*, **229**: 729 (2016).
30. S. Bolsunovsky, V. Vermel, and G. Gubanov, *Procedia CIRP*, **8**: 235 (2013).
31. L. B. Zuev, S. A. Barannikova, and A. G. Lunev, *Usp. Fiz. Met.*, **19**, No. 4: 379 (2018) (in Russian).
32. Yu. V. Milman, S. I. Chugunova, I. V. Goncharova, and A. A. Golubenko, *Usp. Fiz. Met.*, **19**, No. 3: 271 (2018).
33. M. O. Kurin, *Usp. Fiz. Met.*, **21**, No. 2: 249 (2020).
34. T. Sugihara, A. Udupa, and K. Viswanathan, *Mater. Trans.*, **60**, Iss. 9: 1436 (2019).
35. Okida Junya, Takuichiro Tayama, Yosuke Shimamoto, and Shinya Nakata. *SEI Technical Review*, **82**: 51 (2016).
36. V. P. Astakhov and S. Shvets, *J. Mater. Process. Technol.*, **146**: 193 (2004).
37. A. M. Korsunsky and M. Wiercigroch, *Int. J. Solids Struct.*, **47**: 1082 (2010).
38. M. Lewandowski and S. Stupkiewicz, *Int. J. Plasticity*, **109**: 54 (2018).
39. N. Ya. Fabrikant, *Aerodinamika* [Aerodynamics] (Moscow: Nauka: 1964) (in Russian).
40. L. G. Loytsyanskiy, *Mekhanika Zhidkosti i Gaza* [Mechanics of Fluid and Gas] (Moscow: Nauka: 1978) (in Russian).
41. A. I. Dolmatov, A. A. Kabatov, and M. A. Kurin, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **35**, No. 10: 1407 (2013) (in Russian).
42. M. Dumas, D. Fabre, F. Valiorgue, G. Kermouche, A. Van Robaeys, M. Girinon, A. Brosse, H. Karaoui, and J. Rech, *J. Materials Processing Technology*, **229**: 729 (2021).

43. V. Kombarov, V. Sorokin, Y. Tsegelnyk, S. Plankovskyy, Y. Aksonov, and O. Fojtů, *Int. J. Mechatronics Applied Mechanics*, **9**: 1 (2021).
44. S. Plankovskyy, V. Myntiuk, Y. Tsegelnyk, S. Zadorozhnyi, V. Kombarov, *Mathematical Modeling and Simulation of Systems (MODS'2020)* (Eds. S. Shkarlet, A. Morozov, and A. Palagin,) (Springer: 2021), vol. **1265**, p. 82.

PACS numbers: 62.20.fk, 62.20.fq, 62.20.mj, 62.20.mm, 62.20.mt, 81.40.Nr

Вплив пластичності на конструкційну надійність металевих стопів

Ю. Я. Мешков, Г. П. Зіміна

*Інститут металофізики ім. Г. В. Курдюмова НАН України,
бульв. Академіка Вернадського, 36,
03142 Київ, Україна*

В статті на основі даних температурних залежностей механічних характеристик криць на стандартних зразках і зразках з нанесеними концентраторами напружень (КН) різного ступеню гостроти проаналізовано вплив властивості пластичності ψ_K (відносне звуження) на критичну температуру крихкості при різних умовах напружено-деформованого стану (НДС) — на тонких пластинах (ПНС), на зразках з кільцевим надрізом (СНС) при розтягуванні і на призматичних зразках з нанесеною тріщиною при трьохточковому вигині. Виявлено, що окрихчення криці під дією КН спричиняє саме локальна пластичність в зоні КН через ефект деформаційного зміцнення металу, що вимірюється параметром зламостійкості криці B_r . Критична величина зламостійкості B_{rc} при температурі T_c залежить від гостроти КН, виду НДС, а головне, від пластичності криці у вимірі показника зламостійкості, тобто з урахуванням впливу фактору деформаційного зміцнення. Найбільше роль пластичності металу проявляється в простих видах напруженого стану (ПНС), де немає великої жорсткості НДС, як в умовах СНС, тому екстремально гострі КН (тріщини) найбільше окрихчують метал саме в тонких пластинах, а не в пластинах (балках) помірної товщини. Показано, що конструкційна надійність виробів з криці з КН (k_s) по різному регулюється фактором пластичності (через B_r) в умовах різних видів НДС.

Ключові слова: міцність, пластичність, зламостійкість, крихкість, стабі-

Corresponding author: Galyna Petrivna Zimina
E-mail: zimingal28@gmail.com

*G. V. Kurdyumov Institute for Metal Physics, N.A.S. of Ukraine,
36 Academician Vernadsky Blvd., UA-03142 Kyiv, Ukraine*

Citation: Yu. Ya. Meshkov and G. P. Zimina, Influence of Ductility on Structural Reliability of Metal Alloys, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **44**, No. 6: 807–821 (2022) (in Ukrainian). DOI: [10.15407/mfint.44.06.0807](https://doi.org/10.15407/mfint.44.06.0807)

льність міцності криці, конструкційна надійність, концентратор напружень, тріщина.

Based on the temperature dependences of mechanical properties of steels for standard specimens and specimens with stress raisers (SR) of different sharpness the effect of ductility ψ_K (reduction in area) on the critical temperature of brittleness is analysed under the various stress-strain state (SSS)—for thin plates (biaxial stress state—BSS), for specimens with circular notches (triaxial stress state—TSS) at tension and for prismatic pre-cracked specimens at three-point bending. As ascertained, embrittlement of steel due to SR is caused by the local ductility near SR via the strain hardening of metal, which is characterized by the parameter of break resistance B_r . Critical value of break resistance B_{rc} at temperature T_c depends on SR sharpness, SSS mode, and on ductility characterizing by the coefficient of break resistance, *i.e.*, accounting for the influence of strain hardening. The effect of ductility is most vividly manifests itself for BSS, so, the sharpest SR (cracks) embrittle metal to maximum extent in thin plates, not in bars (plates of moderate thickness). As shown, structural reliability of steel products with SR (k_s) is governed by ductility (*via* B_r) by a different way for various SSS.

Key words: strength, ductility, break resistance, brittleness, strength stability of steels, structural reliability, stress raiser, crack.

(Отримано 12 квітня 2022 р.; остаточн. варіант — 2 червня 2022 р.)

1. ВСТУП. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧІ

Пластичність конструкційних металевих стопів має призначення забезпечувати виробам і навантаженим елементам конструкцій (ЕК) гарантовану надійність стопу в умовах присутності в них регулярних концентраторів напружень (КН) або випадкових дефектів, наприклад, тріщин. Гарантована силова надійність виробу означає, що міцність виробу (σ_{NF}) не може бути нижчою, ніж міцність самого металу ($\sigma_{0,2}$): $\sigma_{NF} \geq \sigma_{0,2}$ (σ_{NF} — середнє номінальне напруження руйнування ЕК, $\sigma_{0,2}$ — умовна межа плинності металу), але це можливо лише за наявності в металі достатньої пластичності. Чутливість металевих стопів до дії КН регулюється властивістю пластичності (ψ_K — відносне звуження при розриві зразка) і залежить від міцності стопу $\sigma_{0,2}$ і температури T [1], але особливо сильно від параметрів напружено-деформованого стану (НДС) виробу — виду НДС (лінійний чи об'ємний розтяг) [2], сили КН (α_σ — коефіцієнт концентрації напружень [3, 4]) та ін.

Оскільки в реальних виробках присутні всі фактори разом, то практикою вироблено усталені нормативи для характеристик пластичності ψ_K в залежності від міцності криці і відповідно до сфери застосування — будівництво, машинобудування, тощо [5]. Особливості впливу вказаних факторів на міцність виробів чи зразків з КН

(σ_{NF}) ретельно розглянуті в фундаментальних роботах класиків минулого [2, 4, 6], але окремо питання про вплив властивості пластичності на ступінь окрихчення криць під дією концентраторів напружень у кількісному вимірі було лише частково окреслено впродовж кількох останніх років в роботах авторів [7, 8]. В цих роботах автори показали, що сама по собі характеристика пластичності криці ψ_K , звісно, відіграє позитивну роль у зменшенні чутливості криці до її окрихчення під дією КН, але однозначної кореляції між показниками ψ_K і схильністю до крихкості, наприклад, у вигляді критичної температури крихкості T_C для певного КН встановити неможливо, оскільки на цю залежність певним чином впливає весь комплекс механічних властивостей стопу.

Було виявлено [7], що більш виразною в цьому відношенні може бути інша, спеціальна комплексна характеристика B_r , названа авторами [7, 8] зламостійкістю, яка поєднує в собі дві найважливіші властивості металу — міцність і пластичність. Зламостійкість B_r — це не сама міцність, а той резерв міцності, який починається у металі при навантаженні зразка вище межі плинності $\sigma_{0,2}$ до самого розриву в «шийці» S_K :

$$B_r = S_K / \sigma_{0,2}. \quad (1)$$

Отже, в деформаційному резерві міцності B_r властивість міцності металу реалізується у формі деформаційного зміцнення в ході пластичної деформації, тому величина B_r залежить від комплексу властивостей — ψ_K та n , де n — показник деформаційного зміцнення металу за Холомоном [9]. Тим самим використання комплексного показника B_r замість лише пластичності ψ_K розширює можливості аналізу питання про вплив пластичності на окрихчення криці під дією концентраторів напружень.

Тому в даній роботі було поставлено завдання з'ясувати, яким чином властивість пластичності металу через показник зламостійкості B_r впливає на захист його від окрихчення в умовах дії КН різної сили та при різних видах НДС — пласкому напруженому стані (ПНС) і складному (тривісний розтяг) напруженому стані (СНС), спричиненому дією КН.

2. МАТЕРІАЛИ І МЕТОДИКА РОБОТИ

Для виконання поставлених задач не було необхідності здійснювати спеціальні експерименти, оскільки потрібний для аналізу набір експериментальних даних був доступний за результатами робіт інших авторів, опублікованих в науковій літературі та інших джерелах [1, 10–12], з яких можна було здійснити розрахункове визна-

чення параметрів B_r , B_{rc} (критичне значення зламостійкості за температури крихкості T_c зразка з певним КН).

Найбільш важливі для поставленої задачі експериментальні результати були одержані в дисертаційній роботі А. В. Шияна [10], де досліджувалась фізична природа крихкості металів на зразках з КН різної сили, в тому числі з тріщинами в умовах ПНС і СНС (рис. 1). Досліджувались два модельних стопи — м'яке армо-залізо (α -Fe) з $\sigma_{0,2} = 140$ МПа, $\psi_K = 83\%$ та низькопластична евтектоїдна криця У8 у відпаленому стані з $\sigma_{0,2} = 350$ МПа, $\psi_K = 13\%$ (табл. 1), а також типові конструкційні криці ст.3сп, 10ХСНД та АК35 і декілька варіантів зварних швів криці 12ХН2МДФЗ.

В роботі [10] представлені певні температурні залежності базових механічних властивостей ($\sigma_{0,2}$, ψ_K , S_K) і середня номінальна напруга руйнування зразків з КН — σ_{NF} (на розтяг) і σ_{CO} (на трьохточковий

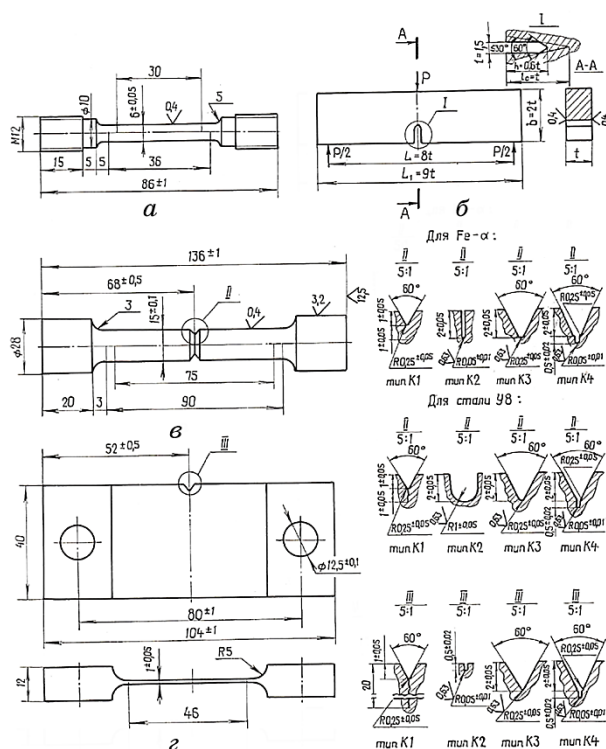


Рис. 1. Зразки, які використовуються при проведенні механічних випробувань: на одновісний розтяг (а), на статичний вигин (б), на розтяг в умовах СНС (в), на розтяг в умовах ПНС [10] (г).

Fig. 1. Specimens for mechanical tests: uniaxial tensile test (a), static bending test (b), biaxial tensile test (c), triaxial tensile test (d).

ТАБЛИЦЯ 1. Критичні параметри крихкого стану криць в полі різних ПНС і КН (за даними [10]).**TABLE 1.** Critical parameters of brittle state of steels at various biaxial stress states and stress raisers (according to [10]).

№	Криця	НДС (r , мм)	$\sigma_{0,2}$, МПа	ψ_K , %	B_r	$\sigma_{0,2c}$, МПа	S_{Kc} , МПа	ψ_c , %	B_{rc} (α_{ef})	B_r/B_{rc} (k_s)	D_r (k_s^{-1})	T_C , К
1	α -Fe	ПНС, КЗ (0,25)	140	83	5,0	500	950	58	1,9	2,6	0,38	100
2	У8	(0,25)	350	13	2,7	500	975	10	1,95	1,38	0,72	200
3	α -Fe	ПНС, К2 (0,05)	140	83	5,0	490	970	60	2,0	2,5	0,40	70
4	У8	(0,05)	350	13	2,7	540	1010	8	1,84	1,47	0,68	200
5	α -Fe	ПНС, К4 (0,05)	140	83	5,0	445	920	65	2,2	2,27	0,44	100
6	У8	(0,05)	350	13	2,7	440	970	12	2,2	1,23	0,81	240
7	α -Fe	ПНС, К ₁	140	83	5,0	350	950	70	2,7	1,85	0,54	130
8	У8	(тріщина)	350	13	2,7	340	920	13	2,7	1,0	1,0	300
9	α -Fe	СНС, КЗ (0,25)	140	83	5,0	470	960	60	2,0	2,5	0,40	110
10	У8	(0,25)	350	13	2,7	825	940	2	1,14	2,4	0,42	125
11	α -Fe	СНС, К2 (0,25)	140	83	5,0	420	970	70	2,3	2,17	0,46	110
12	У8	(1,0)	350	13	2,7	770	950	2	1,23	2,20	0,45	125
13	α -Fe	СНС, К4 (0,05)	140	83	5,0	420	980	65	2,3	2,17	0,46	120
14	У8	(0,05)	350	13	2,7	650	960	3	1,5	1,80	0,54	150
СНС, $t = 9$ мм												
15а	α -Fe	вигин,	140	83	5,0	420	980	65	2,3	2,17	0,46	115
15б		$t = 18$ мм (тріщина)				370	975	70	2,7	1,85	0,54	140
СНС, $t = 9$ мм												
16а	У8	вигин,	350	13	2,7	550	1020	7	1,85	1,46	0,68	180
16б		$t = 18$ мм (тріщина)				460	970	12	2,1	1,30	0,77	220

вигин) (рис. 2) для всіх досліджених стопів.

За критичну температуру крихкості T_c зразка з КН приймалась температура, при якій номінальне напруження руйнування σ_{NF} або σ_{CO} співпадало з базовою міцністю металу $\sigma_{0,2c}$:

$$\sigma_{NF}(\sigma_{CO}) = \sigma_{0,2c}. \quad (2)$$

Відповідно, критичне значення зламостійкості B_{rc} при $T = T_c$:

$$B_{rc} = S_{Kc}/\sigma_{0,2c}. \quad (3)$$

Критичній величині зламостійкості стопу в момент крихкості для зразка з концентратором напружень B_{rc} відповідає критична

характеристика пластичності ψ_c . Ефект окрихчення стопу відображається на зміні величин трьох показників — пластичності в межах $\psi_K - \psi_c$, зламостійкості $B_r - B_{rc}$ і температури крихкості T_c . Але кількісні закономірності можна прослідкувати лише на показнику зламостійкості B_{rc} (табл. 1).

Поряд з цим в даній роботі аналізувались результати подібних експериментів інших авторів [1, 11], де були наведені певні температурні залежності відповідних механічних властивостей.

В роботі [10] випробування проводились на зразках з концентратором різного типу ($K_1 - K_4$) (рис. 1), де K_4 — з наведеною тріщиною втоми; у трьох видах НДС — на тонких ($t = 1$ мм) пластинах (ПНС, п.п. 1–8 табл. 1); на зразках з кільцевим надрізом з великою жорсткістю напруженого стану (СНС, п.п. 9–14); призматичних зразках різної товщини $t = 9$ мм і $t = 18$ мм на трьохточковий вигин з КН у вигляді тріщини втоми (п.п. 15, 16) (зразки для визначення в'язкості руйнування стопів K_{lc} [12]).

У роботі [1] наведено дані лише для зразків з кільцевими надрізами (СНС).

3. АНАЛІЗА ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНИХ ДАНИХ

При розгляді проблеми окрихчення металевих стопів від дії КН можливі два суттєво різних методологічних підходи. Традиційно для цього розглядають безпосередньо показники механічних властивостей при руйнуванні зразків з нанесеним концентратором, наприклад, роботу руйнування (ударну в'язкість, KCV або KCU), в'язкість руйнування K_{lc} , критичну температуру крихкості T_c , тощо. Цей підхід здавна практикується в матеріалознавстві і відображений у відповідних нормативних документах і стандартах [12, 13]. Але з таких експериментальних даних важко відтворити загальну картину фізичної природи впливу механічних властивостей самого металу на одержаний результат експерименту, оскільки кожний стоп для кожного виду КН дає свій власний критичний показник відповідної властивості.

В даній роботі здійснено інший підхід. На зразках з КН фіксується лише момент самої критичної ситуації в процесі руйнування, наприклад, критична втрата міцності зразка з КН σ_{NF} (σ_{co}) нижче рівня міцності самого металу $\sigma_{0,2}$, тобто критерій критичного стану:

$$\sigma_{NF}(\sigma_{co}) \leq \sigma_{0,2c}. \quad (4)$$

Такий стан в даному випадку умовно приймається як перехід до крихкості зразка з КН, а температура T_c вважається температурою крихкості (рис. 2). Але головна суть даного підходу до проблеми полягає у тому, щоб визначити, який відгук викликає критична си-

туація у системі властивостей самого металу, що чітко фіксується на фоні наявних температурних залежностей $\sigma_{0,2}$, S_K , ψ_K (рис. 2). Подальшій аналізі підлягає саме система впливу вихідних властивостей металу при $T_K = 300$ К на критичні показники при T_C — $\sigma_{0,2c}$, S_{Kc} , ψ_c , B_{Kc} та ін. для кожного сталого виду КН чи НДС. В такому підході чітко видно конкретну роль кожного фактору, окремо чи у взаємодії з іншими, у відтворенні критичного стану за критерієм (4), який є станом лише умовної крихкості даної системи «зразок + КН».

Проте, слід відзначити, що для металевих стопів за будь-яким критерієм крихкості завжди є поняттям суто умовним, тому в фізичному матеріалознавстві нерідко вживається більш доречний термін «квазикрихкість» [14]. Але стосовно критерія за умовою (4) падіння міцності зразка σ_{NF} чи σ_{CO} нижче рівня $\sigma_{0,2c}$ при T_C з суто технічного боку означає не що інше, як втрату стабільності міцності стопу під дією КН, що проявляється у надмірній чутливості σ_{NF} (σ_{CO}) до розкиду міцності стопу $\sigma_{0,2}$, до перекосу зразка з КН або інших дрібних порушень умов експерименту. Тому автори вважають більш доречним стан умовної крихкості назвати станом нестабільності міцності стопу $\sigma_{0,2}$ в умовах дії КН [15, 16] при температурі T_C . На відміну від цього при більш високих температурах $T > T_C$ аж до кімнатних $T_C \approx 300$ К, де міцність зразка з КН σ_{NF} (σ_{CO}) стійко тримається вище відповідного рівня $\sigma_{0,2}$ (рис. 2), такої нестабільно-

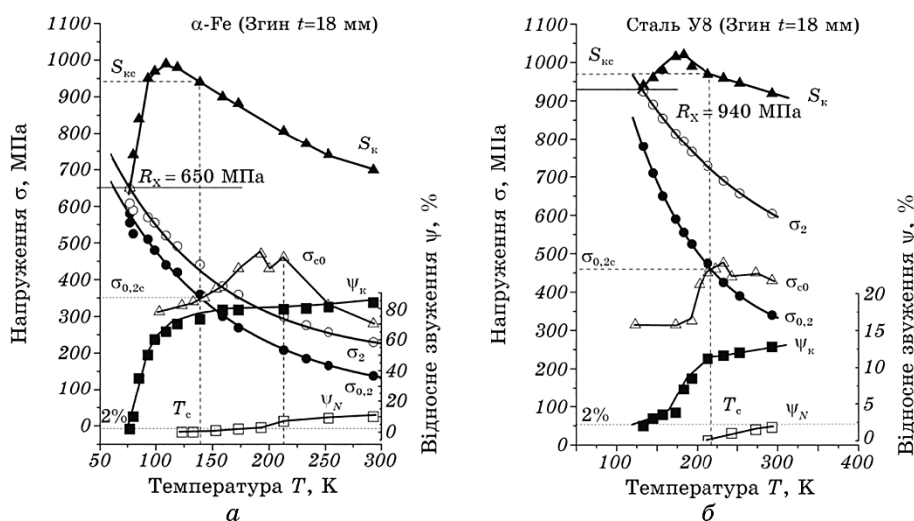


Рис. 2. Температурні залежності механічних властивостей α -Fe (а) і криці У8 (б) в умовах трьохточкового вигину зразка з тріщиною втоми.

Fig. 2. Temperature dependences of mechanical properties of α -Fe (a) and steel U8 (b) at three-point bending of specimen with fatigue crack.

сти міцності стопу в умовах дії КН немає, це стан стабільності міцності, що може бути певною ознакою конструкційної надійності даного стопу стосовно зразків з даним видом КН.

З таблиці 1 видно, що всюди, де $T_c < T_k$, або де стабільність міцності порушується лише при низьких температурах, наявна пластичність стопу перевищує критичну $\psi_k > \psi_c$, що свідчить про конструкційну надійність при даному виді випробування металу.

Для кожного концентратора напружень незалежно від виду НДС (ПНС, СНС чи проміжного виду при вигині) відмічається індивідуальне значення пластичності ψ_c без видимої закономірності. Отже, у критичній ситуації при $T = T_c$ кожен концентратор потребує свій конкретний рівень пластичності ψ_c для того, щоб здійснити свою окрихчувальну функцію у відповідних умовах НДС згідно з силою цього концентратора, як закладена у величині теоретичного коефіцієнта концентрації напружень α_σ [3, 4]:

$$\alpha_\sigma = \sigma_{1\max} / \sigma_N. \quad (5)$$

Для пружно-пластичних металів коефіцієнт α_σ непридатний, але певним чином все ж таки впливає на ефективність окрихчувальної сили КН [4], для визначення якої потрібно знайти інший показник — α_{ef} .

4. ОБГОВОРЕННЯ РЕЗУЛЬТАТІВ

З п.п. 1–8 таблиці 1, де представлені дані для чотирьох видів КН (K_1 – K_4) попарно для двох стопів з різним рівнем пластичності ($\psi_k = 83\%$ і $\psi_k = 13\%$) впливає, що для кожного типу КН зі своїм рівнем α_σ критичний показник ψ_c різний для різних стопів, а критичний рівень зламостійкості B_{rc} практично однаковий (див. п.п. 1–8).

Це можна розуміти так, що кожен КН згідно зі своїм рівнем α_σ , або точніше α_{ef} , для реалізації своєї окрихчувальної функції для різних металів потребує різної дози пластичності ψ_c , але однакову кількість зламостійкості B_{rc} . Це означає, що оскільки в величині B_r поєднується дія двох чинників — пластичної деформації і деформаційного зміцнення в локальній зоні КН, то однаковість величин B_{rc} для матеріалів з різними показниками міцності і пластичності зумовлена тим, що пік напружень в зоні КН в межах від $\sigma_{0,2c}$ до S_{Kc} відповідає однаковій ефективній силі КН, або ефективності концентратора даного типу α_{ef} . Тобто це має означати, що B_{rc} по (3) можна розглядати, як певну міру ефективної концентрації напружень α_{ef} для даного стопу:

$$B_{rc} = \alpha_{ef}. \quad (6)$$

ТАБЛИЦЯ 2. Критичні показники крихкого стану криць при випробуваннях на холодостійкість (п.п. 1–7 по даним [1], п.п. 8–16 по [10]).**TABLE 2.** Critical parameters of brittle state of steels during cold resistance tests (rows 1–7—according to [1], rows 8–16—according to [10]).

№	Криця, оброблення	Тип КН	$\sigma_{0,2}$, МПа	$\sigma_{0,2e}$, МПа	B_r	B_{rc}	k_s	B_{rc}/B_r	T_c , К
1	ст.30	Кільцевий надріз, розтяг	350	800	2,97	1,31	2,28	0,44	77
2	30ХГСА (г.в. 200°C)		1400	1600	1,58	1,50	1,05	0,95	150
3	30ХГСА (ізот. г. 300°C)		1500	1600	1,80	1,45	1,21	0,81	130
4	30ХГСНА (ізот. г. 200°C)		1450	1700	1,77	1,57	1,13	0,89	83
5	30ХГСНА (ізот. г. 300°C)		1170	1400	2,10	1,36	1,54	0,66	77
6	10Х2СВА		1600	1700	1,83	1,59	1,15	0,87	160
7	У8 (г.в. 400°C)		1180	1300	1,58	1,54	1,03	0,97	200
8	α -Fe	Вигин балки з тріщиною	140	350	5,0	2,77	1,9	0,55	140
9	У8 (відп.)		340	450	2,8	2,15	1,3	0,77	220
10	ст.3сп		160	400	3,1	2,10	1,51	0,64	147
11	10ХСНД		310	420	2,9	2,5	1,2	0,86	180
12	АК35		1027	1100	2,3	2,0	1,2	0,87	180
13	12ХН2МДФ 3Ш (лег. бором В = 0,0)		640	700	1,97	1,81	1,09	0,92	173
14	12ХН2МДФ 3Ш (лег. бором В = 0,001)		640	820	1,80	1,46	1,23	0,81	175
15	12ХН2МДФ 3Ш (лег. бором В = 0,0022)		640	977	2,00	1,50	1,33	0,75	65
16	12ХН2МДФ 3Ш (лег. бором В = 0,004)		650	968	2,17	1,67	1,3	0,77	81

Отже, пік КН наповнюється пружністю в тій мірі, в якій реалізована в ньому доза пластичності ψ_c може здійснити функцію зміцнення металу (в локальній зоні КН) в повній мірі у відповідності до величини α_{ef} , тобто B_{rc} .

Такий принцип формування величини B_{rc} виконується при будь-якому виді НДС. Але на відміну від ПНС (п.п. 1–8 табл.1), де критична доза пластичності ψ_c реалізується в повній мірі згідно з величиною α_{ef} , для КН з кільцевим надрізом (СНС) з великою жорсткістю НДС (п.п. 9–14) через стиснення пластичності дозволена доза ψ_c

різко зменшується (пари п.п. 2 і 10, а також п.п. 6 і 14 для криці У8), то відповідно зменшується і фактор $\alpha_{ef}(B_{rc})$.

Тобто, в СНС на кільцевих надрізах через жорсткість НДС різну для різних криць принцип рівності α_{ef} для різних криць (при однаковому КН) не виповнюється, на відміну від зразків у вигляді тонких пластин (ПНС).

Цікаво відзначити, що для третьої групи криць, на зразках у вигляді тонких ($t = 9$ мм) і товстих ($t = 18$ мм) балок з КН у вигляді тріщин з навантаженням на трьохточковий вигин (рис. 1, б), ми маємо проміжну картину формування критичної величини B_{rc} тих же криць (п.п. 15, 16 в табл. 1).

Під час вигину балки з тріщиною найбільша жорсткість НДС створюється у центральному перерізі зразка і ця жорсткість збільшується з ростом товщини t зразка. Але на бокових гранях зразка умови деформації вільні від жорсткості, отже там НДС наближена до умов ПНС. Тому на прикладі високопластичного стопу α -Fe видно, що при $t = 18$ мм пластичність в центральному перерізі зразка настільки стиснена, що її пік напруження неспроможний відтворити критичне напруження S_{kc} і тому це реалізує нестиснений на бокових гранях пік пластичності, який подібний до умов ПНС (п. 7 — $B_{rc} = 2,7$) і реалізує руйнування балки з тріщиною при такому ж $B_{rc} = 2,7$ (п. 15б в табл. 1). На низькопластичній криці У8 цей ефект менш виразний, але теж помітний (п.п. 16а, 16б в табл. 1).

Таким чином, при вигині балки НДС під дією КН проявляє себе відразу у двох протилежних видах — у центрі як трьохвісний розтяг (СНС), а назовні як лінійний розтяг (ПНС). Це треба враховувати при розгляді критичних параметрів при окрихченні криць з концентраторами напружень в таких зразках. З таблиці 2 видно, як при вигині і при розтягу в СНС механічні властивості ($\sigma_{0,2}$, ψ_K , B_r) криць і зварних швів впливають на критичні показники $\sigma_{0,2c}$, ψ_c , і B_{rc} за даними експериментів [10].

З наведених даних видно, що критичний показник зламостійкості B_{rc} при T_c однозначно характеризує окрихчувальну силу КН, яку можна прийняти як ефективний концентратор напружень α_{ef} у пластичному металі і він, безперечно, впливає на показник T_c , але більш чітко це можна побачити не в абсолютній величині B_{rc} , а у його співвідношенні з базовою величиною B_r :

$$k_s = B_r/B_{rc}, \quad (7)$$

де k_s представляє надлишкову величину пластичних властивостей металу, які уможливають йому відвести критичну ситуацію окрихчення від кімнатних до більш низьких температур $T_c < T_K$, тобто гарантують зразку з КН певний ресурс холодостійкості [16], або іншими словами, за температури T_K величина k_s представляє

запас резерву міцності, який означає певну міру ступеню захисту металу від окрихчення його даним видом КН. Можна вважати, що величина k_s відображає собою міру конструкційної надійності металу у даному виді механічних випробувань, тому є можливість запровадити систему оцінки показника k_s , наприклад, при сертифікації конструкційних стопів на відповідність певному класу їх конструкційної надійності згідно з їх спротивом окрихченню при випробуваннях на зразках з КН різної сили.

На рисунку 3 показано, як зміна виду НДС (ПНС $\rightarrow$ СНС $\rightarrow$ СНС + ПНС, вигин балки) впливає на роль пластичних властивостей (через показник B_r) у зберіганні конструкційної придатності криць з табл. 1.

Видно, що чутливість показника k_s до пониження B_r від 5 до 2,7 (або ψ_K від 83% до 13%) найбільш виразна у групі різних КН при ПНС саме на зразках у вигляді тонких пластин (рис. 1, з), причому найбільше надійність міцності страждає на тонких пластинах з тріщинами, де величина α_{ef} найбільш висока (лінія 7–8). Але на зразках з кільцевими надрізами (СНС) нахил ліній майже зник, і для низькопластичної криці У8 ($B_r = 2,7$) виявилось, що надійність міцності k_s навіть зросла в порівнянні з умовами ПНС, хоча для більш пластичного металу $\alpha\text{-Fe}$ ($B_r = 5$) це вже не так.

Для зразків зі змішаною НДС (балка з тріщиною на вигин) надій-

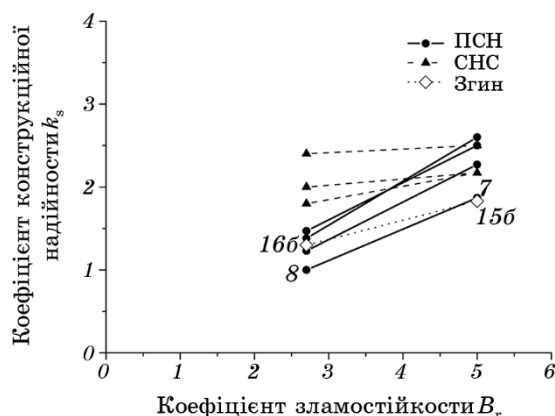


Рис. 3. Вплив показника зламостійкості B_r на коефіцієнт конструкційної надійності k_s при руйнуванні зразків з КН в різних умовах НДС за даними табл. 1 (п.п. 7, 8 — тонкі пластини, ПНС, тріщина; п.п. 15б–16б — вигин балки, тріщина).

Fig. 3. Influence of the break resistance index B_r on the coefficient of structural reliability k_s at fracture of specimens with stress raiser under the various stress-strain state (SSS) according to Table 1 (rows 7, 8—thin plates, biaxial stress state, crack; rows 15b–16b— beam bending, crack).

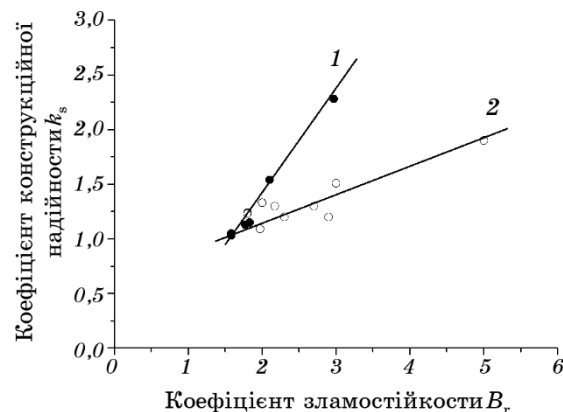


Рис. 4. Порівняння впливу пластичності (через показник B_r) на конструкційну надійність криць k_s за даними з табл. 2: 1 — розтяг зразка з кільцевим надрізом (п.п. 1–7 табл. 2 [1]), 2 — вигин балки з тріщиною (п.п. 8–16 [10]).

Fig. 4. Comparison of the ductility effect (via the coefficient B_r) on structural reliability of steels, k_s , according to the data of Table 2: 1—tension of specimen with circular notch (rows 1–7 Table 2 [1]), 2—bending of bar with crack (rows 8–16 [10]).

ність міцності k_s наближена до стану ПНС з тріщиною, але все ж таки помітно вища для всіх криць з табл. 2. Це означає, що випробування призматичних зразків з тріщиною на трьохточковий вигин є досить простою і достатньо чутливою методою визначення схильності криць до окрихчення під дією КН, тим більше, що ця метода широко застосовується на практиці, тому що є однією із стандартів для визначення показників тріщиностійкості K_{Ic} (рис. 4) [12]. Щодо такого показника окрихчуваності металу, як критична температура T_c , то з табл. 1 і 2 можна бачити деяку кореляцію між коефіцієнтом надійності міцності k_s і T_c , але на цей зв'язок сильно впливає фактор температурної залежності міцності криці $\beta = \partial \sigma_{0,2} / \partial T$, який в свою чергу залежить від класу міцності криці і інших чинників, тому ця задача потребує окремого розгляду.

На даному етапі досліджень показник надійності міцності криць k_s на зразках з КН може слугувати досить інформативним доповненням до таких традиційних показників, як ударна в'язкість KCV , KCU , тріщиностійкість K_{Ic} , температура T_c . Суттєво важливою перевагою коефіцієнта k_s перед іншими є те, що величина k_s є кількісною мірою запасу внутрішньої спроможності металу чинити опір окрихчувальній дії будь-якого концентратора напружень незалежно від виду НДС, включаючи тонколистові вироби, для яких визначення тріщиностійкості K_{Ic} є складною методологі-

чною проблемою, як і для інших виробів із стопів з високим рівнем пластичності.

5. ВИСНОВКИ

1. Властивість пластичності конструкційних стопів, з одного боку, зменшує окрихчувальну дію концентраторів напружень, але з іншого, внаслідок деформаційного зміцнення в зоні пластичності КН підсилює загрозу крихкості виробу. Тому ефективним регулятором впливу пластичності на окрихчення металу виступає спеціальний комплексний показник зламостійкості B_r , що поєднує в собі фактори пластичності і деформаційного зміцнення.

2. Для кожного стопу з його характеристикою B_r існує критичний показник B_{rc} , що фіксує момент втрати стабільності міцності зразка з даним КН при $T = T_c$. Величина B_{rc} є показником, що відповідає ефективному коефіцієнту концентрації напружень α_{ef} для КН у пластичному металі, має свій зв'язок з видом НДС, міцністю і пластичністю стопу і кількісно характеризує окрихчувальну дію концентратора на даний метал.

3. Крихкість (або нестабільність базової міцності $\sigma_{0,2}$) при кімнатних ($T_K \approx 300$ К) температурах виникає тоді, коли сила окрихчувальної дії фактора КН (α_{ef}) разом з базовою міцністю $\sigma_{0,2}$ реалізують локальний пік напружень в зоні пластичності КН, відображений граничною міцністю металу S_K (тобто $\sigma_{0,2} + \sigma_{0,2}\alpha_{ef} \approx S_K$) або, що те саме, коли величина α_{ef} цілком покриває наявний резерв міцності B_r , що стає критичним B_{rc} для даного КН — $\alpha_{ef} = B_{rc}$. Зауважимо, що така критична ситуація можлива при різних рівнях номінального навантаження σ_N , в залежності від рівня базової міцності $\sigma_{0,2}$ металу, але завжди за умови виконання однакового критерія $\alpha_{ef} = B_{rc}$ для будь-якого металу при даному КН.

4. Якщо при T_K вищевказаний критерій не досягається $\alpha_{ef} < B_r$, отже має місце надлишок резерву міцності — B_r ($\alpha_{ef}/B_r > 1$) у вигляді запасу резерву міцності $k_s = B_r/B_{rc} > 1$, то цей показник k_s в якості коефіцієнту надійності міцності $B_r/B_{rc} > 1$ забезпечує той надлишок резерву міцності $\sigma_{0,2}$ при $T_K \approx 300$ К, який може бути використаним при більш низьких температурах $T_c < T_K$. Отже параметр k_s забезпечує певну холодостійкість металу при даному виді КН.

5. Конструкційна надійність міцності k_s регулюється не базовою міцністю металу $\sigma_{0,2}$, а резервом базової міцності B_r разом з показником жорсткості НДС в зоні дії КН. Збільшення жорсткості в СНС внаслідок стиснення пластичності в зоні КН зменшує пік КН (α_{ef}), а отже і B_{rc} і тому k_s в СНС більше, ніж в зразках з ПНС при однакового КН, а звідси випливає збільшення надійності міцності, що виражається в пониженні T_c зразків з кільцевими надрізами в порівнянні з плоскими зразками (ПНС). Тобто в тонких пластинах плас-

тичного металу тріщина більш небезпечна, ніж у стрижнях чи балках саме за рахунок великого деформаційного зміцнення в зоні КН.

6. Найбільш чутливі до окрихчення при пониженні резерву міцності B_T в умовах дії КН саме тонкостінні елементи конструкції, на яких визначення параметру в'язкості руйнування K_{Ic} найбільш проблематичне, тому застосування розглянутої вище методології загальної дефектостійкості металів на основі показників B_T , B_{Tc} і k_s в таких виробках техніки може виявитись дійсно ефективним і корисним.

ЦИТОВАНА ЛІТЕРАТУРА

1. П. Ф. Кошелев, С. Е. Беляев, *Прочность и пластичность конструкционных материалов при низких температурах* (Москва: Машиностроение: 1967).
2. Г. С. Писаренко, А. А. Лебедев, *Деформирование и прочность материалов при сложном напряженном состоянии* (Киев: Наукова думка: 1976).
3. Р. Петерсон, *Коэффициенты концентрации напряжений* (Москва: Мир: 1977).
4. В. П. Когаев, Н. А. Махутов, А. П. Гусенков, *Расчеты деталей машин и конструкций на прочность и долговечность* (Москва: Машиностроение: 1985).
5. А. А. Шмыков, *Справочник термиста* (Москва: Машгиз: 1961).
6. Г. В. Ужик, *Сопротивлению отрыву и прочность материалов* (Москва: Издательство Академии наук СССР: 1950).
7. В. Н. Грищенко, Ю. Я. Мешков, Ю. А. Полушкин, А. В. Шиян, *Металлофиз. новейшие технол.*, **37**, № 7: 961 (2015).
8. Ю. Я. Мешков, А. В. Шиян, В. Н. Грищенко, *Строительство, материаловедение, машиностроение*, **89**: 112 (2016).
9. J. N. Hollomon, *Trans. AIME Iron Steel Div.*, **162**: 268 (1945).
10. А. В. Шиян, *Физическая природа локального напряжения хрупкого разрушения сталей и сварных швов* (Автореф. дисс. ... канд. физ.-мат. наук) (Киев: Институт металлофизики АН УССР: 1990).
11. *ГОСТ 25.506-85 Расчеты и испытания на прочность. Методы механических испытаний металлов. Определение характеристик трещиностойкости (вязкости разрушения) при статическом нагружении* (Москва: Издательство стандартов: 1985).
12. *ГОСТ 9454-78 Металлы. Метод испытания на ударный изгиб при пониженных комнатной и повышенных температурах* (Москва: Издательство стандартов: 1978).
13. *ASTM E1921. Standard Test Method for Determination of Reference Temperature, T_0 , for Ferritic Steels in the Transition Range.*
14. Г. Г. Курдюмова, Ю. В. Мильман, В. Н. Трефилов, *Металлофизика*, **1**, № 2: 55 (1979).
15. Ю. Я. Мешков, Г. П. Зіміна, *Металлофиз. новітні технол.*, **44**, № 2: 273 (2022).
16. Ю. Я. Мешков, К. Ф. Сорока, *Металлофиз. новейшие технол.*, **43**, № 6: 781 (2021).

REFERENCES

1. P. F. Koshelev and S. E. Belyaev, *Prochnost' i Plastichnost' Konstruktsionnykh Materialov pri Nizkikh Temperaturakh* [Strength and Plasticity of Structural Materials at Low Temperatures] (Moscow: Mashinostroenie: 1967) (in Russian).
2. G. S. Pisarenko and A. A. Lebedev, *Deformirovaniye i Prochnost' Materialov pri Slozhnom Napryazhennom Sostoyanii* [Deformation and Strength of Materials under Complex Stress State] (Kyiv: Naukova Dumka: 1976) (in Russian).
3. R. Peterson, *Koeffitsienty Kontsentratsii Napryazheniy* [Stress Concentration Coefficients] (Moscow: Mir: 1977) (in Russian).
4. V. P. Kogaev, N. A. Makhutov, and A. P. Gusenkov, *Raschety Detaley Mashin i Konstruktsiy na Prochnost' i Dolgovechnost'* [Calculations of Machine Parts and Constructions for Strength and Durability] (Moscow: Mashinostroenie: 1985) (in Russian).
5. A. A. Shmykov, *Spravochnik Termista* [Thermist's Handbook] (Moscow: Mashgiz: 1961) (in Russian).
6. G. V. Uzhik, *Soprotivleniyu Otryvu i Prochnost' Materialov* [Detachment Resistance and Strength of Materials] (Moscow: Izdatel'stvo Akademii Nauk SSSR: 1950) (in Russian).
7. V. N. Grishchenko, Yu. Ya. Meshkov, Yu. A. Polushkin, and A. V. Shiyan, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **37**, No. 7: 961 (2015) (in Russian).
8. Yu. Ya. Meshkov, A. V. Shiyan, and V. N. Grishchenko, *Stroitel'stvo, Materialovedenie, Mashinostroenie*, **89**: 112 (2016) (in Russian).
9. J. H. Hollomon, *Trans. AIME Iron Steel Div.*, **162**: 268 (1945).
10. A. V. Shiyan, *Fizicheskaya Priroda Lokal'nogo Napryazheniya Khrupkogo Razrusheniya Staley i Svarnykh Shvov* [Physical Nature of Local Stress of Brittle Fracture of Steels and Joint Welds] (Thesis of Dissert. for PhD Phys.-Math. Sci.) (Kyiv: Institut metallofiziki AN USSR: 1990) (in Russian).
11. *GOST 25.506-85 Raschety i Ispytaniya na Prochnost'. Metody Mekhanicheskikh Ispytaniy Metallov. Opredelenie Kharakteristik Treshchinostoykosti (Vyazkosti Razrusheniya) pri Staticheskoy Nagruzhenii* [GOST 25.506-85 Calculations and Strength Tests. Methods of Mechanical Testing of Metals. Determination of Characteristics of Crack Resistance (Fracture Toughness) under Static Loading] (Moscow: Izdatel'stvo Standartov: 1985) (in Russian).
12. *GOST 9454-78 Metally. Metod Ispytaniya na Udarnyy Izgib pri Poni-zhennykh Komnatnoy i Povyshennykh Temperaturakh* [GOST 9454-78 Metals. Test Method for Impact Bending at Low Room and Elevated Temperatures] (Moscow: Izdatel'stvo Standartov: 1978) (in Russian).
13. *ASTM E1921. Standard Test Method for Determination of Reference Temperature, T₀, for Ferritic Steels in the Transition Range.*
14. G. G. Kurdyumova, Yu. V. Mil'man, and V. N. Trefilov, *Metallofizika*, **1**, No. 2: 55 (1979) (in Russian).
15. Yu. Ya. Meshkov and H. P. Zimina, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **44**, No. 2: 273 (2022) (in Ukrainian).
16. Yu. Ya. Meshkov and K. F. Soroka, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **43**, No. 6: 781 (2021) (in Ukrainian).

Засновник: НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ, ІНСТИТУТ МЕТАЛОФІЗИКИ ІМ. Г. В. КУРДЮМОВА НАН УКРАЇНИ
Видавець: ІНСТИТУТ МЕТАЛОФІЗИКИ ІМ. Г. В. КУРДЮМОВА НАН УКРАЇНИ
Передплатний індекс/Subscription index: 74312 ISSN 1024-1809

**Інформація для передплатників журналу
«МЕТАЛОФІЗИКА ТА НОВІТНІ ТЕХНОЛОГІЇ»**

Редакція журналу МНТ повідомляє читачів про передплату (що починається з будь-якого місяця випуску). Журнал МНТ входить за індексом **74312** до «Каталогу видань України». Рекомендуємо оформити передплату

1) у відділеннях поштового зв'язку через централізоване агентство ДПРІВ «ПРЕСА» (вул. Георгія Кирпи, буд. 2^а, 03999 Київ, Україна; телефакси: +380 44 2890774 / 2480377 / 2480384 / 2487802 / 2480406); e-mail: pod_ukr@presa.ua, rozn@presa.ua, info@presa.ua або

2) через Internet:

http://presa.ua/metallofizika-i-novejshie-tehnologii.html?__SID=U

(передплатний індекс МНТ: 74312) або ж

3) безпосереднім перерахуванням від **170 грн.** за один випуск до **2040 грн.** за один том (12 випусків на рік):

«ОТРИМУВАЧУ»: Інститут металофізики ім. Г. В. Курдюмова НАН України

на розрахунковий рахунок № UA058201720313291001201001901 в банку ГУДКСУ в м. Києві

Код банку: 820172

Код єдиного державного реєстру підприємств і організацій України (ЄДРПОУ): 05417331

Для «ПОСТАЧАЛЬНИКА» — Інституту металофізики ім. Г. В. Курдюмова НАН України

Свідцтво платника податку на додану вартість (ПДВ) № 36283185, індивідуальний податковий номер (ПН) 054173326066

Код призначення платежу: 25010100

ПРИЗНАЧЕННЯ ПЛАТЕЖУ: за журнал «Металофізика та новітні технології» (том(и), номер(и), рік(роки)) для РВВ ІМФ НАНУ

ПІДСТАВА: передоплата 100%.

INFORMATION FOR FOREIGN SUBSCRIBERS

Editorial Board of a Monthly Research Journal 'Metallophysics and Advanced Technologies' (transliteration: 'Metallofizika i Noveishie Tekhnologii') (CODEN: MNTEEU; ISSN: 1024-1809) advertises the subscription on an annual basis. Orders should be placed through one of the methods described below. Besides the subscription *via* the centralized service by State Enterprise 'PRESA' (2^a Georgiy Kyrpa Str., UA-03999 Kyiv, Ukraine; faxes: +380 44 2890774 / 2480377 / 2480384 / 2487802 / 2480406 / 2487809; e-mail: pod_ukr@presa.ua, rozn@presa.ua, info@presa.ua) or *via* Internet:

http://presa.ua/metallofizika-i-novejshie-tehnologii.html?__SID=U

the Editorial Board will take orders sent directly to the Editorial Board. To obtain our journal, the persons and institutions, interested in this title, should made the definite payment sent, according to the order, to the account of the Publisher—G. V. Kurdyumov Institute for Metal Physics of the N.A.S. of Ukraine.

The journal frequency is 12 issues per year. The annual subscription rate for 'Metallophysics and Advanced Technologies' is 156 USD (or 132 EUR), including airmail postage, packing and handling charges. All other-currency payments should be made using the current conversion rate set by the Publisher (subscribers should contact the Editorial Board).

Subscription is valid after obtaining by the Editorial Board of banker's order. Banker's order should be sent to the address:

G. V. Kurdyumov Institute for Metal Physics, N.A.S. of Ukraine,

currency account No. UA603223130000025308000000067, MFO 322313,

in the Kyiv's Branch of JSC 'The State Export-Import Bank of Ukraine' (Public Joint Stock Company 'Ukreximbank') (11^б Bulvarno-Kudryavska Str., UA-04053 Kyiv, Ukraine)

simultaneously with written notice providing the Editorial Board with a copy of banker's order for subscription and detailed address for mailing.

Prepayment is 100%.

Address of the Editorial Board: G. V. Kurdyumov Institute for Metal Physics, N.A.S. of Ukraine, 36 Academician Vernadsky Blvd., UA-03142 Kyiv, Ukraine.

E-mail: mfint@imp.kiev.ua (with subject beginning by word 'mfint')

Fax: +380 44 4242561. Phone: +380 44 4249042.

After receiving of banker's order, the Editorial Board will send the guarantee letter to the subscriber's address for mailing the journal for a corresponding term.

The Editorial Board of this journal hopes for effective co-operation with its present and future readers and requests to promote the maximum information about its contents to persons and organizations concerned.