

A RESEARCH JOURNAL

METALLOPHYSICS AND ADVANCED TECHNOLOGIES

(Metallofizika i Noveishie Tekhnologii)

FOUNDED IN SEPTEMBER, 1979

Volume 47, No. 5; May 2025

CONTENTS

Editorial Announcements	Information for Foreign Subscribers	V
	Information for Contributors	VII
Interactions of Radiation and Particles with Condensed Matter	The Influence of Mechanical Deformations on the Optical Properties of Metal Alloys in the X-Ray Range <i>A. Yu. OVCHARENKO and Yu. M. OVCHARENKO</i>	453
Physics of Strength and Plasticity	Anisotropy of the Microstructure and Microhardness of the AlSi10Mg Alloy Fabricated by Selective Laser Melting <i>A. P. BURMAK, S. M. VOLOSHKO, S. I. SIDORENKO, I. A. VLADYMYRSKYI, M. M. VORON, B. M. MORDYUK, and M. O. VASYLYEV</i>	473
	The Influence of Thermal-Diffusion Saturation on the Properties of Boride Layers in AISI1095 Tool Steel <i>V. A. KOZECHKO, V. I. KOZECHKO, O. O. BOHDANOV, and V. A. DERBABA</i>	493
	Exploring the Impact of Process Parameters on Tensile Strength in Fused Deposition Modelling: A Comprehensive Study with Predictive Models <i>K. ZOUAOUI, S. AMROUNE, M.-S. CHEBBAH, M. SALAMANI, M. FNIDES, and A. KHALDOUNE</i>	503
	The Efficiency of Encapsulation of the Functional Component of the Welding Wire Charge on Changing the Structure and Properties of the Metal of the Deposited Layers <i>V. V. PEREMIT'KO, V. I. SUKHOMLYN, A. V. YEVDOKYMOV, and A. A. HOLYAKEVYCH</i>	523
Metallic Surfaces	The Influence of the Type and Granulometric	

and Films	Composition of the Core Components of Metal Powder Electrode Wires on the Structure and Properties of the Multilayer Deposited Metal of the C–Cr–Mo–W–V Alloying System <i>A. A. BABINETS, S. L. SCHWAB, and M. M. VORON</i>	535
Crystal-Lattice Defects	Kinetics of Interaction of ПТ-4 Grade Ti with VN and Graphite during Mechanical Alloying <i>N. M. BILYAVINA, A. M. KURYLIUK, P. P. KOGUTYUK, and R. V. OSTAPENKO</i>	555

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

Executive Managing Editor—*O. S. Gatsenko*

Editors—*L. I. Makarenko, M. V. Manilo, I. V. Zagorulko*

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

Media Identifier R30-03171

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’, of the NAS 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.47.05>

МЕТАЛОФІЗИКА
ТА
НОВІТНІ ТЕХНОЛОГІЇ

НАУКОВИЙ ЖУРНАЛ
ЗАСНОВАНИЙ У ВЕРЕСНІ 1979 р.

Том 47, № 5; травень, 2025

ЗМІСТ

Редакційні оголошення	Інформація для закордонних передплатників	V
	Інформація для авторів	VII
Взаємодії випромінювання та частинок із конденсованою речовиною	Вплив механічних деформацій на оптичні властивості металевих стопів у Рентгеновому діапазоні <i>А. Ю. ОВЧАРЕНКО, Ю. М. ОВЧАРЕНКО</i>	453
Фізика міцності та пластичності	Анізотропія мікроструктури та мікротвердості стопу AlSi10Mg, виготовленого селективним лазерним топленням <i>А. П. БУРМАК, С. М. ВОЛОШКО, С. І. СИДОРЕНКО, І. А. ВЛАДИМИРСЬКИЙ, М. М. ВОРОН, Б. М. МОРДЮК, М. О. ВАСИЛЬЄВ</i>	473
	Вплив термодифузійного насичення на властивості боридних шарів інструментальної криці AISI1095 <i>В. А. КОЗЕЧКО, В. І. КОЗЕЧКО, О. О. БОГДАНОВ, В. А. ДЕРБАБА</i>	493
	Вивчення впливу параметрів процесу на міцність на розрив у моделюванні осадження плавленням: всебічне дослідження з прогнозними моделями <i>К. ЗУАУІ, С. АМРУН, М.-С. ЧЕББАХ, М. САЛАМАНІ, М. ФНІДЕС, А. ХАЛДОУН</i>	503
	Дієвість інкапсуляції функціональної складової шихти зварювального дроту на зміну структури та властивостей металу нагрітих шарів <i>В. В. ПЕРЕМІТЬКО, В. І. СУХОМЛИН, А. В. ЄВДОКИМОВ, А. А. ГОЛЯКЕВИЧ</i>	523
Металічні поверхні та плівки	Вплив типу та ґранулометричного складу компонентів осердя металопорошкових електродних дротів на структуру та властивості багатшарового нагрітого металу системи легування C–Cr–Mo–W–V	

Дефекти кристалічної ґратниці	А. А. БАБІНЕЦЬ, С. Л. ШВАБ, М. М. ВОРОН Кінетика взаємодії Ті марки ПТ-4 з VN і графітом під час механічного легування Н. М. БІЛЯВІНА, А. М. КУРИЛЮК, П. П. КОГУТЮК, Р. В. ОСТАПЕНКО	535 555
--------------------------------------	--	--

Наукові редактори випуску: *О. С. Гаценко, В. А. Татаренко*

Відповідальний секретар редакційної колегії *О. С. Гаценко*

Редактор-коректор *О. С. Гаценко*

Технічні редактори: *І. В. Загорулько, Л. І. Макаренко, М. В. Маніло*

Художні редактори: *І. В. Загорулько, Л. І. Макаренко, М. В. Маніло*

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

Ідентифікатор медіа R30-03171

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 29.05.2025 р. Формат 70×100/16.

Ум. друк. арк. 9,83. Обл.-вид. арк. 9,04.

Тираж 55 пр. Зам. № 0000 від 29.05.2025 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.47.05>

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 Vlastyvosti 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 і 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 чергово 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 латинський транслітерації (система BGN/PCGN; рекомендовані транслітератори: <http://www.slovyk.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)

PACS numbers: 07.05.Tr, 42.25.Bs, 42.30.Va, 61.05.cp, 61.72.Ff, 62.20.F-, 81.70.Fy

Вплив механічних деформацій на оптичні властивості металевих стопів у Рентгеновому діапазоні

А. Ю. Овчаренко, Ю. М. Овчаренко

*Інститут прикладної фізики Національної академії наук України,
вул. Петропавлівська, 58,
40000 Суми, Україна*

У рамках теорії Френеля–Кірхгоффа проведено комп’ютерне моделювання взаємодії Рентгенового випромінювання з довжиною хвилі $\lambda = 1.5374 \text{ \AA}$ (лінія CuK_α) з тривимірними зразками довільної геометричної форми, виготовленими зі стопів $\text{Fe-13\%Cr-(2, 4, 6, 8)\%Al}$ та $\text{Fe-1,3\%Cu-1\%Ni}$ за температури у 300 К, які піддавалися деформації стиснення–розтягання. Величини відносної деформації ε дорівнювали $-0,10$, $-0,05$, $0,00$, $0,05$ і $0,10$. Було показано, що Рентгенове випромінювання під час взаємодії з речовиною є дуже чутливим до зміни електронної густини матеріалу. На основі відомих теоретичних співвідношень і результатів молекулярно-динамічного моделювання запропоновано підхід щодо числових розрахунків декременту заломлення δ та коефіцієнта вбирання β Рентгенового випромінювання для багатокомпонентних стопів із різним процентним вмістом хемічних елементів і різною величиною деформації. Результати роботи носять прикладний характер і можуть бути корисними розробникам лабораторного обладнання та спеціалістам з матеріалознавства.

Ключові слова: дифракція Рентгенового випромінювання, теорія Френеля–Кірхгоффа, фазовий контраст, оптичний декремент заломлення, коефіцієнт вбирання, механічна деформація.

Corresponding author: Artur Yuriiovych Ovcharenko
E-mail: oartturr@gmail.com

*Institute of Applied Physics, National Academy of Sciences of Ukraine,
58 Petropavlivska Str., UA-40000 Sumy, Ukraine*

Citation: A. Yu. Ovcharenko and Yu. M. Ovcharenko, The Influence of Mechanical Deformations on the Optical Properties of Metal Alloys in the X-Ray Range, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, 47, No. 5: 453–471 (2025), DOI: [10.15407/mfint.47.05.0453](https://doi.org/10.15407/mfint.47.05.0453)

© Publisher PH “Akadempriodyka” of the NAS of Ukraine, 2025. This is an open access article under the CC BY-ND license (<https://creativecommons.org/licenses/by-nd/4.0>)

Within the framework of the Fresnel–Kirchhoff theory, a computer simulation of the interaction of x-ray radiation with a wavelength of $\lambda = 1.5374 \text{ \AA}$ (line $\text{CuK}\alpha$) with three-dimensional samples of arbitrary geometric shape made of alloys $\text{Fe-13\%Cr-(2, 4, 6, 8)\%Al}$ and $\text{Fe-3\%Cu-1\%Ni}$ at a temperature of 300 K, which are subjected to compression–tension deformation. The values of the relative deformation ε are equal to -0.10 , -0.05 , 0.00 , 0.05 , and 0.10 . As shown, the x-ray radiation interacting with matter is very sensitive to changes in the electron density of the material. Based on known theoretical relations and the results of molecular-dynamic modelling, an approach of numerical calculations of refraction decrement δ and absorption coefficient β of x-ray radiation for multicomponent alloys with different percentage composition of chemical elements and different amount of deformation is proposed. The results of this work are applied in nature and can be useful both to developers of laboratory equipment and to specialists in the field of materials science.

Key words: x-ray diffraction, Fresnel–Kirchhoff theory, phase contrast, optical refraction decrement, absorption coefficient, mechanical deformation.

(Отримано 29 квітня 2024 р.; остаточн. варіант — 14 січня 2025 р.)

1. ВСТУП

Стопи на основі Fe, Cr, Cu, Ni, Al та інших металів широко використовуються в різних галузях промисловості, таких як машинобудування, енергетика, авіація та космічна техніка, через їхню високу міцність, корозійну стійкість, магнетні властивості тощо. Невід’ємною частиною технологічних процесів виготовлення виробів із цих стопів часто є механічна деформація [1, 2]. Тому розуміння змін оптичних властивостей внаслідок деформації може допомогти контролювати якість продукції та передбачати її експлуатаційні характеристики, наприклад, за допомогою Рентгенового випромінювання (РВ) як неруйнівного методу виявлення структурних особливостей і змін досліджуваних об’єктів [3–6].

У даній роботі ми пропонуємо методи розрахунку оптичних декрементів заломлення та коефіцієнтів вбирання багатокомпонентних металевих стопів на основі теоретичних співвідношень і результатів молекулярно-динамічного моделювання. У рамках скалярної теорії Френеля–Кірхгофа провели комп’ютерну симуляцію взаємодії РВ з металевими стопами $\text{Fe-13\%Cr-(2, 4, 6, 8)\%Al}$ та $\text{Fe-1,3\%Cu-1\%Ni}$ за температури у 300 К, які піддавалися механічній деформації стиснення–розтягання.

Результати даних досліджень можуть бути використані для розробки нових методів неруйнівного контролю якості матеріалів, заснованих на мірянні оптичних властивостей, а також корисні для створення прототипів нового обладнання та проведення реальних експериментів в області матеріалознавства.

2. ОПТИЧНІ ВЛАСТИВОСТІ МЕТАЛЕВИХ СТОПІВ

2.1. Аналітичний модель розрахунку оптичних властивостей об'єктів

У процесі моделювання взаємодії РВ з речовиною для одержання точних результатів слід враховувати параметри, які характеризують властивості об'єкта. Під час проходження РВ через досліджуваний зразок відбувається заломлення та вбирання РВ, що кількісно можна охарактеризувати за допомогою комплексного показника заломлення n :

$$n = 1 - \delta + i\beta, \quad (1)$$

де δ — декремент заломлення, β — коефіцієнт вбирання.

Величина δ залежить від хемічного складу, електронної густини матеріялу об'єкта та довжини хвилі падного РВ. Цей параметер визначає фазовий зсув і амплітуду вторинних хвиль, розсіяних об'єктом, що істотно впливає на дифракційну картину. Неврахування декремента може призвести до значних похибок у розрахунках.

Очевидно, що за механічної деформації буде відбуватися зміна електронної густини і це приведе до зміни оптичних властивостей досліджуваного матеріялу. Одержимо співвідношення для декремента заломлення δ та коефіцієнта вбирання β багатокомпонентного стопу.

В загалі-то величину δ можна обчислити за формулою [7, 8]:

$$\delta = \frac{r_0 \lambda^2 n_e}{2\pi}, \quad (2)$$

де $r_0 = e^2/(4\pi\epsilon_0 mc^2)$ — класичний радіус електрона, n_e — електронна густина, e — заряд електрона, ϵ_0 — діелектрична проникність вакууму, m — маса електрона, c — швидкість світла у вакуумі.

У формулі (2) електронна густина n_e визначається кількістю електронів z в одному атомі та концентрацією атомів n_a :

$$n_e = zn_a = z \frac{k_c}{V_c}, \quad (3)$$

де k_c і V_c — кількість атомів в одній елементарній комірці кристалу й об'єм елементарної комірки відповідно.

Для багатокомпонентного стопу, де концентрації компонентів дорівнюють $c_1, c_2, \dots, c_l$, формула (3) може бути записана так:

$$n_e = \frac{k_c}{V_c} (z_1 c_1 + z_2 c_2 + \dots + z_l c_l), \quad (4)$$

де $z_1, z_2, \dots, z_l$ — порядкові номери хемічних елементів, які є компонентами стопу, l — кількість елементів у стопі.

Підставляючи (4) в (2), одержуємо вираз для декременту заломлення δ стопу з рівномірним розподілом компонентів по об'єму кристалу:

$$\delta = \frac{e^2 \lambda^2 k_c}{8\pi^2 \epsilon_0 m c_0^2 V_c} (z_1 c_1 + z_2 c_2 + \dots + z_l c_l). \quad (5)$$

Для більш точного розрахунку величини δ порядкові номери $z_1, z_2, \dots, z_l$ у формулі (5) потрібно замінити на дійсні частини комплексних атомових формфакторів $f = z + f' + i f''$ [7]:

$$\delta = \frac{e^2 \lambda^2 k_c}{8\pi^2 \epsilon_0 m c_0^2 V_c} [c_1 (z_1 + f'_1) + c_2 (z_2 + f'_2) + \dots + c_l (z_l + f'_l)]. \quad (6)$$

Коефіцієнт вбирання β визначається уявною частиною f'' комплексного атомового формфактора [7]:

$$\beta = \frac{e^2 \lambda^2 k_c}{8\pi^2 \epsilon_0 m c_0^2 V_c} f''. \quad (7)$$

Тоді коефіцієнт вбирання стопу з рівномірним розподілом компонентів можна знайти як суму коефіцієнтів вбирання від кожного компонента:

$$\beta = \frac{e^2 \lambda^2 k_c}{8\pi^2 \epsilon_0 m c_0^2 V_c} [c_1 f''_1 + c_2 f''_2 + \dots + c_l f''_l]. \quad (8)$$

Фазовий зсув Рентгенової хвилі, що пройшла через зразок, залежить від варіацій декременту заломлення δ всередині зразка і від його товщини. У випадку монохроматичної хвилі, що поширюється вздовж осі Oz , зміна фази може бути записана в такому вигляді [8]:

$$\varphi(x, y) = -\frac{2\pi}{\lambda} \int \delta(x, y, z) dz, \quad (9)$$

де інтеграл розраховується по всій товщині об'єкта в напрямку поширення Рентгенового пучка. Пізніше формула (9) буде використана для обчислення зсуву фаз під час проходження РВ через досліджувані зразки.

2.2. Вибір параметрів джерела РВ

Реальні джерела РВ мають певні скінченні розміри, які необхідно враховувати під час вибору віддалі від Рентгенового джерела до

об'єкта дослідження для одержання когерентного випромінення в області розташування зразків. Типові розміри джерел мають бути порядку мікрометрів. Врахування геометрії випромінювача є особливо важливим для малих кутів розсіювання.

Зазвичай РВ не є строго монохроматичним, а має певну спектральну ширину. У результаті відбувається суперпозиція дифракційних картин зі своїм ваговим внеском для різних довжин хвиль, що відповідають спектральному розподілу РВ. Наявність спектрального інтервалу РВ приводить до певного зміщення максимумів інтенсивності у вислідній дифракційній картині від кожної з монохроматичних компонент.

У даному дослідженні не ставилася мета вивчити особливості формування зображень з урахуванням розмірів і ступеня монохроматичності джерел; тому для моделювання дифракції РВ на різних об'єктах було вибрано монохроматичне точкове джерело з довжиною хвилі $\lambda = 1,5374 \text{ \AA}$ (лінія CuK_α).

2.3. Параметри розрахунку декрементів заломлення δ і коефіцієнтів вбирання β для металевих стопів

Для вирішення даної задачі необхідно скористатися формулами (6) і (8). У даній роботі розглядаються стопи на основі кристалу заліза, які мають об'ємноцентровану кубічну (ОЦК) ґратницю. Це означає, що одній елементарній комірці належать $k_c = 2$ атоми. Атомові формфактори чистих металів, які є компонентами досліджуваних нами стопів, подано у табл. 1 [7].

Основною перешкодою використання співвідношень (6) і (8) є об-

ТАБЛИЦЯ 1. Порядкові номери z , атомові формфактори f_1 і f_2 , оптичні декременти заломлення δ та коефіцієнти вбирання β для РВ з довжиною хвилі $\lambda = 1,5374 \text{ \AA}$ (лінія CuK_α) для деяких чистих металів [7].

TABLE 1. Serial numbers z , atomic form factors f_1 and f_2 , optical refraction decrements δ and absorption coefficients β for x-ray radiation with a wavelength of $\lambda = 1.5374 \text{ \AA}$ (CuK_α line) for some pure metals [7].

Параметер	Хемічний елемент				
	Fe	Cu	Ni	Cr	Al
z	26	29	28	24	13
$f_1 = z + f'$	24,88	27,01	24,93	23,85	13,21
$f_2 = f''$	3,199	0,6054	0,5221	2,423	0,2406
$\delta \cdot 10^5$	2,2391	2,4311	2,4139	2,1055	0,84366
$\beta \cdot 10^6$	2,8793	0,54491	0,50552	2,1387	0,15364

числення об'ємів елементарної комірки V_c для сплавів з різною концентрацією компонентів. У загальному випадку V_c для ОЦК-структури можна визначити за формулою $V_c = a^3$, де a — параметр кристалічної ґратки. Але параметр a залежить від температури зразків, процентного вмісту різних хемічних елементів у сполуку, наявності дефектів, а такі експериментальні дані практично відсутні. Для визначення сталої кристалічної ґратки a у даній роботі проведено комп'ютерне моделювання методом молекулярної динаміки з використанням програми LAMMPS [9] з відкритим програмним кодом. Були створені комп'ютерні моделі кристалів сплавів Fe–13%Cr–(2, 4, 6, 8)%Al та Fe–1,3%Cu–1%Ni. У якості прикладу на рис. 1, а показано кристал сплаву Fe–13%Cr–8%Al.

Моделювання здійснювалося за допомогою *NVE*- та *NPT*-статистичних ансамблів з використанням термостата Нозе–Гувера. Важливим параметром під час використання таких статистичних ансамблів є середній час τ між двома послідовними актами обміну енергією між термостатом і досліджуваною системою. Очевидно,

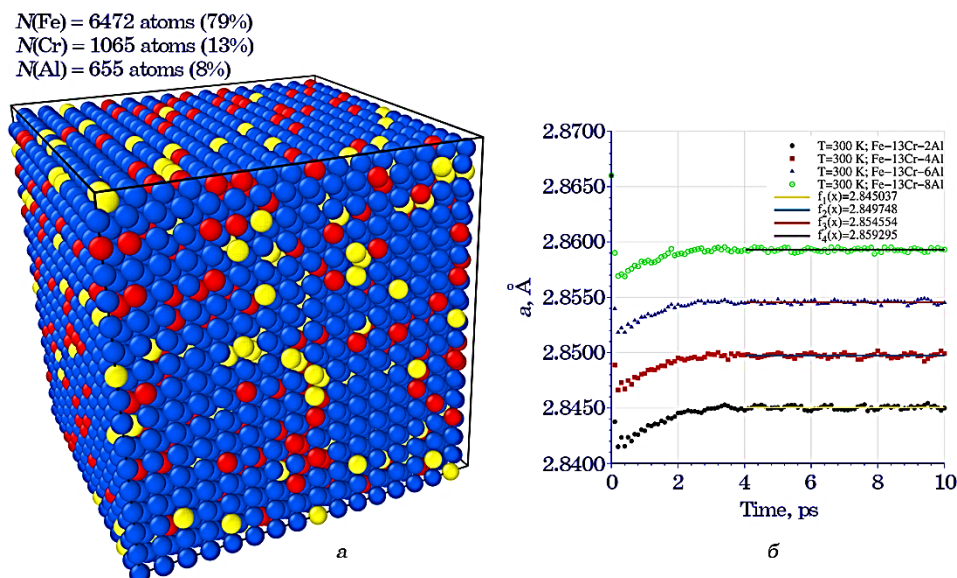


Рис. 1. а) Комп'ютерний модель сплаву Fe–13%Cr–8%Al (атоми Fe, Cr й Al показано синім, червоним і жовтим кольорами відповідно); б) часові залежності параметрів кристалічної ґратки сплавів Fe–13%Cr–(2, 4, 6, 8)%Al під час термічного відпалювання зразків за температури $T = 300 \text{ K}$.

Fig. 1. а) Computer model of Fe–13%Cr–8%Al alloy (iron, chromium, and aluminium atoms are shown in blue, red, and yellow colours, respectively); б) time dependences of crystal-lattice parameters of Fe–13%Cr–(2, 4, 6, 8)%Al alloys during thermal annealing of samples at temperature $T = 300 \text{ K}$.

що час τ дорівнює середньому періоду теплових коливань атомів у кристалічній ґратниці.

Проведемо розрахунок часу τ для стопів на основі заліза методами статистичної фізики.

Кількість різних квантових станів $d\Omega$ для будь-якого вибраного атома можна знайти так:

$$d\Omega = 2 \frac{d\Gamma}{h^3}, \quad (10)$$

де $d\Gamma$ — елемент фазового об'єму для одного атома, h — Планкова стала. Множник 2 у формулі (10) означає, що кожен атом може породжувати механічні хвилі у кристалі з двома типами поляризації. Елемент фазового об'єму $d\Gamma$ можна виразити через період коливань атома у кристалі:

$$d\Gamma = 4\pi V p^2 dp = \left\{ p = \frac{h}{\lambda} = \frac{h}{vT}, dp = \left| -\frac{hdT}{vT^2} \right| \right\} = \frac{4\pi V h^3 dT}{v^3 T^4}, \quad (11)$$

де p — імпульс атома, λ — довжина де Бройлевої хвилі для атома, v — швидкість звуку у кристалі, T — період коливань атома, V — об'єм кристалу.

Після підстановки (11) в (10) одержимо:

$$d\Omega = \frac{8\pi V dT}{v^3 T^4}. \quad (12)$$

Запишімо умову нормування для функції розподілу (12):

$$\Omega = 3N = \int_{T_{\min}}^{\infty} \frac{8\pi V dT}{v^3 T^4} = -\frac{8\pi V dT}{v^3 T^4} \Big|_{T_{\min}}^{\infty} = \frac{8\pi V}{3v^3 T_{\min}^3}, \quad (13)$$

де N — кількість атомів у кристалі, $T_{\min}$ — мінімальне значення періоду коливань атома у кристалі.

Комбінуючи вирази (12) та (13), одержимо:

$$d\Omega = \frac{9NT_{\min}^3 dT}{T^4}. \quad (14)$$

Тоді ймовірність $d\omega$ того, що період коливань атома лежить у межах від T до $T+dT$, можна знайти так:

$$d\omega = \frac{d\Omega}{\Omega} = \frac{3T_{\min}^3 dT}{T^4}. \quad (15)$$

Середній період коливань атомів у кристалічній ґратниці можна обчислити за допомогою виразу (15):

$$\tau = \int_{T_{\min}}^{\infty} T d\omega = \int_{T_{\min}}^{\infty} \frac{3T_{\min}^3 dT}{T^3} = \frac{3T_{\min}}{2}. \quad (16)$$

Мінімальний період $T_{\min}$ коливань атомів обчислюється через сталу кристалічної ґратниці a :

$$T_{\min} = \frac{\lambda_{\min}}{\nu} = \frac{2a}{\nu}. \quad (17)$$

Після підстановки (17) в (16) одержуємо остаточну формулу для розрахунку середнього періоду коливань атомів у кристалі:

$$\tau = \frac{3a}{\nu}. \quad (18)$$

Оскільки основним елементом у досліджуваних стопах є Fe, то числову оцінку величини τ здійснимо за параметром кристалічної ґратниці заліза, що становить $a = 2,866 \text{ \AA}$, та за середньою швидкістю поширення звуку у кристалі заліза $\nu = 5950 \text{ м/с}$. Таким чином, параметер термостату τ , необхідний для проведення коректного комп'ютерного моделювання, обчислюємо за формулою (18):

$$\tau = \frac{3a}{\nu} = \frac{3 \cdot 2,866 \cdot 10^{-10}}{5950 \cdot 10^{-12}} \cong 0,14 \text{ [пс]}. \quad (19)$$

Визначення параметрів a кристалічних ґратниць досліджуваних стопів методом молекулярної динаміки розглянемо нижче.

2.4. Створення геометричних моделей кристалів стопів

У даній роботі були розроблені програмні коди, які уможливають генерувати комп'ютерні моделі кристалів стопів Fe-13%Cr-(2, 4, 6, 8)%Al та Fe-1,3%Cu-1%Ni із заданими концентраціями компонентів.

Водночас є можливість створення зразків із різним статистичним розташуванням компонентів, що уможливорює проводити моделювання одного і того самого процесу багато разів, як і у реальних експериментах, з метою накопичення статистичних даних.

На цьому етапі ми не знаємо реальних значень параметрів кристалічної ґратниці досліджуваних об'єктів, оскільки сталі a залежать від температури матеріалів і концентрації компонентів. Тому усі комп'ютерні моделі стопів будуються за параметрами кристалічної ґратниці чистого заліза, оскільки Fe є базовим елементом досліджуваних зразків.

Наступний етап — це одержання кристалів у стані термодинамічної рівноваги.

ТАБЛИЦЯ 2. Параметри кристалічних ґратниць досліджуваних стопів за температури $T = 300$ К.**TABLE 2.** Crystal-lattice parameters of the investigated alloys at a temperature of $T = 300$ K.

Стоп	a , Å
Fe-13%Cr-2%Al	2,8450
Fe-13%Cr-4%Al	2,8497
Fe-13%Cr-6%Al	2,8546
Fe-13%Cr-8%Al	2,8593
Fe-1,3%Cu-1%Ni	2,8758

2.5. Термічний відпал зразків до стану термодинамічної рівноваги

Для проведення будь-якого комп'ютерного моделювання фізичних процесів методами молекулярної динаміки необхідно підключити потенціал міжатомової взаємодії та надати усім атомам початкові швидкості відповідно до заданої температури. У нашій роботі для стопів Fe-Cr-Al був використаний потенціал міжатомової взаємодії, розроблений авторами [10], а для стопів Fe-Cu-Ni нами був створений власний потенціал. Термічне відпалювання кристалів здійснювалося за температури $T = 300$ К за допомогою термостата Нозе-Гувера. Після відпалювання досліджуваних зразків ми одержали кристали у стані термодинамічної рівноваги з параметрами кристалічної ґратниці, що відповідають дійсності. На рисунку 1, б показано часові залежності параметрів a кристалічної ґратниці стопів Fe-13%Cr-(2, 4, 6, 8)%Al під час термічного відпалювання зразків за температури $T = 300$ К. З цих залежностей бачимо, що через 4 пс після початку відпалювання ці параметри ґратниці перестають змінюватися з часом, якщо не брати до уваги невеликі теплові флюктуації. Використовуючи метод найменших квадратів, за даними графіками було знайдено параметри a для ґратниць усіх досліджуваних стопів за температури $T = 300$ К (див. табл. 2).

2.6. Розрахунок оптичних декрементів заломлення та коефіцієнтів вбирання стопів

Використовуючи формули (6) і (8) та дані таблиць 1 і 2, було розраховано декременти заломлення δ та коефіцієнти вбирання β стопів Fe-13%Cr-(2, 4, 6, 8)%Al та Fe-1,3%Cu-1%Ni. У таблиці 3 показано результати цих розрахунків.

Отже, одержано оптичні властивості досліджуваних металевих стопів для РВ з довжиною хвилі $\lambda = 1,5374$ Å (лінія CuK_α), які

ТАБЛИЦЯ 3. Розраховані за формулами (6) і (8) оптичні декременти заломлення δ та коефіцієнти вбирання β для РВ з довжиною хвилі $\lambda = 1,5374$ Å (лінія CuK_α) для деяких металевих стопів за різних значень величини відносної деформації ε .

TABLE 3. The optical refraction decrements δ and absorption coefficients β for x-ray radiation with a wavelength of $\lambda = 1.5374$ Å (CuK_α line) for some metal alloys at different values of the relative strain ε are calculated according to formulae (6) and (8).

ε	-0,10	-0,05	0,00	0,05	0,10
Fe-13%Cr-2%Al					
$\delta \cdot 10^5$	2,5076	2,3756	2,2569	2,1494	2,0517
$\beta \cdot 10^6$	3,1088	2,9452	2,7979	2,6647	2,5436
Fe-13%Cr-4%Al					
$\delta \cdot 10^5$	2,4715	2,3414	2,2243	2,1184	2,0221
$\beta \cdot 10^6$	3,0332	2,8736	2,7299	2,5999	2,4817
Fe-13%Cr-6%Al					
$\delta \cdot 10^5$	2,4351	2,307	2,1916	2,0873	1,9924
$\beta \cdot 10^6$	2,9577	2,802	2,6619	2,5352	2,4199
Fe-13%Cr-8%Al					
$\delta \cdot 10^5$	2,3996	2,2733	2,1597	2,0568	1,9633
$\beta \cdot 10^6$	2,8835	2,7318	2,5952	2,4716	2,3592
Fe-1,3%Cu-1%Ni					
$\delta \cdot 10^5$	2,4672	2,3373	2,2204	2,1147	2,0186
$\beta \cdot 10^6$	3,1076	2,9440	2,7968	2,6636	2,5426

уможливляють зробити висновок, що декремент заломлення δ та коефіцієнт вбирання β є дуже чутливими до зміни значення електронної густини n_e . У даній роботі ми дослідили, як зміна концентрації компонентів у металевих стопах і механічна деформація впливають на електронну густину n_e та пропорційні їй декремент заломлення δ та коефіцієнт вбирання β .

Зміна електронної густини для кожного досліджуваного зразка зумовлюється механічною деформацією. За деформацій стискання $\varepsilon = -0,05$ і $\varepsilon = -0,10$ вздовж одного з напрямків об'єм кристалів зменшується, а отже, згідно з формулами (3), (6), (8), електронна густина n_e , декремент заломлення δ та коефіцієнт вбирання β зростають у порівнянні з недеформованим ($\varepsilon = 0,00$) зразком, і навпаки — у випадку деформації розтягання $\varepsilon = 0,05$ і $\varepsilon = 0,10$ вздовж одного з напрямків об'єм кристалів зростає, а n_e , δ та β зменшуються у порівнянні з недеформованим зразком.

Зміна концентрації компонентів у досліджуваних металевих стопах також приводить до істотних змін оптичних властивостей.

Для будь-якої без виключення деформації чи недеформованого стану зразка зі збільшенням концентрації Алюмінію спостерігається зменшення декременту заломлення δ та коефіцієнта вбирання β . Такий результат пояснюється тим, що кожний атом Алюмінію має у 2 рази менше електронів, ніж атом заліза, — 13 електронів в одному атомі Алюмінію і 26 електронів в атомі Феруму. Це означає, що зі зростанням концентрації атомів Алюмінію у стопках Fe–Cr–Al кількість електронів у кристалі зменшується, а об'єм практично не змінюється, бо параметри кристалічних ґратниць для стопів з різною концентрацією Алюмінію мало відрізняються один від одного (див. табл. 2). Це приводить до зменшення електронної густини n_e і, відповідно, до зменшення δ та β .

3. МОДЕЛЮВАННЯ ВЗАЄМОДІЇ РВ ІЗ МЕТАЛЕВИМИ ЗРАЗКАМИ СТОПІВ

3.1. Створення моделей об'єктів дослідження та схема проведення комп'ютерних експериментів

Запропонований у попередньому розділі даної роботи підхід щодо розрахунку оптичних властивостей металевих стопів у Рентгеновому діапазоні може бути застосований практично до будь-яких систем. Нами було проведено моделювання взаємодії РВ зі стопом Fe–1,3%Cu–1%Ni, оптичні параметри якого наведено у табл. 3. Кожний досліджуваний зразок (див. рис. 2, а) незалежно від величини деформації задавався як геометричне місце точок, які формують його поверхню. Розглянемо більш детально процес генерування комп'ютерних моделей таких досліджуваних об'єктів.

Для створення тривимірних об'єктів дослідження запропоновано власний підхід, суть якого полягає в наступному: 1) розбиваємо куб із ребром, рівним 1, на маленькі кубики по $N = 31$ штук вздовж кожної осі та визначаємо координати $x_1, y_1, z_1, x_2, y_2, z_2, \dots, x_l, y_l, z_l$ усіх точок, які є центрами маленьких кубиків, — всього $l = N^3 = 29791$ точок; 2) за допомогою підбраного аналітичного виразу

$$2000x^2 \frac{\sin(2z)}{3} + 1000y^2 + 10z^2 + 0,05\cos(50y) + 0,7\cos(50x) \leq 17\cos(x)$$

із усієї сукупності точок вибираємо тільки ті точки, які задовольняють цей вираз і, відповідно, формують деяку геометричну фігуру; 3) із геометричного місця точок, які відібрані на етапі 2 і формують фігуру, вибираємо точки, що лежать на поверхні цієї фігури, і таким чином одержуємо сформовану з точок замкнену поверхню (див. рис. 2, а). Останнім етапом створення комп'ютерного моделювання зразка для моделювання є масштабування геометричних розмірів

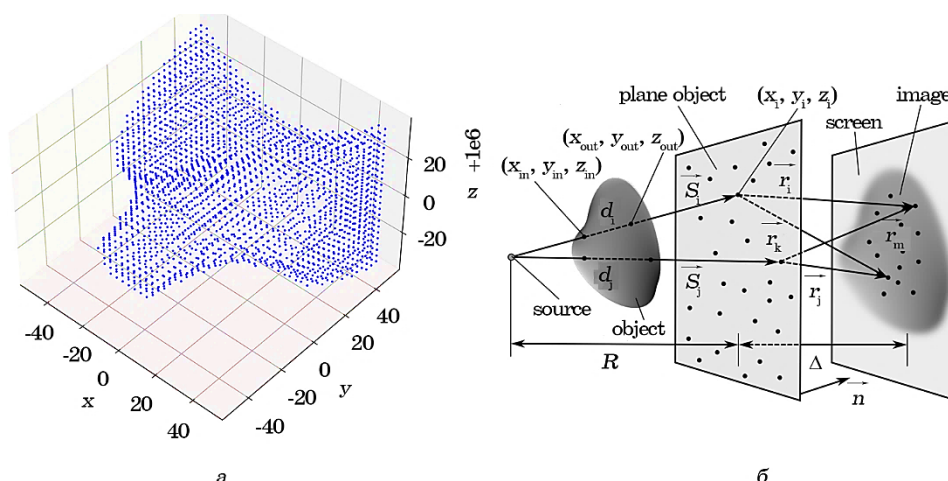


Рис. 2. а) Тривимірний модель об'єкта досліджень, поверхню якого сформовано 2404 точками; усі розміри по осях координат вказані у мікрометрах; зміщення по осі Oz на величину $1 \cdot 10^6$ мкм показує віддаленість центра області об'єкта від джерела РВ; б) схема моделювання дифракції РВ від точкового джерела на тривимірних зразках довільної геометричної форми.

Fig. 2. а) Three-dimensional model of the investigated object, the surface of which is formed by 2404 points; all dimensions along the co-ordinate axes are indicated in micrometres; displacement along the Oz axis by $1 \cdot 10^6$ μm shows the distance of the centre of the object area from the source of x-ray radiation; б) scheme of modelling x-ray diffraction from a point source on three-dimensional samples of arbitrary geometric shape.

за допомогою коефіцієнта збільшення $M = 100$, повороту на кут $\alpha = 90^\circ$ навколо осі Ox і паралельного переносу у просторі на віддаль у $1 \cdot 10^6$ мкм вздовж осі Oz — віддаль від джерела РВ до центра області об'єкта.

На рисунку 2, б показано загальну схему моделювання дифракції РВ на тривимірному об'єкті довільної геометричної форми від точкового джерела, яка використовувалась у нашій роботі. Площина об'єкта вибиралася безпосередньо за об'єктом по напрямку поширення РВ. Для кожного напрямку поширення РВ, який задавався вектором $\vec{s}_i$, проводилися розрахунки товщин a_i досліджуваного зразка та відповідних зсувів фаз.

Розглянемо основні теоретичні формули, що використовувалися для проведення моделювання.

3.2. Аналітичний модель

Розрахунок дифракційних картин від досліджуваних зразків було

виконано в рамках дифракційної теорії Френеля–Кірхгоффа для комплексної скалярної амплітуди $\psi(x_{\text{scr}}, y_{\text{scr}})$ [8, 11, 12]:

$$\begin{aligned} \psi(x_{\text{scr}}, y_{\text{scr}}) &= \\ &= \frac{1}{i\lambda} \int \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\exp(ik(r+s))}{rs} \left[\frac{\cos(\vec{n}, \vec{r}) + \cos(\vec{n}, \vec{s})}{2} \right] \exp(i\phi) \exp(-k\gamma) dx_i dy_i, \quad (20) \\ s &= \sqrt{(x_{\text{obj}} - x_{\text{source}})^2 + (y_{\text{obj}} - y_{\text{source}})^2 + R^2}, \\ r &= \sqrt{(x_{\text{obj}} - x_{\text{scr}})^2 + (y_{\text{obj}} - y_{\text{scr}})^2 + \Delta^2}, \end{aligned}$$

де $\vec{s}$ — вектор, направлений із джерела до певної точки на площині об'єкта, $\vec{r}$ — вектор, проведений із точки на площині об'єкта до точки спостереження на екрані, λ — довжина хвилі, $k = 2\pi/\lambda$ — хвильове число, n — нормаль до площини об'єкта, R — віддаль від джерела до площини об'єкта («джерело–об'єкт»), Δ — віддаль від площини об'єкта до екрана («об'єкт–екран»), ϕ — додатковий фазовий зсув, що виникає після проходження РВ через об'єкт завдяки його оптичним властивостям, $\gamma = \int \beta(x, y, z) dz$ — параметер, що описує згасання інтенсивності РВ, зумовлене вбиранням.

Оптичні властивості об'єкта проявляються у зсуві фаз ϕ , який спричинений проходженням променів крізь нього. Фазовий зсув Рентгенової хвилі, що пройшла через зразок, залежить від варіацій декременту заломлення всередині зразка та від його товщини. У разі монохроматичного паралельного пучка, що поширюється вздовж осі Oz , зміна фази може бути записана в наступній формі [8]:

$$\phi(x, y) = -\frac{2\pi}{\lambda} \int \delta(x, y, z) dz, \quad (21)$$

де δ — фазовий зсув хвильового фронту, спричинений проходженням променів крізь об'єкт, а інтеграл розраховується по всій товщині об'єкта в напрямку поширення Рентгенового пучка.

Зразки, які ми досліджували у даній роботі, були однорідними та оптично ізотропними. З урахуванням цього для розрахунку зсуву фаз ϕ формула (21) спрощується до такого вигляду:

$$\phi(x, y) = -\frac{2\pi}{\lambda} \delta d, \quad (22)$$

де δ — оптичний декремент заломлення для об'єкта, d — товщина об'єкта.

За взаємодії РВ з металами та їхніми стопами надзвичайно важ-

ливу роль відіграє процес вбирання. Параметер γ у випадку монохроматичного паралельного пучка, що поширюється вздовж осі Oz в однорідному ізотропному зразку, можна обчислити так:

$$\gamma = \beta d. \quad (23)$$

3.3. Параметри моделювання та метод проведення розрахунків

Для обчислення вислідної інтенсивности у кожній точці екрана за формулою (20) треба інтегрувати по всій площині об'єкта. Це на практиці зробити неможливо. Тому обчислення подвійного інтеграла здійснювалося чисельними методами шляхом вибору області площини об'єкта так, щоб за відсутности об'єкта інтенсивність РВ в усіх точках екрана була сталою величиною за винятком мінімумів і максимумів по краях екрана, зумовлених дифракцією від країв апертури. За таких параметрів можна коректно проводити моделювання дифракції РВ на створеному об'єкті.

Для розрахунку було вибрано область площини об'єкта у вигляді круглого диска радіусом у 200 мкм і розбито його у полярній системі координат на 1601 точку по азимутальному куту та на 800 точок по радіусу-вектору (всього $1601 \times 800 = 1280800$ точок). Екран діаметром у 1600 мкм було розміщено на віддалі у 3,5 м від центра області об'єкта. В усіх дослідях екран розбивався у полярній системі координат на 301 точку по азимутальному куту і на 150 точок по радіусу-вектору. Інтеграл у формулі (20) для комплексної амплітуди РВ у кожній точці екрана обчислювався за методом Монте-Карло. Дані розрахунки є достатньо витратними; тому у даній роботі було розроблено програмні коди для паралельних обчислень з використанням технології OpenCL.

3.4. Результати моделювання дифракції РВ на досліджуваних зразках та їх аналіза

У моделюванні можна точно контролювати та варіювати параметри: склад стопу, ступінь деформації, температуру тощо, що уможливорює ізолювати та детально вивчати вплив окремих чинників.

Використовуючи цю перевагу комп'ютерного моделювання, у даній роботі з метою виявлення зміни оптичних властивостей внаслідок механічної деформації стиснення–розтягання вздовж однієї з осей було проведено симуляцію взаємодії монохроматичного РВ з довжиною хвилі $\lambda = 1,5374 \text{ \AA}$ (лінія CuK_α) з тривимірними зразками, форму яких показано на рис. 2, а. Матеріал зразків — це стоп $\text{Fe-1,3\%Cu-1\%Ni}$ за температури у 300 К. Оскільки величини відносної деформації ε дорівнювали $-0,10$, $-0,05$, $0,00$, $0,05$ і $0,10$, то

для зручності порівняння результатів ми використовували 5 різних за геометричними розмірами недеформованих зразків. Водночас, розміри зразків були підібрані так, що за їхньої деформації на вказані величини ε для усіх зразків у деформованому стані геометричні розміри є абсолютно однаковими. Цей спосіб уможливило без зміни геометричних розмірів об'єктів змінювати оптичні декременти δ та коефіцієнти вбирання β (див. табл. 3) і виявляти зміну оптичних властивостей матеріалів внаслідок механічної деформації.

На рисунках 3 та 4 показано Рентгенові зображення та профілі інтенсивності для 5 зразків. Результати моделювання, показані на рисунках 3, в і 4, в, відносяться до недеформованого зразка.

На рисунках 3, а, 3, б, 4, а, 4, б показано результати моделювання для зразків, що мали більші геометричні розміри порівняно з недеформованим зразком, але після деформації стискання вздовж однієї осі на величину $\varepsilon = -0,10$ і $\varepsilon = -0,05$, відповідно, набувають абсолютно такого самого розміру, як і недеформований зразок і, згідно із даними табл. 3, мають різні значення декременту заломлення δ та коефіцієнта вбирання β . Зі збільшенням величини деформації стискання ширина частково прозорої області біля країв об'єкта стає меншою. На це також вказує і порівняння профілів інтенсивності. Дійсно, якщо порівнювати інтенсивність РВ на екрані вздовж радіального напрямку з азимутальним кутом 0° на віддалі у ± 200 мкм (це — області зображення, близькі до країв об'єктів), то зі збільшенням деформації стискання інтенсивність зменшується, що повністю узгоджується з фактом зростання електронної густини і, відповідно, збільшення коефіцієнта вбирання β . Деформації розтягання (див. рис. 3, г, 3, д, 4, г, 4, д), навпаки, приводять до збільшення інтенсивності РВ, що пройшло через об'єкт біля його країв. Це також відповідає зменшенню електронної густини та коефіцієнта вбирання випромінювання за деформації розтягання (див. табл. 3).

Одержані у ході комп'ютерних експериментів результати показують, що метали та їхні стопи достатньо сильно вбирають РВ. Про це свідчить темний колір зображень і відповідні профілі інтенсивності. Для виявлення ступеня важливості вбирання РВ металами ми провели комп'ютерне моделювання на недеформованому зразку, який показаний на рис. 1, а, з декрементом заломлення $\delta = 2,2204 \cdot 10^{-5}$ і коефіцієнтом вбирання $\beta = 0$, а також здійснили такий самий експеримент для даного об'єкта у випадку, коли б він мав біологічну природу (для біологічних об'єктів $\delta \cong 1 \cdot 10^{-6}$ і $\beta \cong 1 \cdot 10^{-8}$). Результати такого моделювання показано на рис. 5. Вони демонструють, що під час комп'ютерної симуляції взаємодії РВ з металами та їхніми стопами коефіцієнтом вбирання β нехтувати не можна.

Таким чином, моделювання взаємодії РВ з металевими стопами показує, що РВ дійсно можна застосовувати для виявлення механічних деформацій у різних металевих конструкціях.

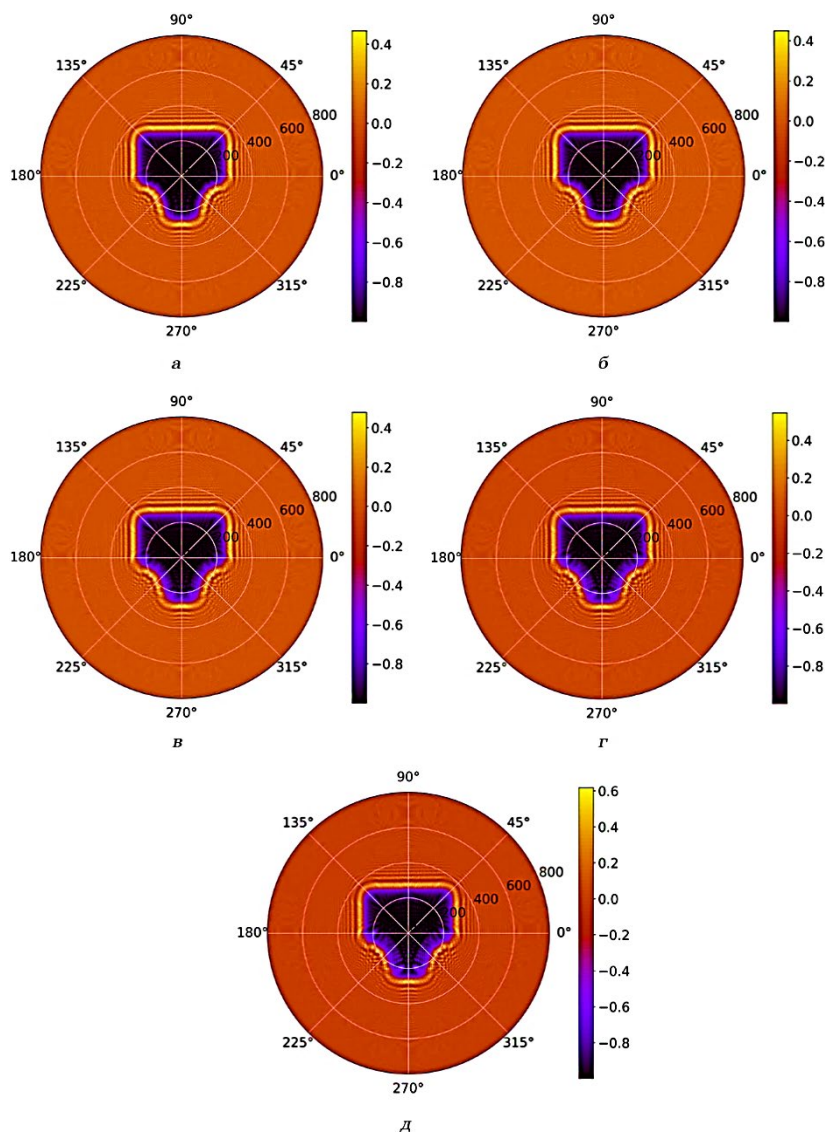


Рис. 3. Рентгенові зображення зразка Fe-1,3%Cu-1%Ni для різних деформацій ε : а) $\varepsilon = -0,10$; б) $\varepsilon = -0,05$; в) $\varepsilon = 0,00$; г) $\varepsilon = 0,05$; д) $\varepsilon = 0,10$.

Fig. 3. X-ray images for the Fe-1.3%Cu-1%Ni sample under different deformations ε : а) $\varepsilon = -0.10$; б) $\varepsilon = -0.05$; в) $\varepsilon = 0.00$; г) $\varepsilon = 0.05$; е) $\varepsilon = 0.10$.

4. ВИСНОВКИ

Використовуючи відомі теоретичні співвідношення та результати моделювання методами молекулярної динаміки, ми запропонували

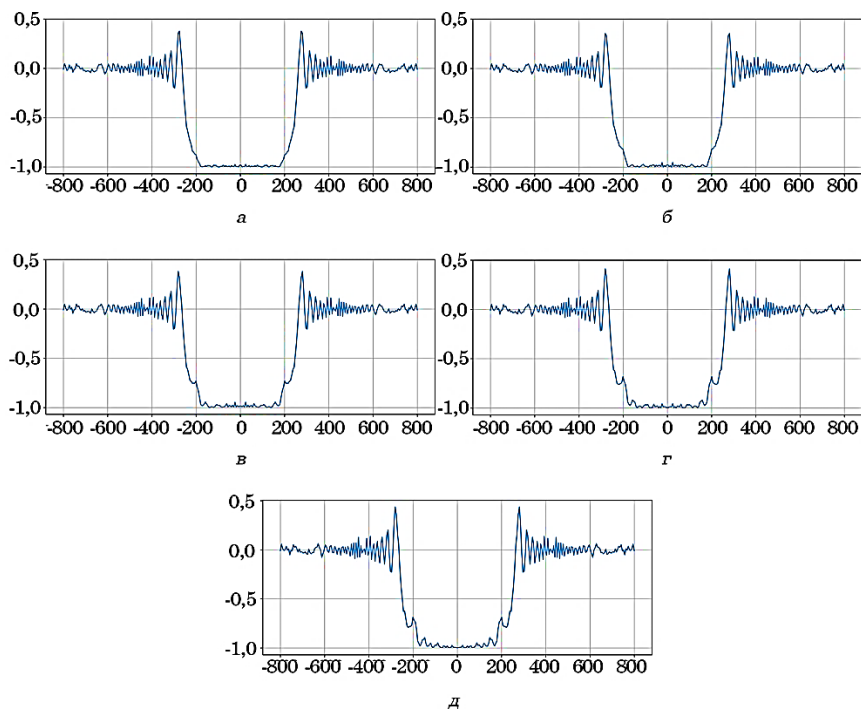


Рис. 4. Профілі інтенсивності вздовж радіального напрямку з азимутальним кутом у 0° для зразка Fe-1,3%Cu-1%Ni за різних деформацій ε : а) $\varepsilon = -0,10$; б) $\varepsilon = -0,05$; в) $\varepsilon = 0,00$; г) $\varepsilon = 0,05$; д) $\varepsilon = 0,10$.

Fig. 4. Intensity profiles along the radial direction with the azimuthal angle 0° for the Fe-1.3%Cu-1%Ni sample under different deformations ε : а) $\varepsilon = -0.10$; б) $\varepsilon = -0.05$; в) $\varepsilon = 0.00$; г) $\varepsilon = 0.05$; е) $\varepsilon = 0.10$.

підхід щодо числових розрахунків декрементів заломлення δ та коефіцієнтів вбирання β РВ для багатокомпонентних металевих стопів з різним процентним складом хемічних елементів і різною величиною деформації.

Подібний підхід можна також застосовувати до будь-яких інших фізичних процесів у кристалічних та аморфних тілах для випадків, коли ці процеси спричиняють зміну електронної густини. Наприклад, це можуть бути фазові переходи, дифузійні процеси, теплове розширення та ін. Тому ці результати мають практичне застосування та можуть бути корисними як для розробників лабораторного обладнання, так і для спеціалістів в галузі матеріалознавства.

Були розроблені програмні коди для проведення комп'ютерного моделювання взаємодії РВ з тривимірними зразками довільної геометричної форми у рамках скалярної теорії Френеля-Кірхгоффа. На прикладі моделей зразків, виготовлених із металевих стопів Fe-

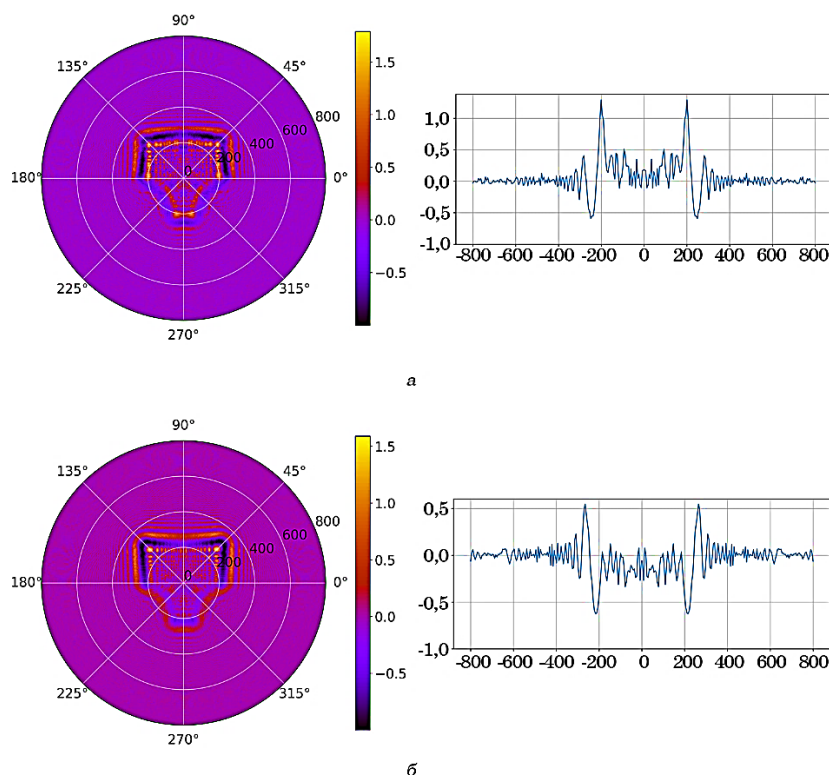


Рис. 5. Рентгенові зображення та профілі інтенсивності вздовж радіального напрямку з азимутальним кутом 0° : а) недеформований зразок із сплаву Fe–1,3%Cu–1%Ni з декрементом заломлення $\delta=2,2204 \cdot 10^{-5}$ і коефіцієнтом вбирання $\beta=0$; б) недеформований зразок з декрементом заломлення $\delta=1 \cdot 10^{-6}$ і коефіцієнтом вбирання $\beta=1 \cdot 10^{-8}$, що по порядку величин відповідає біологічним об'єктам.

Fig. 5. X-ray images and intensity profiles along the radial direction with an azimuthal angle of 0° : а) unstrained sample from the Fe–1.3%Cu–1%Ni alloy with the refractive index $\delta=2.2204 \cdot 10^{-5}$ and the absorption coefficient $\beta=0$; б) unstrained sample with refraction decrement $\delta=1 \cdot 10^{-6}$ and absorption coefficient $\beta=1 \cdot 10^{-8}$, which in order of magnitude corresponds to biological objects.

1,3%Cu–1%Ni за температури у 300 К, проведено комп'ютерну симуляцію дифракції монохроматичного РВ з довжиною хвилі $\lambda = 1,5374 \text{ \AA}$ (лінія CuK_α) на цих зразках. Зразки були піддані деформації стисненням і розтяганням з величинами відносної деформації ε , які становили $-0,10$, $-0,05$, $0,00$, $0,05$ і $0,10$. Наші результати підтвердили високу чутливість РВ до зміни електронної густини матеріялу та показали необхідність обов'язкового врахування вбирання випромінювання під час моделювання взаємодії РВ з металами.

ЦИТОВАНА ЛІТЕРАТУРА—REFERENCES

1. H. Shi, J. Zou, J. Chen, P. Xiao, F. Cao, and S. Liang, *Mater. Res. Express*, **7**, No. 11: 116504 (2020).
2. K. Nakagawa, M. Hayashi, K. Takano-Satoh, H. Matsunaga, H. Mori, K. Maki, Y. Onuki, S. Suzuki, and S. Sato, *Quantum Beam Sci.*, **4**, No. 4: 36 (2020).
3. L. Massimi, S. J. Clark, S. Marussi, A. Doherty, S. M. Shah, J. Schulz, S. Marathe, C. Rau, M. Endrizzi, P. D. Lee, and A. Olivo, *Sci. Rep.*, **12**, No. 1: 12136 (2022).
4. K. Hellbach, E. Beller, A. Schindler, F. Schoeppe, N. Hesse, A. Baumann, R. Schinner, S. Auweter, C. Hauke, M. Radicke, and F. G. Meinel, *Investig. Radiol.*, **53**, No. 6: 352 (2018).
5. S. Muhammad, S. Lee, H. Kim, J. Yoon, D. Jang, J. Yoon, J.-H. Park, and W. S. Yoon, *J. Power Sources*, **285**: 156 (2015).
6. E. R. Wainwright, S. V. Lakshman, A. F. T. Leong, A. H. Kinsey, J. D. Gibbins, S. Q. Arlington, T. Sun, K. Fezzaa, T. C. Hufnagel, and T. P. Weihs, *Combust. Flame*, **199**: 194 (2019).
7. B. L. Henke, E. M. Gullikson, and J. C. Davis, *At. Data Nucl. Data Tables*, **54**, No. 2: 181 (1993).
8. D. Paganin, *Coherent X-Ray Optics* (Oxford University Press: 2013).
9. <https://www.lammmps.org>
10. Z. Liu, Q. Han, Y. Guo, J. Lang, D. Shi, Y. Zhang, Q. Huang, H. Deng, F. Gao, B. Sun, and S. Du, *J. Alloy. Compd.*, **780**: 881 (2019).
11. M. Born and E. Wolf, *Principles of Optics* (Cambridge University Press: 1999).
12. A. Olivo and E. Castelli, *Riv. Nuovo Cim.*, **37**, No. 9: 467 (2014).

PACS numbers: 46.55.+d, 61.72.Dd, 61.72.Ff, 62.20.Qp, 81.70.Bt, 81.70.Jb

Анізотропія мікроструктури та мікротвердості стопу AlSi10Mg, виготовленого селективним лазерним топленням

А. П. Бурмак*, С. М. Волошко*, С. І. Сидоренко*, І. А. Владимирський*,
М. М. Ворон**, Б. М. Мордюк***, М. О. Васильєв***

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

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

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

В роботі досліджено ефект анізотропії структури та мікротвердості для алюмінійового стопу AlSi10Mg, виготовленого селективним лазерним топленням порошку. Мікроструктура стопу AlSi10Mg складається з твердого розчину Алюмінію та потрібної евтектики (Al + Si + Mg₂Si). Орієнтаційні залежності мікротвердості вимірювалися у трьох напрямках, і за середнім значенням (1,425 ГПа) мікротвердість в цілому задовільно узгоджу-

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

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

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

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

Citation: A. P. Burmak, S. M. Voloshko, S. I. Sidorenko, I. A. Vladymyrskyi, M. M. Voron, B. M. Mordyuk, and M. O. Vasylyev, Anisotropy of the Microstructure and Microhardness of the AlSi10Mg Alloy Fabricated by Selective Laser Melting, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, 47, No. 5: 473–491 (2025). DOI: [10.15407/mfint.47.05.0473](https://doi.org/10.15407/mfint.47.05.0473)

© Publisher PH “Akadempriodyka” of the NAS of Ukraine, 2025. This is an open access article under the CC BY-ND license (<https://creativecommons.org/licenses/by-nd/4.0>)

ється з тією, що є характерною для ливарного стопу AlSi10Mg, а розкид даних не перевищує $\approx 10\text{--}15\%$. Залишкові макронапруження стиску відрізняються в 1,4 рази для горизонтальної та вертикальної площин зразка у вигляді паралелепіпеду розмірами $20\times 10\times 5$ мм. Проаналізовано характер евтектичних виділень і розташування зміцнювальних частинок в об'ємі, по краях зразка та в області, що контактує з платформою побудови.

Ключові слова: алюмінієвий стоп AlSi10Mg, селективне лазерне топлення, напруження, структурно-фазовий склад, механічні властивості.

This study investigates the effect of anisotropy on the structure and microhardness of the AlSi10Mg aluminium alloy fabricated by selective laser melting of powder. The microstructure of the AlSi10Mg alloy consists of a solid solution of aluminium and a ternary eutectic (Al + Si + Mg_2Si). Orientation dependences of microhardness are measured in three directions, and the average value (1.425 GPa) of microhardness generally agrees satisfactorily with that characteristic of the cast AlSi10Mg alloy, with data scatter not exceeding $\approx 10\text{--}15\%$. Residual compressive macrostresses differ by a factor of 1.4 for the horizontal and vertical planes of a sample with the shape of a parallelepiped with dimensions of $20\times 10\times 5$ mm. The nature of eutectic precipitates and the arrangement of strengthening particles are analysed within the volume, at the edges of the sample, and in the area contacted with the building platform.

Key words: AlSi10Mg aluminium alloy, selective laser melting, stresses, structural-phase composition, mechanical properties.

(Отримано 25 липня 2024 р.; остаточн. варіант — 1 серпня 2024 р.)

1. ВСТУП

Неспинний розвиток адитивного виробництва (АВ) металевих деталей пояснюється зростаючою ефективністю технологічних процесів і збільшенням рівня якості виробів, що безпосередньо впливає на поліпшення їхніх механічних характеристик. АВ уможливорює оптимізувати виробництво, зменшити енерговитрати та забезпечити більш просте одержання деталей складних форм і невеликих розмірів. Довгий час такий підхід вважався виправданим переважно для стопів, які мають високу вартість, таких як титанові, нікелеві жароміцні стопи та медичні стопи кобальту з Хромом [1–4].

Тим не менш, застосування для одержання тривимірних друківаних деталей значно більш дешевих алюмінієвих стопів постійно розширюється. В порівнянні з класичним литтям під тиском АВ з таких стопів дрібних серійних деталей, у тому числі складної конфігурації, в більшості випадків є більш вигідним і доцільним [5, 6].

Зменшення вартості та підвищення ефективності АВ-процесів сприяло розширенню сфер їхнього практичного застосування щодо широкого впровадження в авіакосмічній промисловості й автомобілебудуванні. Оскільки для цих галузей важливе значення має

зменшення маси деталей, машин і механізмів, спектер адитивно виготовлених компонентів з алюмінієвих стопів стрімко зростає [7].

Найбільш поширеними промисловими алюмінієвими стопами як для класичного, так і для сучасного АВ є AlSi12 , AlSi7Mg та AlSi10Mg . Достатній рівень питомої міцності, висока рідкоплинність за невисокої температури топлення, мала усадка та низький коефіцієнт термічного розширення, простота та дешевизна виробництва є основними технологічними перевагами зазначених матеріалів [8]. Стоп Al10SiMg є найбільш широко вивченим серед алюмінієвих стопів, що використовуються в АВ [8–10]. Як і для інших доєвтектичних силумінів, для нього характерною є структура, що складається з твердого розчину на основі алюмінію, евтектичного кремнію та вторинних фаз Mg_2Si . Найвищий рівень механічних властивостей такого стопу пов'язаний головним чином з досягненням мінімальних розмірів частинок евтектичного кремнію, що можливе за умов надшвидкої кристалізації, яка є характерною для АВ і може складати $10^6^\circ\text{C}/\text{с}$. В процесах лиття та лиття під тиском цей показник є меншим на 3–5 порядків величини відповідно.

Використання селективного лазерного топлення (СЛТ) порошку, як однієї найбільш ефективної технології АВ-друку металом, для деталей із вказаного стопу позначається досягненням високих показників міцності, але зазвичай також високою дефектністю, яка збільшує крихкість і погіршує їхню оброблюваність [11]. Крім таких очевидних чинників впливу на механічні та технологічні характеристики, варто відзначити формування високодисперсної структури та перенасичення твердого розчину на основі алюмінію. Розміри зерен при цьому можуть сягати 3–10 мкм з переважанням витягнутої овальної чи то стовпчастої форми. З одного боку, дисперсність структури має розглядатися як позитивний чинник для досягнення високих механічних та експлуатаційних характеристик стопу AlSi10Mg , але напруження в структурі, її перенасиченість Силіцієм і загальна анізотропія вимагають додаткового термічного оброблення тривимірних виробів [12–15].

Незважаючи на численні дослідження виготовлених методами АВ стопів AlSi7Mg та AlSi10Mg , залишається багато спірних питань, пов'язаних з його структуро- та фазоутворенням залежно від методу друку та його режимів [16–18]. Так, в деяких дослідженнях вказано, що після друку фаза Mg_2Si присутня у вихідних зразках [19], а в інших зазначається, що вона виділяється тільки після наступного термічного оброблення [20]. Крім цього, тільки у деяких дослідженнях враховується наявність у складі стопів Феруму та Мангану, які можуть сприяти утворенню залізовмісних фаз Al_5FeSi , $\text{Al}_{15}(\text{FeMn})_3\text{Si}_2$ й $\text{Al}_8\text{Si}_6\text{Mg}_3\text{Fe}$ [12].

Але питання анізотропії структури та властивостей АВ-виробів досі залишається ключовим [21, 22]. В роботі [23] показано можли-

вість експрес-оцінки розподілу механічних властивостей зразка Ti-6Al-4V, друкованого за адитивною технологією «xV3DMP», на основі виміряних величин мікротвердості у його різних перерізах (у напрямках вирощування та сканування). Неоднорідність механічних властивостей за товщиною надрукованих блоків у різних напрямках склала приблизно 11%.

Вимірювання твердості або мікротвердості за Віккерсом дають змогу встановити фізико-хімічні закономірності впливу режимів АВ, розмірів тривимірних зразків, а також їхньої мікроструктури на механічні властивості у вихідному стані. Деяке збільшення мікротвердості поблизу підкладинки автори цієї роботи пояснюють формуванням у процесі друку методом «xV3DMP» «зони термічного впливу», в якій завдяки перекристалізації металу утворюються рівновісні зерна α - та β -фаз меншого розміру.

Визначення мікротвердості є найпростішою, швидкою й надчутливою методом тестування механічних характеристик матеріалу, що не супроводжується його руйнуванням: сучасне стандартне обладнання дає змогу змінювати навантаження від 10 г до 1000 г, перетворювати шкалу твердості (Віккерсову–Кнупову–Бринеллеву–Роквеллеву), автоматично обчислювати низку механічних характеристик, має функцію автоматичної турелі тощо.

Спираючись на велику кількість наявних даних для литих зразків, за допомогою вимірювання мікротвердості можна проаналізувати анізотропію механічних властивостей стопу Al10SiMg внаслідок режимів промислового АВ-типу СЛТ та встановити взаємозалежність із кристалізованими структурно-фазовими станами, що і є метою даної роботи.

2. МЕТОДИКА ЕКСПЕРИМЕНТУ

Зразки стопу AlSi10Mg (табл. 1) у вигляді паралелепіпеду розмірами 20×10×5 мм і густиною у 2,66 г/см³ одержано за технологією СЛТ на АВ-принтері Alfa-150D (ТОВ «Адитивні лазерні технології України»). Принципову схему друку та технічні характеристики

ТАБЛИЦЯ 1. Хімічний склад зразків стопу AlSi10Mg, одержаних за технологією СЛТ.

TABLE 1. Chemical composition of AlSi10Mg-alloy samples obtained by SLM technology.

Вміст, % ваг.				
Al	Si	Mn	Mg	Fe
88,009 ± 0,167	10,505 ± 0,132	0,458 ± 0,128	0,518 ± 0,128	0,510 ± 0,009

використаного принтера наведено в [24]. Як вихідний матеріал, використовувався сферичний порошок стопу AlSi10Mg з розмірами частинок у діапазоні 20–63 мкм. Пристрій Alfa-150D з розміром робочого поля 150×150×180 мм був оснащений волоконним ітербійовим лазером з повітряним охолодженням і номінальною потужністю у 200 Вт, діаметром лазерного променя у $\cong 45$ мкм, довжиною хвилі у 1070 ± 2 нм. Параметри, використані для виготовлення зразків: швидкість сканування — 500 мм/с, товщина шару — 25 мкм, відстань штрихування — 150 мкм. Для запобігання окисненню виготовлення зразків проводилося в інертному середовищі Ar [25].

Хемічний склад визначено методом рентгенофлюоресцентної аналізи (табл. 1).

Вимірювання мікротвердості поверхні за різними напрямками (рис. 1) проводилося за Віккерсовою метою з використанням приладу LHSV-1000Z із навантаженням у 100 г. Для зменшення похибки середнє значення мікротвердості визначалося за щонайменше сімома вимірами в певній площині.

Дослідження мікроструктури проведено за допомогою металографічного тринокулярного мікроскопу iScope IS.1053-PLMi зі збільшенням $\times 50$, $\times 100$, $\times 200$ та $\times 500$. Для цього поліровані зразки стопу AlSi10Mg проявляли Келлеровим щавником-реагентом — водним розчином 0,5% HF, 2,5% HNO₃, 1,5 % HCl [26].

Для рентгеноструктурних досліджень використано дифрактометр Rigaku Ultima IV (випромінення з $\lambda_{\text{Cu}} = 0,154147$ нм): інтервал кутів — $2\Theta = 20^\circ$ – 120° , крок реєстрації — $0,04^\circ$, час витримки в точці — 2 с. Для аналізу одержаних рентгенівських спектрів, розрахунку розміру областей когерентного розсіяння (ОКР), ступеня деформації

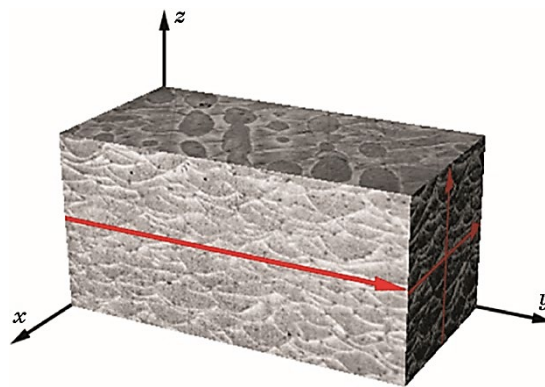


Рис. 1. Схема зразка та напрямки мірювання мікротвердості (показано червоними стрілками).

Fig. 1. Sample scheme and directions of microhardness measurement (shown by red arrows).

кристалічної ґратниці (ϵ) та кількісної фазової аналізи використано програмне забезпечення PDXL, міжнародну базу даних дифракції ICDD (PDF-2 (2024)) та відкриту базу кристалографічних даних COD.

Визначення величини напружень першого роду проведено методом $\sin^2\psi$ за методою side-inclination. Для згладжування профілів дифракційних максимумів використовувалася функція Savitzky–Golay, а для відокремлення фону — функція Sonneveld–Visser. Визначення кутового положення дифракційних максимумів проводилося на основі значень положення центру ваги. Величину залишкових макроскопічних напружень в алюмінії проведено за зміною кутового положення дифракційного максимуму (420) для значень кутів $\psi = 0^\circ, -10^\circ, -20^\circ, -30^\circ, -40^\circ$. Обробку одержаних спектрів проведено з використанням програмного забезпечення Rigaku Residual Stress Analysis.

3. РЕЗУЛЬТАТИ ТА ЇХ ОБГОВОРЕННЯ

На рисунках 2, 3 представлено морфологію поверхні зразка стопу AlSi10Mg, одержаного за технологією СЛТ. На горизонтальній поверхні (площина xOy) (рис. 2, а, в, д, рис. 3, ж) і на бічній грані (площина yOz) (рис. 2, б, г, е, рис. 3, з) спостерігається типова для СЛТ неоднорідна мікроструктура з окремими сегментами [27]. У площині yOz сформовано мережу зварювальних ванн напівкруглої форми, які перекриваються. Спостережувана хвиляста морфологія за типом «риб'ячої луски» (fish-scale) пов'язана із послідовним твердінням крапельних басейнів розтопу, що виникають під час процесу лазерного розтоплення порошку. На відміну від цього, у площині yOz формуються ванни розтопу циліндричної форми, що зумовлено процесом сканування лазерного променя поверхнею шару порошку.

В мікроструктурі стопу AlSi10Mg наявні в основному безперервні треки, спостерігаються пори неправильної форми (кристалізаційного походження) та сферичні (газові) пори (рис. 2, а, б), розмір яких не перевищує критичного (≥ 10 мкм). В об'ємі треків спостерігається дендритна стовпчаста структура, витягнута у напрямку, зворотньому щодо тепловідводу (рис. 3, а), а на межах стику сусідніх треків — зона стовпчастих кристалів з більш грубою морфологією, які утворилися в результаті різних умов охолодження (рис. 3, б, г). Загальний вигляд одиночного треку розтопу вздовж і поперек напрямку сканування показано на рис. 3, д, е.

Для вимірювань мікротвердості стопу AlSi10Mg виконано попередні оцінки оптимального рівня навантаження в інтервалі 10–300 г (рис. 4). Для цього обиралися сегменти з однорідною мікроструктурою (вставка на рис. 4). Видно, що мікротвердість із збільшенням навантаження на індентор монотонно зменшується. На підставі одержаних результатів зроблено висновок, що навантаження

у 100 г на діамантовий індентор є найбільш прийнятним для вимірювання мікротвердості досліджуваних зразків стопу AlSi10Mg .

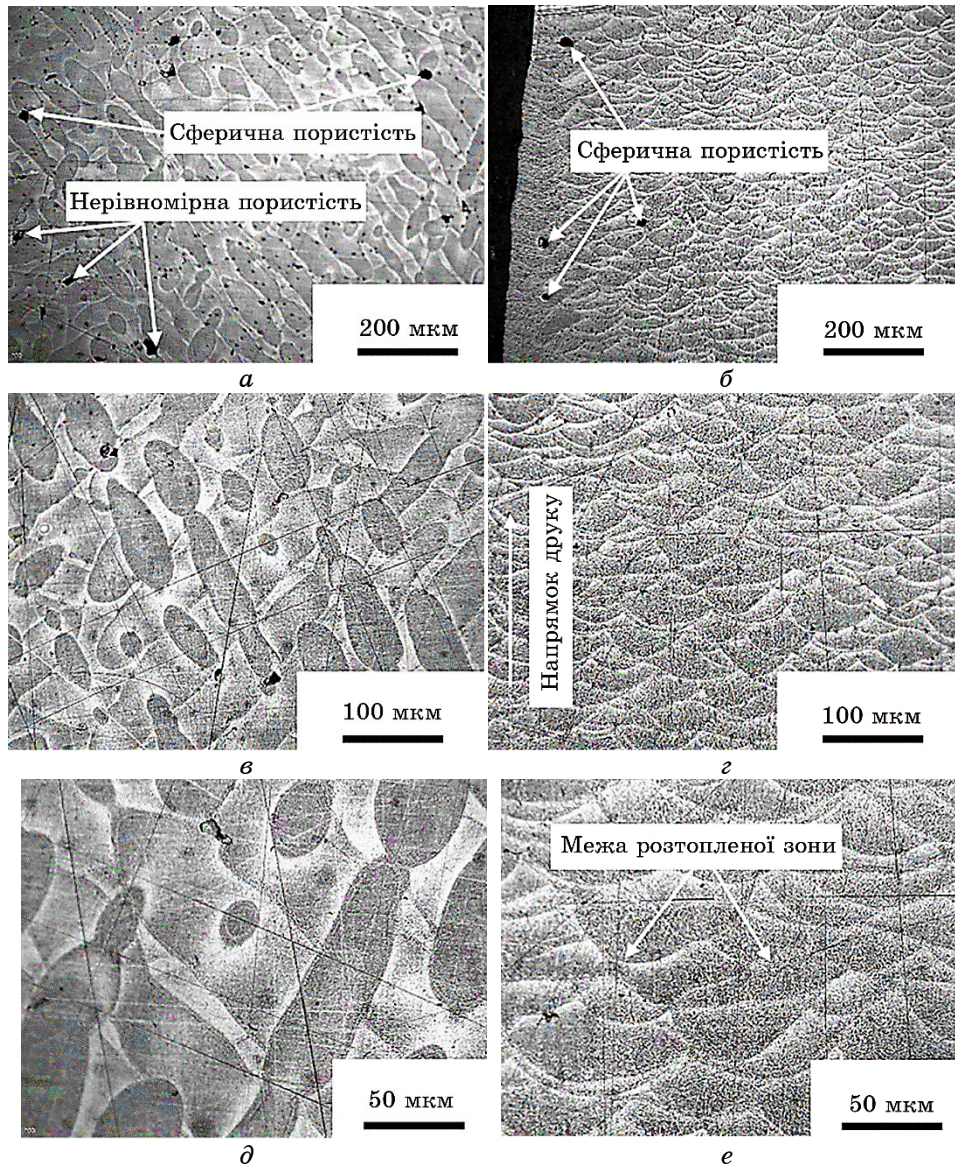


Рис. 2. Морфологія поверхні стопу AlSi10Mg , одержаного СЛТ: площина xOy (а, в, д), площина yOz (б, з, е).

Fig. 2. The surface morphology of the AlSi10Mg alloy obtained by SLM: xOy plane (a, в, д), yOz plane (б, з, е).

Орієнтаційні залежності зміни мікротвердості друкованого сто-

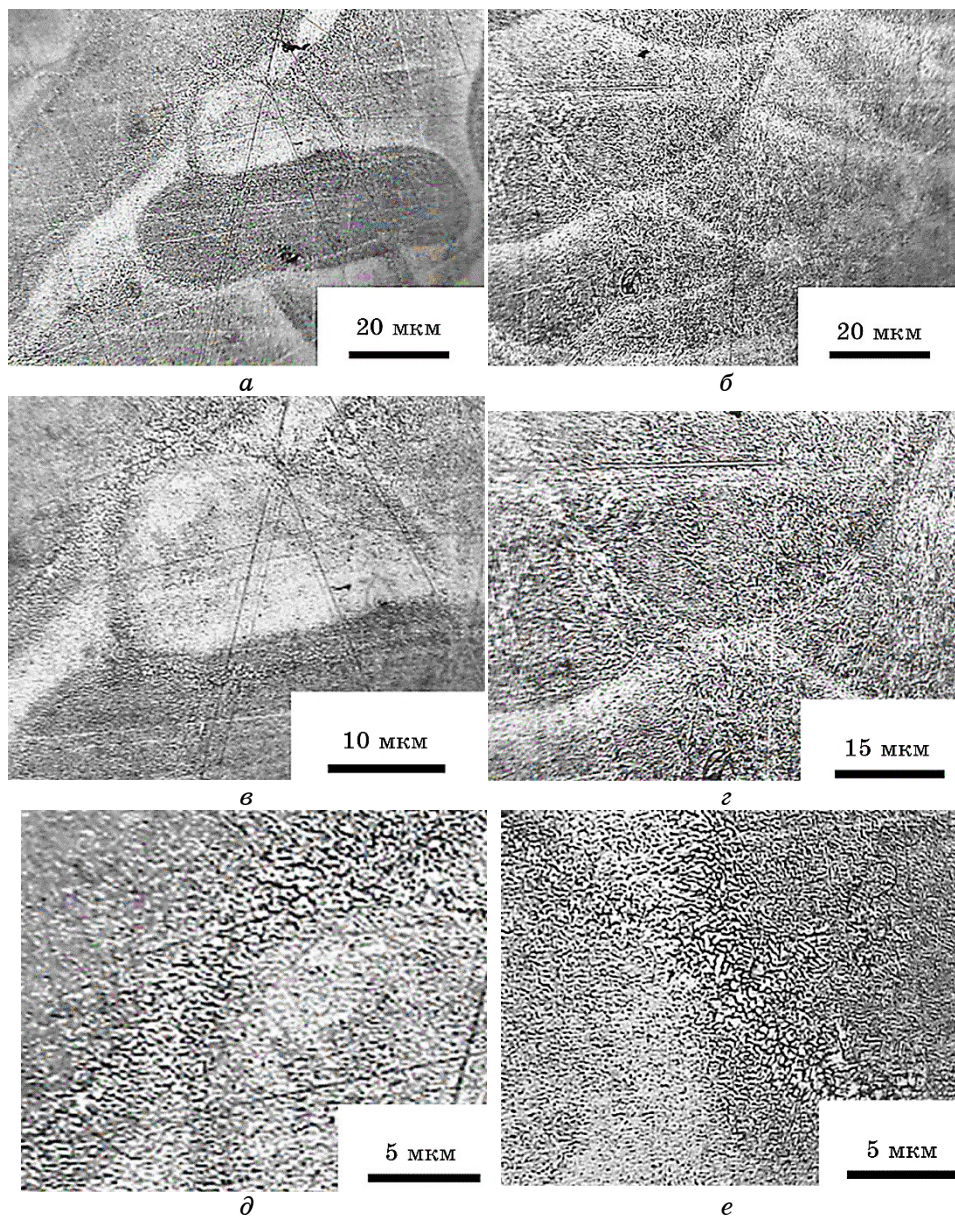


Рис. 3. Морфологія поверхні сплаву AlSi10Mg, одержаного СЛТ: площина xOy (а, в, д), площина yOz (б, г, е).

Fig. 3. The surface morphology of the AlSi10Mg alloy obtained by SLM: xOy plane (a, в, д), yOz plane (б, г, е).

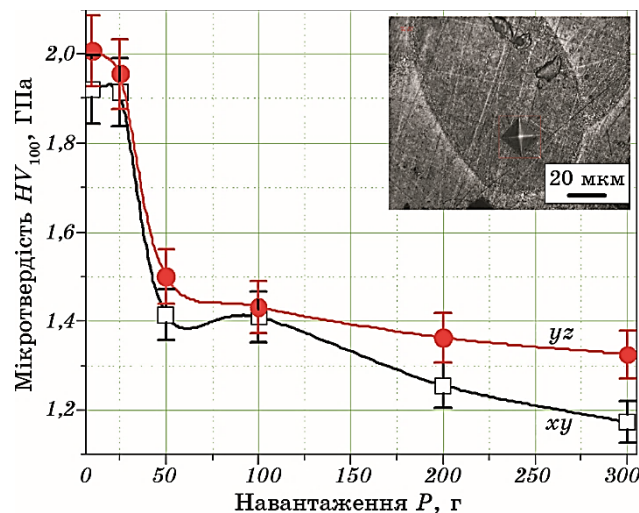


Рис. 4. Залежність мікротвердості сплаву AlSi10Mg від навантаження на індентор.

Fig. 4. The dependence of the microhardness of the AlSi10Mg alloy on the load applied to the indenter.

пу AlSi10Mg виміряно на зразку, розрізаному навпіл вздовж вертикальної осі Oz , а також розрізаному навпіл вздовж горизонтальної осі Oy . Вимірювання проведено на полірованих і процавлених поверхнях із обраним навантаженням у 100 г. Мікротвердість вимірювали з кроком у 50 мкм вздовж осей Ox та Oz , а також з кроком у 100–150 мкм вздовж горизонтальної осі Oy .

В площині zOx спостерігаються значні зміни мікротвердості (рис. 5). По краях зразка мікротвердість має мінімальні значення $\cong 1,18$ ГПа, а в центрі — максимальне значення $\cong 1,45$ ГПа.

Немонотонний характер зміни мікротвердості в поперечному перерізі пов'язаний з одночасною дією низки чинників, що створюють неоднорідні температурне та силове поля, які викликають відмінності в умовах формування структури. На відповідних зображеннях спостерігається яскраво виражена відмінність мікроструктури в крайніх областях порівняно із центральною частиною.

Результати вимірювання мікротвердості за перерізом в перпендикулярному напрямку до попереднього випадку, тобто вздовж напрямку побудови, представлено на рис. 6. Спостерігається незначний розкид значень мікротвердості в межах від 1,27 ГПа до 1,38 ГПа. У процесі СЛТ із збільшенням товщини виробу градієнт температур у його приповерхневій області зменшується. Вищий градієнт температур у нижніх шарах приводить до збільшення дисперсності структури, пересичення твердого розчину Si та, ймовірно,

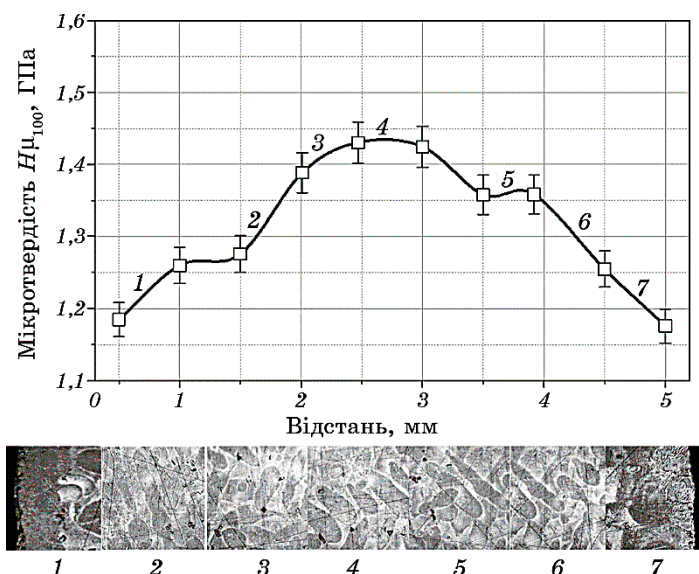


Рис. 5. Розподіл мікротвердості (а) за шириною перерізу зразка AlSi10Mg на висоті у 5 мм від поверхні та відповідна мікроструктура (б) (площина zOx).

Fig. 5. Distribution of microhardness (a) across the width of the AlSi10Mg sample cross-section at a height of 5 mm from the surface and the corresponding microstructure (b) (zOx plane).

но, вищих значень залишкових напружень і мікротвердості. Тобто умови формування першого й останнього шару матеріалу істотно відрізняються. Деяке збільшення мікротвердості поблизу підкладки пояснюється формуванням у процесі друку «зони термічного впливу», в якій завдяки перекристалізації металу утворюються комірки меншого розміру (області 2, 3). Можна виділити наступні характерні області з різним розміром комірок: перехідна зона 1, дрібнокоміркові смугасті 2, 3, крупнокомірчасті зони 4–6 і приповерхнева 7. Основною причиною зміни розміру осередків є термічна історія кожного з цих регіонів. Найбільш щільна смугаста структура забезпечує вищу мікротвердість.

За вимірювання мікротвердості в площині xOy спостерігається незначний розкид значень в межах від 1,33 ГПа до 1,55 ГПа (рис. 7).

Мінімальні значення мікротвердості знову спостерігаються в крайніх точках. Циклічний характер зміни мікротвердості в цьому випадку пов'язаний із зазначеними вище особливостями мікроструктури, а також, можливо, з нерівномірним розподілом Si та збільшенням густини дислокацій в окремих зонах із скупченнями зміцнювальних виділень.

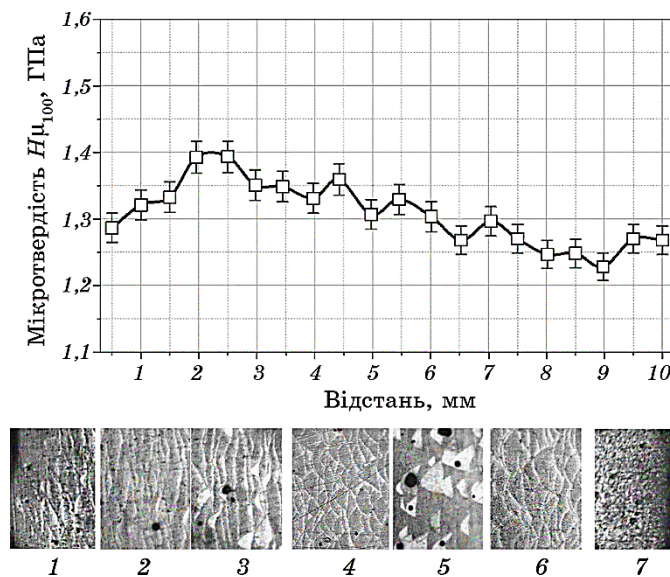


Рис. 6. Розподіл мікротвердості (а) за висотою перерізу зразка AlSi10Mg і відповідна мікроструктура (б) (площина zOx).

Fig. 6. Distribution of microhardness (a) along the height of the AlSi10Mg sample cross-section and the corresponding microstructure (b) (zOx plane).

Для більш детального дослідження морфології та розміру евтектики Si, як основної мікроструктурної складової стопу, та дрібнодисперсних включень застосовано растрову електронну мікроскопію з енергодисперсійною аналізою.

На рисунках 8–10 наведено мікроструктуру поверхні зразка стопу AlSi10Mg , одержаного завдяки СЛТ, та відповідні EDX-мапи Al, Si та Mg в ділянках з різною мікротвердістю.

На рисунку 8 представлено мікроструктуру стопу AlSi10Mg в областях з меншими значеннями мікротвердості по краях зразка; вона складається з твердого розчину алюмінію, розділеного уривчастими межами потрійної евтектики ($\text{Al} + \text{Si} + \text{Mg}_2\text{Si}$), збагаченої на Si, що зазвичай є характерним і для ливарних алюмінієвих стопів. Комірчасто-дендритна кристалізація зумовлює появу дрібних рівновісних зерен у ядрі ванни розтопу, але подовжених зерен на межах комірок з напівсуцільними виділеннями Si-волокна. Крім того, окремі частинки Si спостерігаються також всередині комірок $\alpha\text{-Al}$, які виділилися в процесі швидкої кристалізації твердого розчину. В той час як дрібнодисперсні включення, що містять Магній, ймовірно, β' -фази, близької за складом до Mg_2Si , розташовуються тільки в межах евтектики. Частинки Si та Mg на межах мають випадкову орієнтацію.

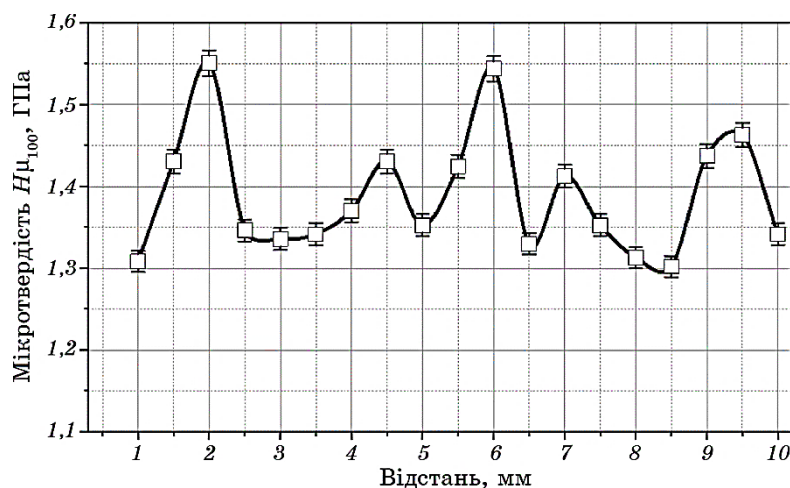


Рис. 7. Розподіл мікротвердості в площині xOy на половині висоти подовжнього перерізу зразка стопу AlSi10Mg.

Fig. 7. Distribution of microhardness in the xOy plane at the half-height of the longitudinal cross-section of the AlSi10Mg alloy sample.

В областях із високою мікротвердістю в центральній частині зразка (рис. 9) дрібнодисперсні включення, що містять Mg, розташовуються як в евтектиці, так і між дендритами другого порядку фази α -Al. Частинок Si, які знаходяться в матриці Al, стає значно більше порівняно з попереднім випадком, так само як і Mg. Вміст Mg на частинках Si вищий, ніж у матриці Al, оскільки Mg реагує з Si з формуванням фази Mg_2Si , яка забезпечує зміцнення литих стопів Al-Si-Mg. Саме тому Mg сегрегує та локалізується уздовж евтектичних стінок. Коефіцієнт дифузії Mg вищий, ніж у Si, а концентрація менше (0,4–0,5% мас.); отже, весь Mg дифундує до збагаченої Si евтектичної мережі, яка розширюється до 200 нм, стає більш суцільною та практично безпервною.

І нарешті, в області біля підкладинки спостерігається мікроструктура, для якої характерна потовщена евтектична сітка з безпервними ланцюжками фази Si вздовж меж осередків (рис. 10). Відомо, що комірчасто-дендритна структура стопів системи Al-Si змінюється залежно від вмісту Si, а межі комірок, декоровані виділеннями Si, потовщуються зі збільшенням вмісту Si понад 12% (за масою) [28]. В даному разі ширина евтектичної сітки збільшується до ≈ 500 –600 нм. Вищий градієнт температур у нижніх шарах приводить до збільшення дисперсності структури та пересичення твердого розчину Силіцієм, що і забезпечує вищі значення твердості.

У рівноважному стані бінарної системи Al-Si максимальна розчинність Si в α -Al становить 1,65% за 577°C. Однак у процесі СЛТ

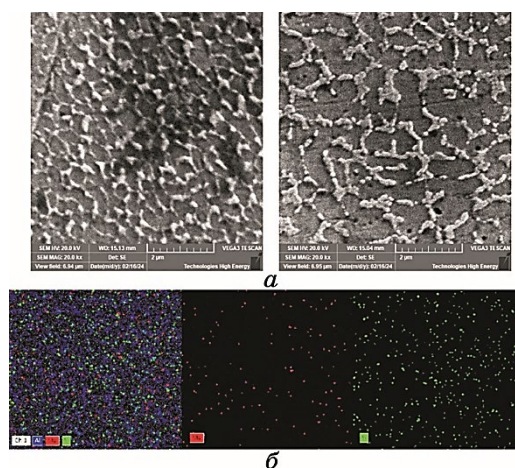


Рис. 8. Мікроструктура (а) та мапи розподілу хемічних елементів (б) на периферії зразка стопу AlSi10Mg , одержаного селективним лазерним топленням порошку.

Fig. 8. Microstructure (a) and elemental distribution maps (b) at the periphery of the AlSi10Mg alloy sample obtained by selective laser melting of powder.

швидкості охолодження перебувають у діапазоні 10^6 – 10^8 °C/с, що далеко від рівноважного стану.

Таким чином, максимальна розчинність Si α -Al збільшується за

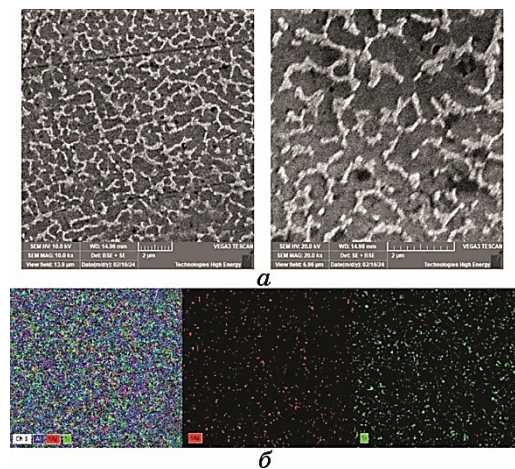


Рис. 9. Мікроструктура (а) та мапи розподілу хемічних елементів (б) у центральній частині зразка стопу AlSi10Mg , одержаного СЛТ.

Fig. 9. Microstructure (a) and elemental distribution maps (b) in the central part of the AlSi10Mg alloy sample obtained by SLM.

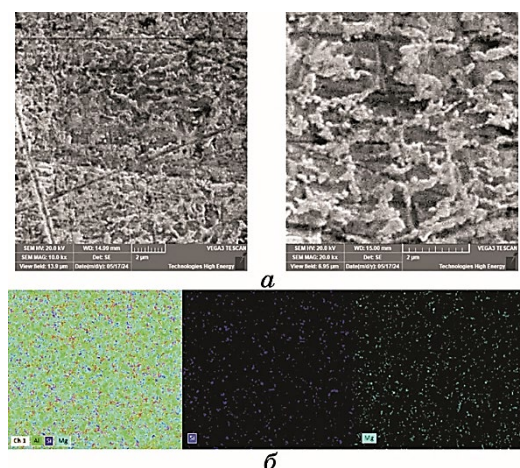


Рис. 10. Мікроструктура (а) та мапи розподілу хемічних елементів (б) для зразка стопу AlSi10Mg в області біля підкладки (платформи побудови).

Fig. 10. Microstructure (а) and elemental distribution maps (б) for the AlSi10Mg alloy sample in the region near the substrate (building platform).

даними [29] до 8% мас., що створює пересичену структуру. Аналогічна кількість Si спостерігається в нашому випадку на периферії зразка, тоді як в центральній частині збільшується до 12,72%, а біля підкладки — до 13,71%.

На рисунку 11 наведено результати рентгенівської дифракції для зразка стопу AlSi10Mg, одержаного за технологією СЛТ, для площини xOy (горизонтальна площина) та yOz (вертикальна площина). На дифрактограмах спостерігаються дифракційні максимуми від алюмінієвої матриці, Si та включень від зміцнювальної фази Mg_2Si .

Розраховані значення періодів кристалічної ґратниці, розміру областей когерентного розсіяння (ОКР), ступеня деформації кристалічної ґратниці (ϵ) алюмінію, кремнію і включень зміцнювальної фази Mg_2Si та кількісний фазовий склад в площинах xOy й yOz відрізняються в межах похибки вимірювань.

Величини напружень першого роду σ_R , визначені за зміною кутового положення дифракційного максимуму алюмінію (420) методом $\sin^2\psi$ (рис. 12), для площин xOy й yOz істотно відрізняються, хоча вони і є стискальними в обох випадках (табл. 2). Значення σ_R у площині xOy (–237 МПа) є в $\approx 1,4$ рази більшим, ніж у площині yOz (–176 МПа).

Кількість Si ($\approx 12\%$), розрахована за рентгенівськими даними (табл. 2), добре узгоджується з результатами енергодисперсійної аналізи (табл. 3).

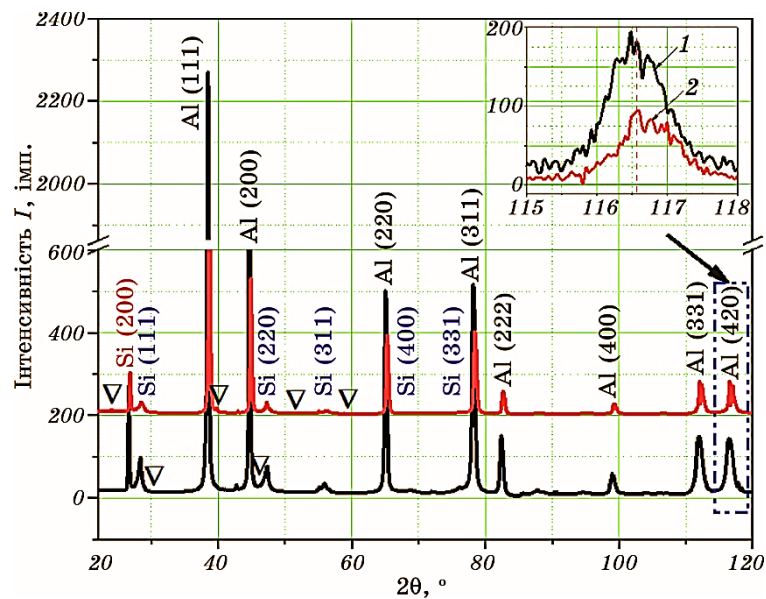


Рис. 11. Дифрактограми зразка сплаву AlSi10Mg, одержаного селективним лазерним топленням: 1 — площина xOy , 2 — площина yOz (на вкладні показано зсув дифракційного максимуму (420) алюмінію для різних площин) (▼ — рефлекси від фази Mg_2Si).

Fig. 11. XRD patterns of the AlSi10Mg alloy sample obtained by selective laser melting: 1— xOy plane, 2— yOz plane (the inset shows the shift of the aluminium diffraction peak (420) for different planes) (▼—reflections from the Mg_2Si phase).

4. ВИСНОВКИ

Аналіза анізотропії мікроструктури сплаву AlSi10Mg, адитивно виготовленого методом СЛТ, показала такі особливості: на горизонтальній поверхні (площина yOz) формуються доріжки розтопу напівциліндричної форми, що зумовлюється процесом сканування лазерного променя поверхні шару порошку; у площині xOy спостерігається мережа басейнів розтопу, які послідовно кристалізуються в процесі друку.

У надрукованому стопі формується комірчасто-дендритна мікроструктура з безперервними ланцюжками фази Si вздовж меж комірок твердого розчину, які потовщуються від периферії до центру та стають безперервними зі збільшенням вмісту Si понад 12%, тоді як ливарні стопи мають грубу дендритну мікроструктуру з нерівномірним розподілом фази Si у вигляді лусочок. Найбільш ущільнена комірчаста структура з максимальною кількістю Si фіксується біля підкладки, з якої починається процес нарощування шарів у про-

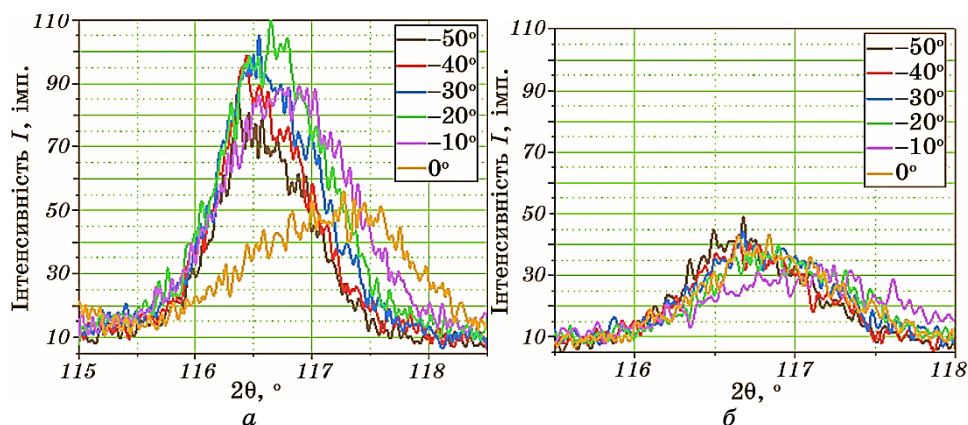


Рис. 12. Зміщення дифракційного максимуму Al (420) в стопі AlSi10Mg, одержаного селективним лазерним топленням, з визначенням залишкових макроскопічних напружень за методом $\sin^2\psi$: площина xOy (а), площина yOz (б).

Fig. 12. Shift of the Al diffraction peak (420) in the AlSi10Mg alloy obtained by selective laser melting, when determining residual macrostresses using the $\sin^2\psi$ method: xOy plane (a), yOz plane (b).

цесі друку зразка.

Проведені оцінки в цілому засвідчують відповідність мікротвердості різних площин друкованого зразка тим, що характерні для ливарного стопу AlSi10Mg. Зміцнення стопу забезпечується евтектичними виділеннями, декорованими частинками Mg_2Si . Розкид даних стосовно мікротвердості за різними напрямками не перевищує $\approx 10\text{--}15\%$; середнє значення мікротвердості за навантаження у 100 г становить 1,425 ГПа.

Залишкові макронапруження стиснення залежать від напрямку СЛТ-друку, форми й розмірів зразка та відрізняються в 1,4 рази для випадку паралелепіпеда. Для площини з хвилястою морфологією за

ТАБЛИЦЯ 2. Результати рентгеноструктурної аналізи.

TABLE 2. Results of x-ray diffraction analysis.

Напруження σ_R , МПа (площина xOy)	Фаза	ε , %	a , нм	Кількісний фазовий склад, %	Напруження σ_R , МПа (площина yOz)
-237	Al	0,17	0,40536	86	-176
	Si	0,1	0,54430	12	
	Mg_2Si	0	0,64254	2	

ТАБЛИЦЯ 3. Хемічний склад в різних областях зразка за даними енерго-дисперсійної аналізи.**TABLE 3.** Chemical composition in different areas of the sample according to energy-dispersive x-ray spectroscopy (EDS) data.

Елемент	Al	Si	Mg + Mn
Центер	85,92	12,72	1,36
Периферія	91,69	7,53	0,78
Підкладинка	84,98	13,71	1,32

типом «риб'ячої луски» значення σ_R є меншими, що потрібно враховувати у разі подальшого механічного оброблення.

Одержані результати підтверджують необхідність проведення додаткового відпалу надрукованих зразків для усунення анізотропії мікроструктури та механічних властивостей стопу AlSi10Mg, чому буде присвячено наступну роботу.

Роботу виконано в рамках д/б-теми № 2701ф Національного технічного університету України «Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського» «Наукові основи ультразвукової ударної та адитивної технологій виготовлення високонавантажених деталей БПЛА з покращеною дальністю» (№ д/р 0124U001001).

ЦИТОВАНА ЛІТЕРАТУРА

1. M. O. Vasylyev, B. M. Mordyuk, and S. M. Voloshko, *Успіхи фізики металів*, **24**, № 1: 5 (2023).
2. M. O. Vasylyev, B. M. Mordyuk, and S. M. Voloshko, *Успіхи фізики металів*, **24**, № 1: 38 (2023).
3. M. O. Vasylyev, B. M. Mordyuk, S. M. Voloshko, and P. O. Gurin, *Успіхи фізики металів*, **23**, № 2: 337 (2022).
4. С. В. Аджамський, Г. А. Кононенко, Р. В. Подольський, *Металофіз. новітні технол.*, **43**, № 7: 909 (2021).
5. A. Pola, L. Girelli, M. Tocci, and M. Gelfi, *Mater. Sci. Eng. A*, **739**: 317 (2018).
6. C. Linder, F. Vucko, T. Ma, S. Proper, and E. Dartfeldt, *Mater.*, **16**, Iss. 17: 5964 (2023).
7. A. Hosseini, Y. S. Narayanan, and N. Nguyen, *J. Manufacturing Proc.*, **118**: 242 (2024).
8. A. Tiwari, G. Singh, and R. Jayaganthan, *Coatings*, **13**: 225 (2023).
9. A. Serjouei, *Mater. Sci. Eng. A*, **861**: 144345 (2022).
10. J. Wu, X. Q. Wang, W. Wang, M. M. Attallah, and M. H. Loretto, *Acta Mater.*, **117**: 311 (2016).
11. L. Pezzato, M. Dabala, S. Gross, and K. Brunelli, *Surf. Coat. Technol.*, **404**: 126477 (2020).
12. D. Talamona, D. Syrlybayev, and A. Perveen, *Mater. Sci. Eng. A*, **889**: 145843 (2024).

13. N. T. Aboulkhair, I. Maskery, C. Tuck, I. Ashcroft, and N. M. Everitt, *Mater. Sci. Eng. A*, **667**: 139 (2016).
14. N. Takata, H. Kodaira, A. Suzuki, and M. Kobashi, *Mater. Characterization*, **143**: 18 (2018).
15. E. Maleki, S. Bagherifard, N. Ahmad, S. Shao, O. Unal, M. Guagliano, and N. Shamsaei, *Additive Manufact. Let.*, **7**: 100175 (2023).
16. N. Takata, H. Kodaira, K. Sekizawa, A. Suzuki, and M. Kobashiv, *Mater. Sci. Eng. A*, **704**: 228 (2017).
17. A. Hadadzadeh, B. S. Amirkhiz, and M. Mohammadi, *Mater. Sci. Eng. A*, **739**: 295 (2018).
18. A. Hadadzadeh, B. S. Amirkhiz, J. Li, and M. Mohammadi, *Additive Manufact.*, **23**: 121 (2018).
19. M. Fousová, D. Dvorský, A. Michalcová, and D. Vojtěcha, *Mater. Characterization*, **137**: 119 (2018).
20. Y. Bai, Y. Yang, Z. Xiao, M. Zhang, and D. Wang, *Mater. Design*, **140**: 257 (2017).
21. Z. Xu, A. Liu, and X. Wang, *Mater. Sci. Eng. A*, **812**: 141141 (2021).
22. L. Thijs, K. Kempen, J. P. Kruth, and J. Van Humbeeck, *Acta Mater.*, **61**: 1809 (2013).
23. Б. М. Мордюк, М. О. Васильєв, С. М. Волошко, Н. І. Хріпта, *Металофіз. новітні технол.*, **44**, № 11: 1433 (2022).
24. С. М. Волошко, Б. М. Мордюк, М. О. Васильєв, В. І. Закієв, А. П. Бурмак, Н. В. Франчік, *Металофіз. новітні технол.*, **45**, № 2: 217 (2023).
25. М. О. Vasylyev, S. I. Sidorenko, S. M. Voloshko, and T. Ishikawa, *Успіхи фізики металів*, **17**, № 3: 209 (2016).
26. М. М. Ворон, *Процеси лиття*, № 3: 3 (2022).
27. V. G. Efremenko, A. G. Lekatou, Yu. G. Chabak, B. V. Efremenko, I. Petryshynets, V. I. Zurnadzhy, S. Emmanouilidou, and M. Vojtko, *Mater. Today Commun.*, **35**: 105936 (2023).
28. N. T. Aboulkhair, C. Tuck, I. Ashcroft, I. Maskery, and N. M. Everitt, *Metal. Mater. Trans. A*, **46**: 3337 (2015).
29. F. Alghamdi, X. Song, A. Hadadzadeh, B. Shalchi-Amirkhiz, M. Mohammadi, and M. Haghsheenas, *Mater. Sci. Eng. A*, **783**: 139296 (2020).

REFERENCES

1. M. O. Vasylyev, B. M. Mordyuk, and S. M. Voloshko, *Progress in Physics of Metals*, **24**, No. 1: 5 (2023).
2. M. O. Vasylyev, B. M. Mordyuk, and S. M. Voloshko, *Progress in Physics of Metals*, **24**, No. 1: 38 (2023).
3. M. O. Vasylyev, B. M. Mordyuk, S. M. Voloshko, and P. O. Gurin, *Progress in Physics of Metals*, **23**, No. 2: 337 (2022).
4. S. V. Adzhamsky, H. A. Kononenko, and R. V. Podolskyi, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **43**, No. 7: 909 (2021) (in Ukrainian).
5. A. Pola, L. Girelli, M. Tocci, and M. Gelfi, *Mater. Sci. Eng. A*, **739**: 317 (2018).
6. C. Linder, F. Vucko, T. Ma, S. Proper, and E. Dartfeldt, *Mater.*, **16**, Iss. 17: 5964 (2023).
7. A. Hosseini, Y. S. Narayanan, and N. Nguyen, *J. Manufacturing Proc.*, **118**: 242 (2024).

8. A. Tiwari, G. Singh, and R. Jayaganthan, *Coatings*, **13**: 225 (2023).
9. A. Serjouei, *Mater. Sci. Eng. A*, **861**: 144345 (2022).
10. J. Wu, X. Q. Wang, W. Wang, M. M. Attallah, and M. H. Loretto, *Acta Mater.*, **117**: 311 (2016).
11. L. Pezzato, M. Dabala, S. Gross, and K. Brunelli, *Surf. Coat. Technol.*, **404**: 126477 (2020).
12. D. Talamona, D. Syrlybayev, and A. Perveen, *Mater. Sci. Eng. A*, **889**: 145843 (2024).
13. N. T. Aboulkhair, I. Maskery, C. Tuck, I. Ashcroft, and N. M. Everitt, *Mater. Sci. Eng. A*, **667**: 139 (2016).
14. N. Takata, H. Kodaira, A. Suzuki, and M. Kobashi, *Mater. Characterization*, **143**: 18 (2018).
15. E. Maleki, S. Bagherifard, N. Ahmad, S. Shao, O. Unal, M. Guagliano, and N. Shamsaei, *Additive Manufacturing Letters*, **7**: 100175 (2023).
16. N. Takata, H. Kodaira, K. Sekizawa, A. Suzuki, and M. Kobashiv, *Mater. Sci. Eng. A*, **704**: 228 (2017).
17. A. Hadadzadeh, B. S. Amirkhiz, and M. Mohammadi, *Mater. Sci. Eng. A*, **739**: 295 (2018).
18. A. Hadadzadeh, B. S. Amirkhiz, J. Li, and M. Mohammadi, *Additive Manufacturing*, **23**: 121 (2018).
19. M. Fousová, D. Dvorský, A. Michalcová, and D. Vojtěcha, *Mater. Characterization*, **137**: 119 (2018).
20. Y. Bai, Y. Yang, Z. Xiao, M. Zhang, and D. Wang, *Mater. Design*, **140**: 257 (2017).
21. Z. Xu, A. Liu, and X. Wang, *Mater. Sci. Eng. A*, **812**: 141141 (2021).
22. L. Thijs, K. Kempen, J. P. Kruth, and J. Van Humbeeck, *Acta Mater.*, **61**: 1809 (2013).
23. B. M. Mordyuk, M. O. Vasylyev, S. M. Voloshko, and N. I. Khripta, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **44**, No. 11: 1433 (2022) (in Ukrainian).
24. S. M. Voloshko, B. M. Mordyuk, M. O. Vasylyev, V. I. Zakiev, A. P. Burmak, and N. V. Franchik, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **45**, No. 2: 217 (2023) (in Ukrainian).
25. M. O. Vasylyev, S. I. Sidorenko, S. M. Voloshko, and T. Ishikawa, *Progress in Physics of Metals*, **17**, No. 3: 209 (2016).
26. M. M. Voron, *Protsesny Lyttya*, No. 3: 3 (2022) (in Ukrainian).
27. V. G. Efremenko, A. G. Lekatou, Yu. G. Chabak, B. V. Efremenko, I. Petryshynets, V. I. Zurnadzhy, S. Emmanouilidou, and M. Vojtko, *Mater. Today Commun.*, **35**: 105936 (2023).
28. N. T. Aboulkhair, C. Tuck, I. Ashcroft, I. Maskery, and N. M. Everitt, *Metal. Mater. Trans. A*, **46**: 3337 (2015).
29. F. Alghamdi, X. Song, A. Hadadzadeh, B. Shalchi-Amirkhiz, M. Mohammadi, and M. Haghshenas, *Mater. Sci. Eng. A*, **783**: 139296 (2020).

PACS numbers: 61.72.Ff, 62.20.mj, 62.20.Qp, 81.40.Np, 81.40.Pq, 81.65.Lp, 81.70.Bt

The Influence of Thermal-Diffusion Saturation on the Properties of Boride Layers in AISI1095 Tool Steel

V. A. Kozechko, V. I. Kozechko, O. O. Bohdanov, and V. A. Derbaba

Dnipro University of Technology,
19 Dmytra Yavornytskoho Ave.,
49005-UA Dnipro, Ukraine

This article presents a comprehensive analysis of the mechanical properties of boride diffusion coatings applied to AISI1095 steel. The study is conducted to enhance the wear resistance and durability of tools and machine parts. Using thermal-diffusion saturation, single-phase and two-phase boride layers are formed, for which detailed measurements of microhardness and microbrittleness are carried out. Tests are performed with the PMT-3 device under loads ranging from 0.4 N to 20 N, allowing the determination of the relationships between microhardness, brittleness, and load magnitude. Data analysis revealed three distinct regions of microhardness variation corresponding to different load levels and highlighted the behaviour of boride phases FeB and Fe₂B. Special attention is given to studying interphase boundaries, where maximum residual stresses, contributing to crack formation and coating degradation, are observed. The obtained results enable more accurate predictions of the operational characteristics of boride coatings and optimization of application regimes that is particularly important for components subjected to critical loads in industries such as heavy industry and mechanical engineering. This research contributes to the development of protective coating technologies aimed at improving the wear resistance and durability of products.

Key words: boride coatings, diffusion method, microhardness, microbrittleness, steel AISI1095, wear resistance, industrial applications.

Corresponding author: Viktoriya Anatoliyivna Kozechko
E-mail: kozechkova@ukr.net

Citation: V. A. Kozechko, V. I. Kozechko, O. O. Bohdanov, and V. A. Derbaba, The Influence of Thermal-Diffusion Saturation on the Properties of Boride Layers in AISI1095 Tool Steel, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **47**, No. 5: 493–501 (2025). DOI: [10.15407/mfint.47.05.0493](https://doi.org/10.15407/mfint.47.05.0493)

© Publisher PH “Akadempriodyka” of the NAS of Ukraine, 2025. This is an open access article under the CC BY-ND license (<https://creativecommons.org/licenses/by-nd/4.0>)

У цій статті представлено всебічну аналіз механічних властивостей боридних дифузійних покриттів, нанесених на крицю AISI1095. Дослідження проводилося з метою підвищення зносостійкості та довговічності інструментів і деталей машин. Методом термодифузійного насичення було сформовано однофазні та двофазні боридні шари, для яких було проведено детальні міряння мікротвердості та мікрокрихкості. З використанням приладу ПМТ-3 було проведено випробування під навантаженням у діапазоні від 0,4 Н до 20 Н, що уможливило визначити залежності мікротвердості та крихкості від величини навантаження. Аналіза даних виявила три характерні області зміни мікротвердості, що відповідають різним рівням навантаження, і підкреслила особливості поведінки боридних фаз FeB і Fe₂B. Особливу увагу було приділено дослідженню міжфазних меж, де спостерігалися максимальні залишкові напруги, що сприяють утворенню тріщин і деградації покриття. Одержані результати дали змогу більш точно прогнозувати експлуатаційні характеристики боридних покриттів та оптимізувати режими нанесення їх, що особливо важливо для деталей, які піддаються критичним навантаженням у таких галузях, як важка промисловість і машинобудування. Це дослідження вносить внесок у розвиток технологій нанесення захисних покриттів, спрямованих на поліпшення зносостійкості та довговічності виробів.

Ключові слова: боридні покриття, дифузійний метод, мікротвердість, мікрокрихкість, криця AISI1095, зносостійкість, промислові застосування.

(Received 27 July, 2024; in final version, 26 November, 2024)

1. INTRODUCTION

One of the most effective methods for increasing the wear resistance and durability of tools, machine parts, as well as technological and instrumental equipment, is the application of boride diffusion coatings on the surface of products. These coatings provide high hardness and resistance to mechanical and chemical effects, which significantly enhance the performance characteristics of products. For a qualitative and quantitative assessment of boride coatings, it is crucial to study their mechanical properties in detail, especially such parameters as microhardness and microbrittleness [1, 2].

In the present study, an analysis of the microhardness and microbrittleness of boride layers formed by the thermal-diffusion saturation method was conducted. The research established a clear relationship between microhardness, microbrittleness, and the load applied during testing. This allows conclusions to be drawn about the behaviour of coatings under various operating conditions.

The results of this study have important practical significance. They allow for more accurate predictions of the performance characteristics of boride coatings and for the selection of optimal application modes for various operating conditions. The obtained data can also be

used to develop new surface treatment technologies aimed at improving the wear resistance and durability of products. In particular, the established dependencies can help in creating coatings with specified properties, which is especially important for critically loaded units and parts used in heavy industry, mechanical engineering, and other fields.

Thus, the studies of the microhardness of boride layers conducted in this work make a significant contribution to the development of protective coating technologies, which contributes to the increased reliability and durability of tools and equipment.

2. EXPERIMENTAL/THEORETICAL DETAILS

The research was conducted on AISI1095 steel coated with boride layers. The boriding process was carried out in powder media inside special containers with a melting lock at a temperature of 950°C for 4 hours. As a result of this process, single-phase and two-phase boride layers were formed on the samples. The thickness of the single-phase layer consisting of Fe₂B was about 100 µm. The two-phase layer had a total thickness of up to 200 µm, with the thickness of the FeB surface zone being 100 µm.

To measure the microhardness of the coatings, a PMT-3 device was used, where tests were conducted with loads on the indenter ranging from 0.4 N to 2.0 N. Indentation tests were performed according to two schemes: the first scheme included measurements along the surface of the sample along the axis of the boride needles, and the second scheme provided for measurements along the layer on cross-sections at a distance of 35 µm from the surface of the sample [3–5].

The cross-sections for determining microhardness were prepared according to standard methodology. This process included rough grinding, then fine grinding on abrasive paper, and polishing on cloth using chromium oxide. During the microhardness and microbrittleness measurements, 50 indentations were performed at each load.

These meticulous measurements and tests provided detailed data on the mechanical properties of boride coatings, which is important for assessing their performance characteristics and further use in various industrial fields [6].

The study of microbrittleness was conducted according to the methodology described in work [2]. To assess microbrittleness, the number of indentations with defects and the nature of these defects appearing around the indentation were analysed. The total brittleness score was calculated using the following formula:

$$Z = 0 \cdot n_0 + 1 \cdot n_1 + 2 \cdot n_2 + 3 \cdot n_3 + 4 \cdot n_4 + 5 \cdot n_5,$$

where Z is the total brittleness score; n_1, n_2, n_3, n_4, n_5 are the numbers of indentations with the corresponding brittleness score.

During the study, careful statistical processing of the obtained results was carried out. Methods of statistical analysis were used to eliminate possible errors, including gross errors. All measurements were analysed to identify and eliminate anomalous data, ensuring high accuracy and reliability of the final results.

The methodology included the following stages:

- preparation of samples and application of indentations at various loads on the indenter;
- assessment of the nature of defects around each indentation using optical microscopy;
- counting the number of indentations with different levels of brittleness;
- calculation of the total brittleness score according to the specified formula;
- statistical processing of data, including the exclusion of anomalous values and calculation of average indicators.

3. RESULTS AND DISCUSSION

These studies provided objective data on the microbrittleness of boride coatings, which is important for further improving their characteristics and developing new coating application technologies [7]. This approach also allows for accurate prediction of material behaviour under operating conditions, which is a key factor for enhancing their durability and reliability.

The results of the surface microhardness measurements according to the first scheme for the single-phase and two-phase boride layers are presented in Table 1.

Measurements of the surface microhardness of the single-phase and two-phase boride layers showed that the surface microhardness changes depending on the load applied to the indenter (Fig. 1).

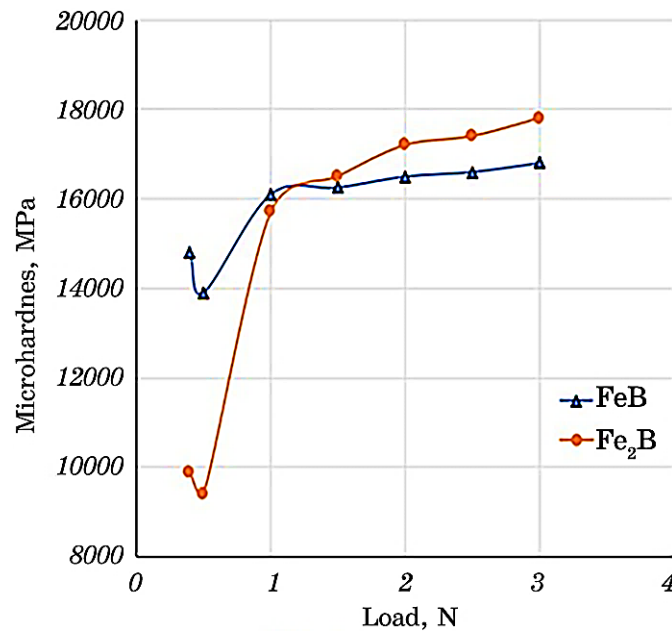
Figure 1 shows that three characteristic sections were identified in the microhardness measurements. The first section corresponds to a load of less than 0.5 N. In this section, there is a sharp decrease in microhardness when the load reaches 0.5 N. The second section lies in the range of 0.5–1 N, where a sharp increase in microhardness is observed (from 13900 MPa to 16100 MPa for FeB and from 9400 MPa to 15700 MPa for Fe₂B, respectively). The third section is characterized by a gradual increase in microhardness values for FeB and Fe₂B, respectively.

Additionally, the study included measurements of the microbrittleness of the FeB and Fe₂B phases by indenting along the layer on cross-sections.

TABLE 1. Surface microhardness of FeB and Fe₂B layers.

Load, N	FeB	Fe ₂ B
	Surface microhardness, MPa	
0.4	14800	9900
0.5	13900	9400
1.0	16100	15700
1.5	16300	16500
2.0	16500	17200
2.5	16600	17300
3.0	17100	17400

Changes in the microhardness of the boride layer on cross-sections depending on the load can be divided into three sections (Fig. 2). In the first section, with small loads (less than 0.5 N), there is an increase in microhardness values as the load decreases. This is because, with smaller loads, the indentation has fewer defects, and the microhardness is measured more accurately. In this section, the total brittleness score is the lowest: 36 for the FeB phase and 16 for the Fe₂B phase. The

**Fig. 1.** Change in microhardness of boride layers depending on load.

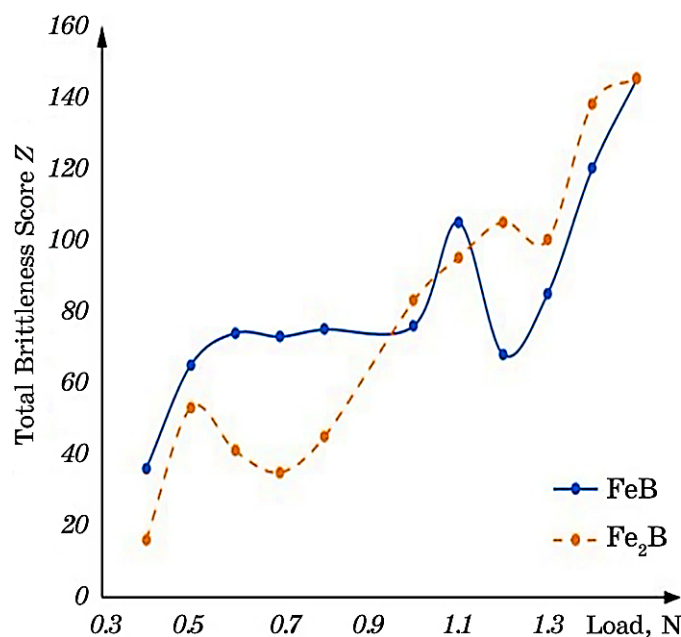


Fig. 2. Change in total brittleness score of boride layers depending on load.

number of indentations with defects is 19 and 12 for FeB and Fe₂B, respectively. These defects correspond to a brittleness score of 1–3 and are characterized by one or two cracks at the indentation corners.

At this stage of measurements, the root mean square error reaches its maximum values: 3700 MPa for the FeB phase and 4300 MPa for the Fe₂B phase. This is explained by the fact that, with small loads, the accuracy of measurements decreases due to the influence of microstructural heterogeneities and material defects. As a result, the microhardness measurement data can vary significantly, leading to increased error [6].

In the second section, with a load ranging from 0.5 N to 1.0 N, there is a further increase in microhardness values. During this period, the total brittleness score increases 2–3 times compared to the first section, indicating an increase in the materials' brittleness. At the same time, there is a decrease in the relative measurement error, indicating an improvement in the accuracy of the results (Table 2). The number of indentations with defects in this section is about 30, and they correspond to a brittleness score of 1–4. This means that the defects include both minimal cracks and more severe damage.

The third section is characterized by loads greater than 1 N. In this section, there is a further increase in the materials' microbrittleness. The number of indentations with defects approaches 40, indicating a

TABLE 2. Change in microhardness and brittleness of boride layers.

Load, N	FeB		Fe ₂ B	
	Microhardness, MPa	Total brittleness score <i>Z</i>	Microhardness, MPa	Total brittleness score <i>Z</i>
0.4	1310	36	1230	16
0.5	1250	65	1160	53
0.6	1300	74	1300	41
0.7	1340	73	1330	35
0.8	1390	75	1600	45
1.0	1490	76	1620	83
1.1	1540	105	1530	95
1.2	1600	68	1500	105
1.3	1720	85	1430	100
1.4	1530	120	1450	138
1.5	1440	145	1500	145

significant deterioration of the materials' condition under high loads. At a load of 1.5 N, the total brittleness score doubles compared to the second section. This significant increase indicates a sharp deterioration in the materials' brittleness. The number of indentations with defects reaches 40, among which there are indentations corresponding to a brittleness score of 5. This means that the indentation shape is destroyed, which is a serious indicator of the materials' property degradation.

More than half of the indentations in this section have a brittleness score of 4, characterized by one or two chips at the edges of the indentation. These chips indicate significant damage to the material structure under the load. As a result, the microhardness values in this section decrease to 14.400 and 14.200 MPa for the FeB and Fe₂B phases, respectively. This decrease indicates material degradation under high loads, which must be considered when using it in real operating conditions [8].

The analysis of the research results indicates that the destruction of the diffusion layer most often occurs along the interphase boundary between the high-boron phase FeB (with rhombic symmetry) and the low-boron phase Fe₂B (with tetragonal symmetry). In this zone, the maximum residual stresses are observed, which contribute to crack formation [9]. This occurs particularly due to the anisotropy of the thermal expansion coefficients of the FeB and Fe₂B borides. Within the interneedle space in AISI1095 steel, regions with a pearlitic structure are preserved, and the amount of borocementite is insignificant.



Fig. 3. Microstructure of boronised layer of AISI1095 steel, $\times 200$.

The microstructure of boronised AISI1095 steel is shown in Fig. 3.

This fact underscores the importance of understanding the mechanisms of diffusion layer destruction and the need to consider anisotropy and other physical properties of materials when designing and operating products with such coatings [10].

4. CONCLUSIONS

As a result of the study, it was established that the microhardness of the boride layer directly depends on the load applied by the indenter. Changes in the surface microhardness of the FeB and Fe₂B boride layers showed similar trends with changing loads. These dependences can be divided into three main sections.

1. At low loads (less than 0.5 N), an initial increase in microhardness is observed. This may be due to the materials' response to small mechanical loads and initial changes in its structure.
2. In the range of 0.5 N to 1.0 N, there is a significant increase in microhardness. This is associated with deeper penetration of the indenter and possibly phase transformations in the boride phases.
3. In the load range of 1 N to 2 N, microhardness remains almost unchanged. This may indicate material saturation with deformation or

reaching its strength limit.

In addition, the study revealed the anisotropy of the microbrittleness of the FeB and Fe₂B boride phases, which is confirmed by the total brittleness score along the axis of their needles. These data not only deepen our understanding of the mechanical properties of boride layers but also highlight the importance of considering the directionality of tests when assessing their industrial and technical applications.

REFERENCES

1. V. A. Derbaba, V. A. Kozechko, S. T. Patsera, O. L. Voichyshen, and V. I. Kozechko, *Coll. Res. Pap. Nat. Min. Univ.*, **74**: 133 (2023) (in Ukrainian).
2. Iu. Savchenko, V. Kozechko, and A. Shapoval, *Proceedings of the 7th International Conference on Industrial Engineering (ICIE 2021)* (2022).
3. Iu. Savchenko, O. Shapoval, V. Kozechko, O. Markov, N. Hrudkina and V. Voskoboynik, *IEEE International Conference on Modern Electrical and Energy Systems (MEES)* (Kremenchuk: 2021), p. 1.
4. Iu. Savchenko, A. Shapoval, V. Kozechko, V. Voskoboynik, O. Khrebtova, and S. Shlyk, *2021 IOP Conf. Ser.: Mater. Sci. Eng.*, **1164**: 012070 (2021).
5. V. Pilipenko, S. Grigorenko, V. Kozechko, and O. Bohdanov, *Naukovyi Visnyk Natsionalnoho Hirnychoho Universytetu*, **1**: 78 (2021).
6. R. P. Didyk and V. A. Kozechko, *Chernyye Metally*, **7**: 66 (2016).
7. O. V. Beketov, D. V. Laukhin, L. M. Dadiverina, V. I. Kozechko, and F. J. Taranenko, *Ukrainian Journal of Construction and Architecture*, **2**: 26 (2024) (in Ukrainian).
8. O. Beketov, D. Laukhin, N. Rott, E. Babenko, and V. Kozechko, *Advances in Design, Simulation and Manufacturing VII. DSMIE 2024* (2024).
9. D. Laukhin, O. Beketov, L. M. Dadiverina, and V. I. Kozechko, *Mathematical Modeling*, **2**, No. 49: 182 (2023) (in Ukrainian).
10. V. A. Kozechko and V. I. Kozechko, *Coll. Res. Pap. Nat. Min. Univ.*, **74**: 154 (2023) (in Ukrainian).

PACS numbers: 06.60.Vz, 07.05.Mh, 61.46.-w, 62.23.-c, 65.80.-g, 68.35.Gy, 81.40.Jj

Exploring the Impact of Process Parameters on Tensile Strength in Fused Deposition Modelling: A Comprehensive Study with Predictive Models

K. Zouaoui, S. Amroune, M.-S. Chebbah*, M. Salamani, M. Fnides**,
and A. Khaldoune

*Laboratory of Materials and Mechanics of Structures, Faculty of Technology,
University of M'sila,
28000 M'sila, Algeria.*

**Department of Mechanical Engineering, Faculty of Technology,
Mohamed Khider University of Biskra,
BP 145RP, 07000 Biskra, Algeria*

***Mechanics and Structures Research Laboratory,
May 8th 1945 University,
24000 Guelma, Algeria*

Fused deposition modelling or 3D printing is a frequently utilized additive manufacturing technique. This approach allows for the creation of light-weight products using various infill strategies and percentages. By adjusting parameters such as temperature, density, speed of printing, *etc.*, components with diverse characteristics can be produced. Polylactic acid (PLA) is favoured for 3D printing due to its low cost and sustainability, being derived from renewable sources and biodegradable. Understanding the mechanical performance of different 3D-printing strategies is essential for optimizing PLA part production. This study is focused on the application of fused deposition modelling for rapid prototyping and manufacturing, particularly, focusing on the influence of extruder temperature, filling density, and weight on the tensile strength of printed PLA samples. The study is adhered to

Corresponding author: Salah Amroune
E-mail: salah.amroune@univ-msila.dz

Citation: K. Zouaoui, S. Amroune, M.-S. Chebbah, M. Salamani, M. Fnides, and A. Khaldoune, Exploring the Impact of Process Parameters on Tensile Strength in Fused Deposition Modelling: A Comprehensive Study with Predictive Models, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, 47, No. 5: 503–521 (2025). DOI: [10.15407/mfint.47.05.0503](https://doi.org/10.15407/mfint.47.05.0503)

© Publisher PH “Akadempriodyka” of the NAS of Ukraine, 2025. This is an open access article under the CC BY-ND license (<https://creativecommons.org/licenses/by-nd/4.0>)

ASTM D-638 tensile standards, with 27 samples printed and tested using an Anycubic i3 Mega machine. The results reveal that extruder temperature minimally affects tensile strength, while filling density has a significant impact, and weight shows no notable effect. Additionally, two predictive models (artificial neural network (ANN) and Taguchi L9) are developed, showing favourable alignment with experimental data, with correlation coefficients reaching 91.03% for the ANN method and 80.75% for stress, 90.13% for strain, and 50.83% for Young's modulus within the Taguchi method.

Key words: fused deposition modelling, mechanical properties, PLA, ANN, Taguchi's method, 3D printing.

Моделювання натоплювання або 3D-друк є широко використовуваною технікою адитивного виробництва. Цей підхід дає змогу створювати легкі продукти з використанням різних способів заповнення та процентного співвідношення компонентів. Регулюванням таких параметрів, як температура, густина, швидкість друку та ін., можна виготовляти компоненти з різними характеристиками. Полімолочна кислота (PLA) широко використовується для 3D-друку завдяки її низькій вартості та екологічності, оскільки вона одержується з поновлюваних джерел і піддається біологічному розкладанню. Визначення механічних характеристик за різних способів 3D-друку має важливе значення для оптимізації виробництва деталей з PLA. Дану роботу спрямовано на використання моделювання натоплювання для швидкого прототипування та виробництва, особливо зосереджуючись на впливі температури екструдера, густині наповнення та ваги на межу міцності друківаних зразків PLA. Під час досліджень було використано стандарти міцності на розтяг ASTM D-638; при цьому 27 зразків було надруковано та протестовано за допомогою машини Anycubic i3 Mega. Результати показують, що температура екструдера та вага мінімально вплинули на межу міцності, тоді як густина наповнення мала значний вплив. Крім того, розроблено два прогностичні моделі (штучна нейронна мережа та Тагучі L9), які демонструють сприятливе узгодження з експериментальними даними з коефіцієнтами кореляції, які сягають 91,03% для методу штучної нейронної мережі та 80,75% для напруги, 90,13% для деформації та 50,83% для модуля Юнга за моделлю Тагучі.

Ключові слова: моделювання натоплювання, механічні властивості, полімолочна кислота, штучна нейронна мережа, метод Тагучі, 3D-друк.

(Received 18 May, 2024; in final version, 9 July, 2024)

1. INTRODUCTION

In recent years, there has been a revolutionary shift in the methodologies employed for designing, prototyping, and manufacturing components. Among these techniques, 3D printing alternatively referred to as additive manufacturing, stands out as a pivotal technology. Researchers have directed their attention toward investigating this inno-

vative approach due to its capability to craft intricate and sophisticated shapes with a remarkable level of precision [1–3]. This unique and groundbreaking technology transforms conventional manufacturing by constructing objects based on digital models, eliminating the necessity for traditional cutting or casting machines and numerous advantages exist compared to traditional manufacturing methods [4, 5]. The evolution of 3D printing encompasses various additive manufacturing (AM) methods, notably fused deposition modelling (FDM), a widely embraced 3D printing technique. FDM operates by layering thermoplastic filaments through a computer-controlled extruder nozzle, offering unparalleled flexibility, cost-effectiveness, and user-friendly functionality [6, 7]. Serving as a predominant force in shaping components with intricate designs and integrating diverse materials, it has brought about a revolutionary impact across industries, including biomedical, aerospace, automotive engineering, civil engineering, and beyond [8–10].

Dina *et al.* [11] conducted an investigation to evaluate the effect of different printing parameters on the tensile strength of polylactic acid (PLA) samples manufactured through FDM 3D printing. Using a Taguchi array design perpendicular to L25, they systematically examined parameters such as layer thickness, print speed, nozzle temperature, direction angle, and number of lines. The results highlighted the significant influence of printing process variables on tensile strength, revealing values ranging from 37 MPa to 53 MPa. The ideal variables that help achieve maximum tensile strength were also identified, including a layer thickness of 0.22 mm and a printing speed of 45 mm/s, nozzle temperature 205°C, direction angle 70°, use 4 profiles. The tensile test results were compared with predictions generated by both the artificial neural network (ANN) and the mathematical model to validate the results. The maximum error recorded by the artificial neural network was 8.91%, while the maximum error shown by the mathematical model was 19.96%.

Meiabadi *et al.* [12] conducted a study examining the influence of printing angles and UV curing on the mechanical characteristics of FDM fabricated PLA samples. Their investigation focused on assessing the tensile properties of specimens printed at varying angles along X-, Y-, and Z-axes. Noteworthy outcomes from the study indicated a significant impact of printing angles on the tensile behaviour of PLA, particularly, with the X 60° specimen demonstrating the highest tensile strength. Additionally, the research revealed that lower infill density and the UV curing process resulted in diminished mechanical properties and material embrittlement, impacting both elongation and Young's modulus.

Another study about the comprehensive examination and design optimization of 3D printing structures by scrutinizing the ultimate ten-

sile strength (UTS) of FDM PLA materials across varying printing angles by Tianyun *et al.* [13]. Notably, the findings revealed a significant alteration in the UTS of 3D-printing materials corresponding to changes in the printing angle. The study observed a consistent decrease in tensile strength as the layer thickness increased from 0.1 mm to 0.3 mm. Particularly, noteworthy is the substantial UTS gap of 52.29%, observed between 0° and 90° 3D-printing materials with a layer thickness of 0.1 mm.

Muammal *et al.* [14] investigated a study to explore the influence of diverse 3D-printing process parameters on the tensile strength and hardness properties of PLA, employing FDM technique. Their investigation encompassed the examination of various build orientations, raster direction angles, and layer heights. The results obtained from the study revealed that the on-edge orientation samples exhibited the highest values for Young's modulus and ultimate tensile strength, measuring at 1.896 ± 0.044 GPa and 49.12 ± 0.78 MPa, respectively. Furthermore, the specimen with a 0.1 mm layer thickness demonstrated the most favourable elongation at break, reaching 3.13%.

The examination of existing literature indicates a limited number of research studies addressing advancements in additive manufacturing specifically using fused deposition modelling (refer to Fig. 1). Therefore, the present study strategically directs its attention towards investigating the influence of extruder density, printing temperature, and weight on the tensile strength of PLA samples.

The uniqueness of this study lies in its thorough examination of the application of FDM for rapid prototyping and manufacturing, with a particular emphasis on three key parameters: extruder temperature, filling density, and weight. While most previous studies typically focus on one or two of these parameters, this research deliberately ex-

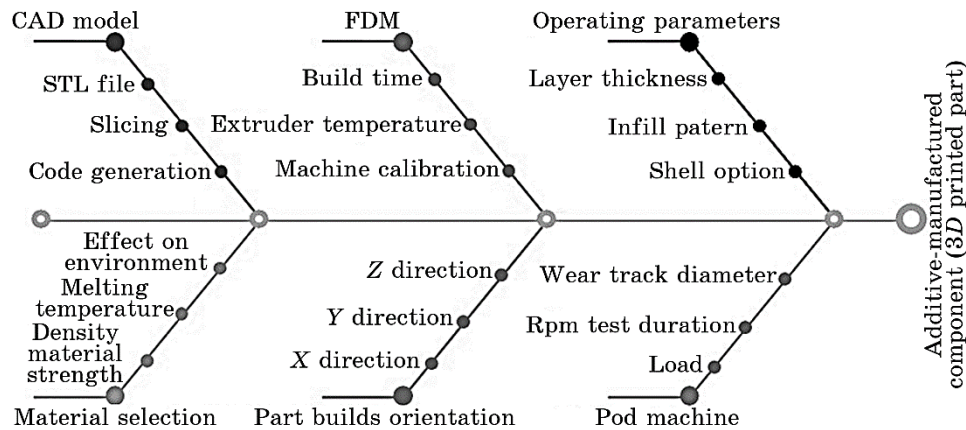


Fig. 1. Cause and effect diagram of FDM process parameters.

explored the interaction among these variables and their impact on the tensile strength of printed PLA samples. Furthermore, the use of ASTM D-638 tensile standards ensures compliance with recognized testing protocols, thereby reinforcing the reliability of the results. The implementation of two predictive models, namely ANN and Taguchi, to interpret experimental data strengthens the robustness of the analysis.

2. MATERIALS AND METHODS

2.1. Samples Preparation

In this work, we drew all the samples in CATIA CAD software. After that we converted the CAD file to STL format, and we configured the printing settings through Ultimaker Cura and using the Anycubic i3 Mega printer according to ASTM D638 Type IV (this test method for analysing tensile property data for plastic materials) [15] (Fig. 2). Using PLA filament to determine the printing temperature and PLA filament density impact on tensile strength.

The Anycubic i3 Mega is a Cartesian-style FDM printer that utilizes a heated bed and a single extruder to deposit thermoplastic materials, allowing the creation of 3D objects [16]. Impression size is not more than $210 \times 210 \times 205 \text{ mm}^3$, 1.75 mm diameter filament suitable for PLA, ABS, HIPS, PETG, and wood, with 0.4 mm buse that can reach 260°C . The heating plate reaches 110°C and prints the objects from an SD card or USB cable.

PLA filament is a frequently used 3D printing material. PLA is a thermoplastic produced using renewable resources like cornstarch, sugar cane, tapioca roots, and potato starch, and the technical properties of PLA filament in Table 1 [17].

The infill pattern (zigzag) and bed temperature is of 60°C . The layer thickness and orientation angle were constants (Table 1). The samples were printed according to three temperatures (200°C , 210°C , 220°C) and three densities (20%, 30% and 40%), which means 27 specimens

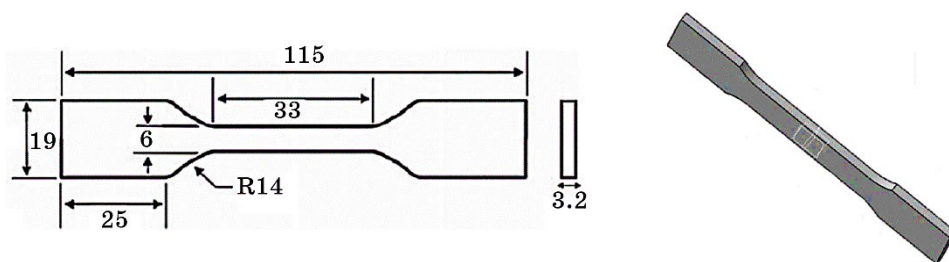
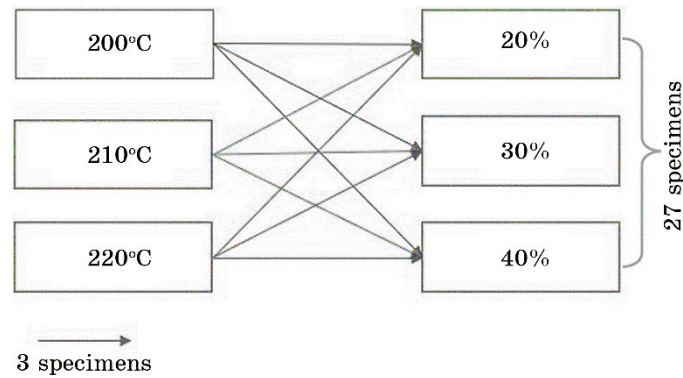


Fig. 2. CAD model and specification of tensile specimen.

TABLE 1. PLA technical properties and fixed printer settings.

Filament specifications	Values	Settings	Specification
Diameter	1.75 mm	Speed printing, mm/s	70
Length	330·10 ⁶ µm	Wall thickness, mm	1.2
Weight	1 kg for each spool	Infill pattern	zigzag
Density	1.24 g/cm ³	Build plate temperature, °C	60
Tensile strength	62 kg/cm ²	Fan speed, %	100
Flexural modulus	28000 kg/cm ²	Layer height, mm	0.2
Colour	PLA Green	Initial layer speed, mm/s	10

**Fig. 3.** Printing parameters for samples.

printing as follows (Fig. 3).

2.2. Tensile Test

The 27 printed samples (Fig. 4, *b*) were testing on the universal testing machine (Test 112) with a speed of 0.1 mm and force of 5 kN for tensile strength keeps at the completely tensile course (Fig. 4, *c, d*). The inherent software module meticulously logged the data pertaining to the utmost tensile strength, elongation, and force load. The results of tensile strength of the tensile strength are shown in Table 2.

The calculation of stress (σ) during tensile testing is succinctly articulated through the fundamental formula as Eq. (1):

$$\sigma = F/A, \quad (1)$$

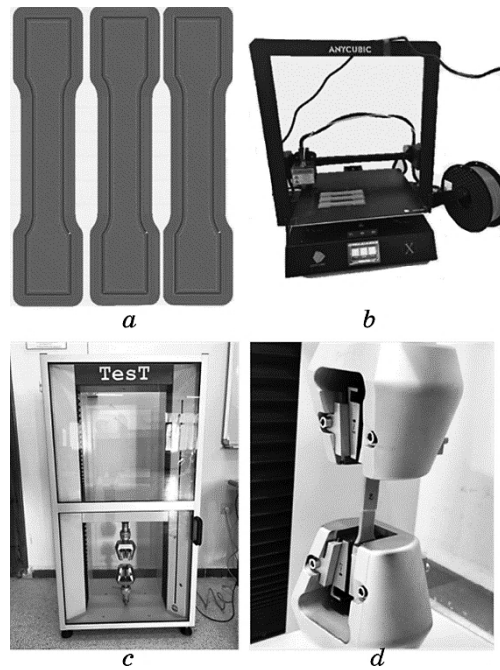


Fig. 4. Tensile test procedure.

signifies the cross-sectional area of the specimen. It is an important mechanical property of materials that is used to describe their resistance to deformation and failure under tensile forces. This formula applies to homogeneous materials with uniform cross-sections and is valid only up to the point of fracture. Beyond the point of fracture, the material undergoes plastic deformation, and the stress-strain relationship becomes nonlinear. The tensile stress formula is widely used in various fields, such as engineering, physics, and materials science, to characterize the mechanical behaviour of materials under tensile forces. It is also used to design and optimize structures and components that are subjected to tensile loads, such as bridges, buildings, and aircraft [18].

2.3. Artificial Neural Network (ANN)

Artificial neural networks (ANNs) serve as a mathematical instrument inspired by the structure and function of the human brain and biological nervous system [19]. They are composed of interconnected nodes, or neurons, that process and transmit information through weighted connections. ANNs are capable of learning from data, recognizing patterns, and making predictions or decisions based on the input–output relationships.

TABLE 2. Empirical and anticipated tensile strength of pla samples using ann model.

No	Temperature (°C)	Density (%)	Weight (g)	Strain (mm)			Stress (MPa)			Young's modulus×10 ⁻³ (GPa)		
				Exp	ANN	Err	Exp	ANN	Err	Exp	ANN	Err
1	200	20	4.881	0.0110	0.012	-0.001	32.29	43.36	-11.07	2630.20	2737.87	-107.67
2	200	20	4.871	0.0100	0.012	-0.001	30.46	43.27	-12.81	2774.20	2753.13	021.07
3	200	20	4.895	0.0110	0.012	-0.001	32.05	43.49	-11.44	2755.60	2718.32	037.28
4	200	30	5.081	0.0090	0.015	-0.006	28.96	43.00	-14.04	2956.90	2575.81	381.09
5	200	30	5.122	0.0120	0.015	-0.003	37.07	43.46	-6.39	2696.20	2548.85	147.35
6	200	30	5.105	0.0120	0.015	-0.003	34.59	43.29	-8.70	2760.80	2555.83	204.97
7	200	40	5.403	0.0140	0.013	0.001	42.13	44.16	-2.04	2747.40	2753.22	-005.82
8	200	40	5.409	0.0130	0.013	0.000	39.70	44.21	-4.51	2877.60	2755.92	121.68
9	200	40	5.405	0.0160	0.013	0.003	44.74	44.18	0.56	2368.70	2754.12	-385.42
10	210	20	4.887	0.0110	0.010	0.001	32.58	32.54	0.04	2756.40	2775.05	-018.65
11	210	20	4.887	0.0100	0.010	0.000	29.69	32.54	-2.84	2803.90	2775.05	028.85
12	210	20	4.868	0.0110	0.009	0.002	32.78	32.43	0.34	2754.10	2804.92	-050.82
13	210	30	5.145	0.0110	0.014	-0.003	35.36	32.79	2.58	2901.80	2768.98	132.82
14	210	30	5.149	0.0120	0.014	-0.002	36.16	32.81	3.35	2727.90	2764.46	-036.56
15	210	30	5.131	0.0110	0.014	-0.003	34.70	32.69	2.01	2952.70	2785.26	167.44
16	210	40	5.400	0.0130	0.010	0.003	40.60	32.16	8.43	2711.80	2669.00	042.80
17	210	40	5.405	0.0130	0.010	0.003	41.87	32.24	9.63	2823.40	2662.23	161.17
18	210	40	5.395	0.0120	0.010	0.002	38.74	32.09	6.65	2949.70	2676.19	273.51
19	220	20	4.859	0.0100	0.009	0.001	30.82	29.61	1.21	2785.10	2786.62	-001.52
20	220	20	4.856	0.0110	0.009	0.002	32.25	29.62	2.64	2750.20	2787.19	-036.99
21	220	20	4.851	0.0110	0.009	0.001	31.50	29.63	1.87	2764.50	2788.06	-023.56
22	220	30	5.153	0.0120	0.010	0.003	37.76	29.19	8.57	2818.50	2745.07	073.43
23	220	30	5.122	0.0120	0.010	0.003	37.01	29.24	7.77	2764.20	2761.36	002.84
24	220	30	5.398	0.0120	0.009	0.003	36.19	29.01	7.18	2759.60	2746.59	013.01
25	220	40	5.386	0.0110	0.009	0.001	34.91	29.10	5.81	3013.20	2964.64	048.56
26	220	40	5.401	0.0120	0.009	0.003	37.71	29.09	8.62	2864.60	2956.48	-091.88
27	220	40	5.410	0.0120	0.009	0.003	38.51	29.09	9.42	2942.50	2950.75	-008.25

ANNs have been widely used in various fields, such as computer vision, natural language processing, speech recognition, and robotics, to solve complex problems that are difficult or impossible to solve using traditional algorithms [20, 21]. The function ANN method is employed for output prediction. This neural network comprises three layers, namely, an input layer, an output (or target) layer, and an intervening hidden layer. The number of input and output parameters related by the quantity of neurons in the input and output layers.

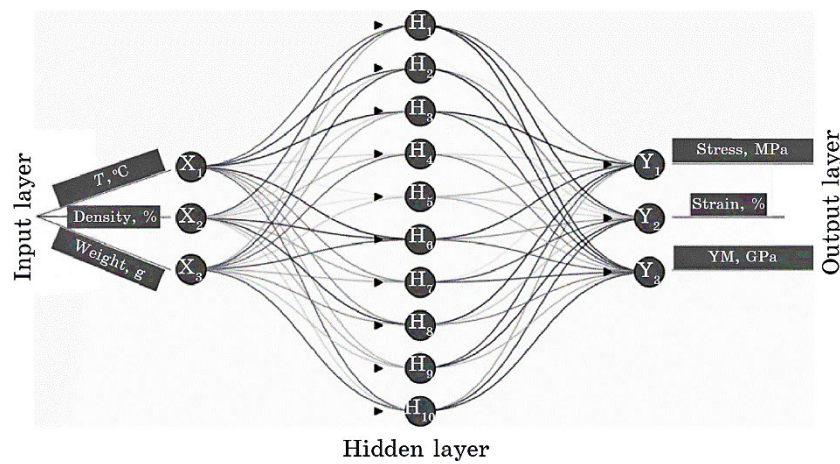


Fig. 5. Schematic of the ANN.

In this study, ANN model underwent training using MATLAB, incorporating input parameters such as temperature, density, and sample weight, along with output parameters including stress modulus, strain, and Young's modulus. The neural synthesis tool facilitated the importation of a 3×27 input matrix and corresponding 3×27 output data, as illustrated in Fig. 5.

2.4. Taguchi Method

The Taguchi method, created by Japanese engineer Genichi Taguchi, is recognized as a robust engineering tool for enhancing the quality of engineering design by integrating statistical methods and concepts from design of experiments. It has demonstrated successful application across various domains such as manufacturing and engineering, product design, experimental design, reliability engineering, and chemical process design, specifically in maximizing yields of specific compounds. The approach advocates notable advancements in three key design phases: system design, parameters design, and tolerance design [22, 23].

In this work, the experiments were arranged using Taguchi's orthogonal array of fractional factorial design (L9) with the assistance of Minitab software.

The Taguchi method entails performing experiments to optimize the printing process by adjusting input factors to attain the targeted S/N ratio. By emphasizing the S/N ratio, the Taguchi method seeks to enhance quality, robustness, and performance while mitigating the impact of variability and external factors. Given that this investigation

focuses on maximizing stress, strain, and Young's modulus values, the data points are computed using a 'bigger is better' approach to attain superior performance and reduced sensitivity to variation. This categorization ensures that the S/N ratio is characterized as Eq. (2):

$$\frac{S}{N} = -10 \log_{10} \left(\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \left(\frac{y_i}{\sigma} \right)^2 \right), \quad (2)$$

where y_i represents the mean of measurements for each trial, and σ is the standard deviation [24, 25].

3. RESULTS AND DISCUSSION

3.1. Tensile Strength

Following the execution of a tensile test on the 27 specimens (Fig. 6), the experimental findings depicted in Figs. 7 and 8 were ascertained. Notably, the density exhibited a noteworthy influence on the strain, Stress, and Young's modulus (output parameters), when juxtaposed with the temperature. This observation underscores that an augmentation in the density value corresponds to an escalation in the three output parameters. For instance, at a density of 20% and a temperature of 200°C, the strain, stress, and Young's modulus registered values of 0.010%, 30.46 MPa, and 2774 MPa, respectively. These values exhibited an increase to 0.013%, 39.70 MPa, and 282877 MPa at the same temperature but with a density of 40%.

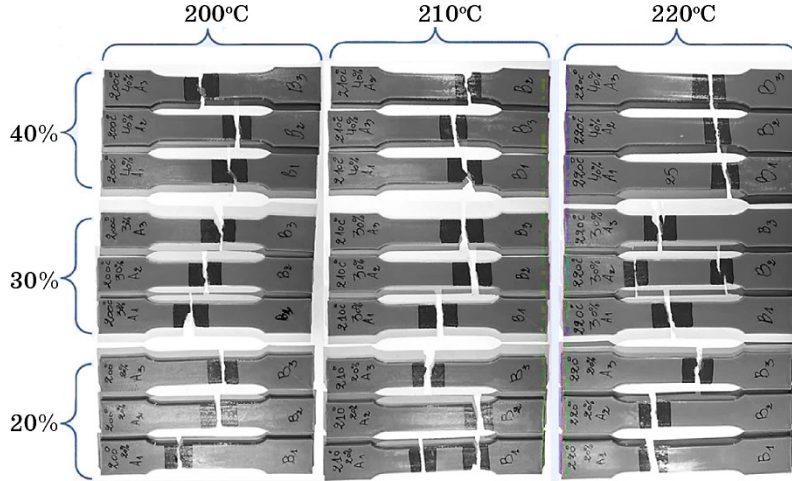


Fig. 6. Samples after testing on tensile test machine.

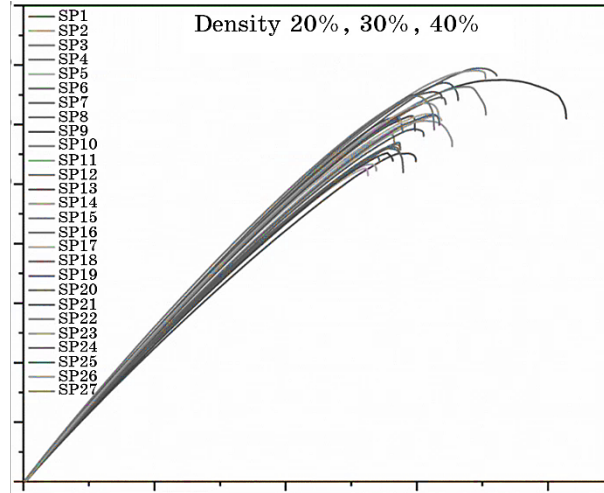


Fig. 7. Stress (MPa)–strain (%) curve for experimental condition (27 specimens).

Conversely, a rise in temperature was correlated with a reduction in strain and stress. Notably, at a temperature of 200°C and a density of 20%, the strain, tensile strength, and Young's modulus were recorded at 0.011%, 32.29 MPa, and 2630.20 MPa, respectively. However, these values experienced a decrease to 0.010% and 30.82 MPa at a temperature of 220°C and a density of 20%, while concurrently, the value of Young's modulus increased to 2785.10 MPa under identical printing conditions.

3.2. ANN Results

Figure 9, *a* illustrates the mean squared error (MSE) values across different epochs (Eq. (3)). A decreased MSE corresponds to an increased accuracy in predictions made by (ANN) model [26, 27]. Notably, during observations, the MSE exhibited significant values, approximately 3.2705 for training, $4.527 \cdot 10^{-1}$ for validation, and 8.1064 for testing. The training and validation processes concluded after 7 iterations, as depicted in Fig. 9, *b*. The optimization was achieved with a validation score of 0.00070939 , observed at the eleventh iteration through gradient analysis. This point was deemed optimal by the artificial neural network:

$$MSE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n |(y_i - \hat{y}_i)|^2, \quad (3)$$

where n is the number of observations in the dataset, y_i is the actual

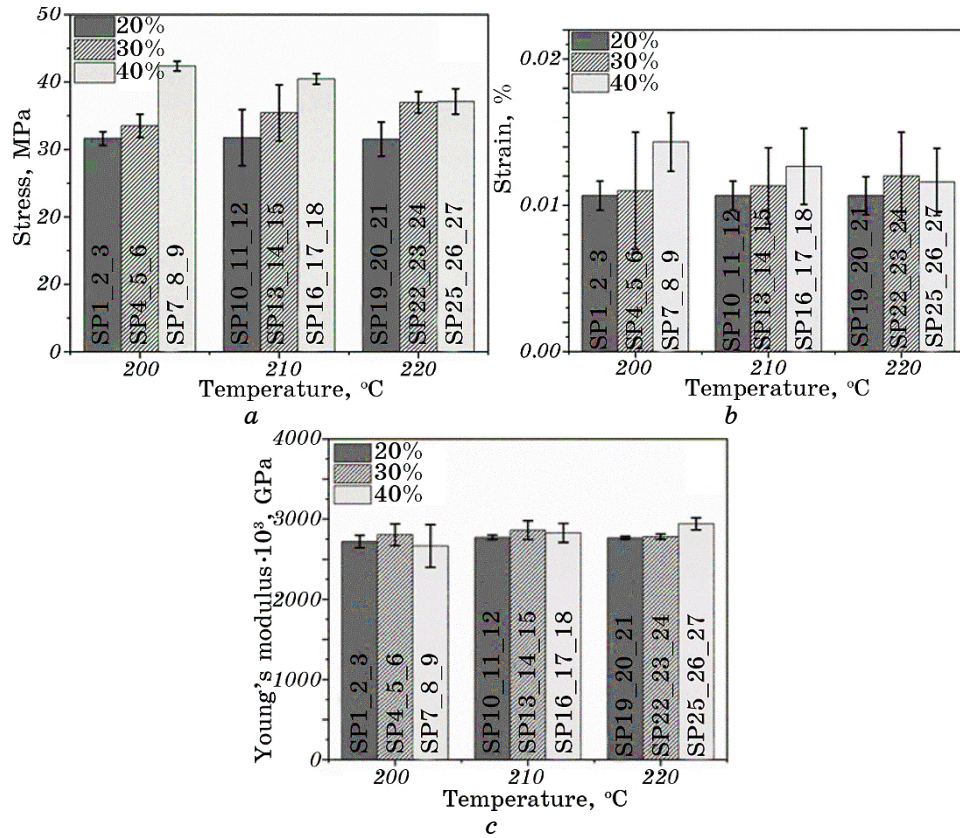


Fig. 8. Stresses (MPa) and strains (%) data for experimental condition (27 specimens).

target value for observation i , and $\hat{y}_i$ is the value predicted by the model for observation i [28].

In contrast, Fig. 10 displays the R coefficient values concerning the target. Achieving minimal error necessitates that the total R value in training, testing, and validation schemes be close to 1 [29]. Remarkably, the ANN model demonstrated a notably high correlation coefficient, reaching 0.960623, 0.94826, and 0.9103 for training, validation, and testing, respectively (Eq. (4)). Table 2 illustrates a comparison between the actual experimental data for the average values of stress, strain, and Young's modulus and the corresponding anticipated values generated by ANN. Evidently, there is a remarkable proximity between the experimental and predicted data, characterized by an exceptionally small error deviation. The average error, quantified at $3 \cdot 10^{-5}$, further emphasizes the close agreement between the observed and forecasted values:

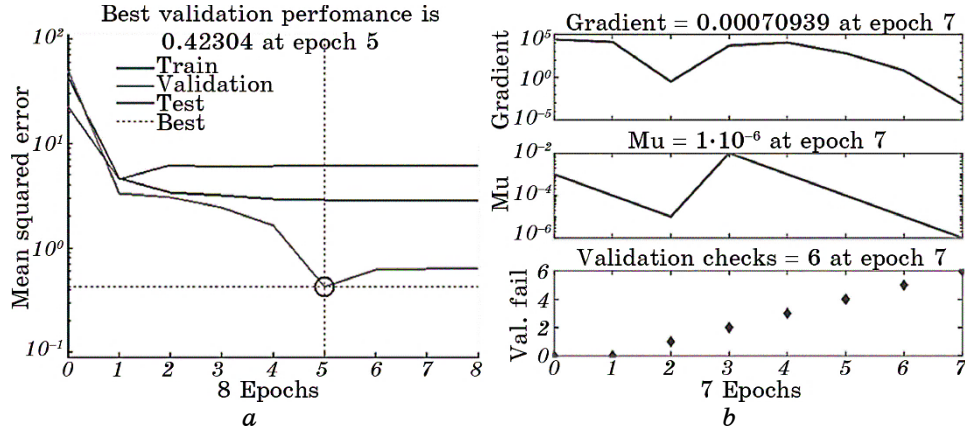


Fig. 9. Cumulative mean squared errors across epochs in network data.

$$R^2 = 1 - \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2 / \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y}_i)^2, \quad (4)$$

where n is the number of observations, y_i is the actual target value for observation i , $\hat{y}_i$ is the predicted value by the model for observation i , and $\bar{y}_i$ is the mean of the actual values.

3.3. Taguchi Results

Figures 11, *a–c* depict the outcomes and recommendations derived from the application of the Taguchi method concerning strain, stress, and Young's modulus values as a function of temperature, density, and weight, respectively. The influence of density on various outcomes is noteworthy, with higher density values correlating to increased strain, stress, and Young's modulus. For instance, at 20%, the corresponding values were 0.011% for strain, 31 MPa for stress, and 2750 MPa for Young's modulus, compared to 0.013%, 40 MPa, and 2800 MPa at 40%. Additionally, temperature exhibited a notable impact on these parameters, as elevated temperatures decreased strain and stress, while Young's modulus saw an increase in values. At 200°C, the values were 0.012%, 36 MPa, and 2730 MPa; at 220°C, they were 0.011%, 35 MPa, and 2850 MPa. Conversely, the weight factor displayed irregular behaviour in the three outputs.

Figures 11, *d–f* depict the residual plots for strain, stress, and Young's modulus. By examining the normal probability plot of residuals, it becomes evident that the points closely align with a straight line, affirming the normal distribution of residuals for all output parameters.

Analysing the histogram of residuals provides insight into the da-

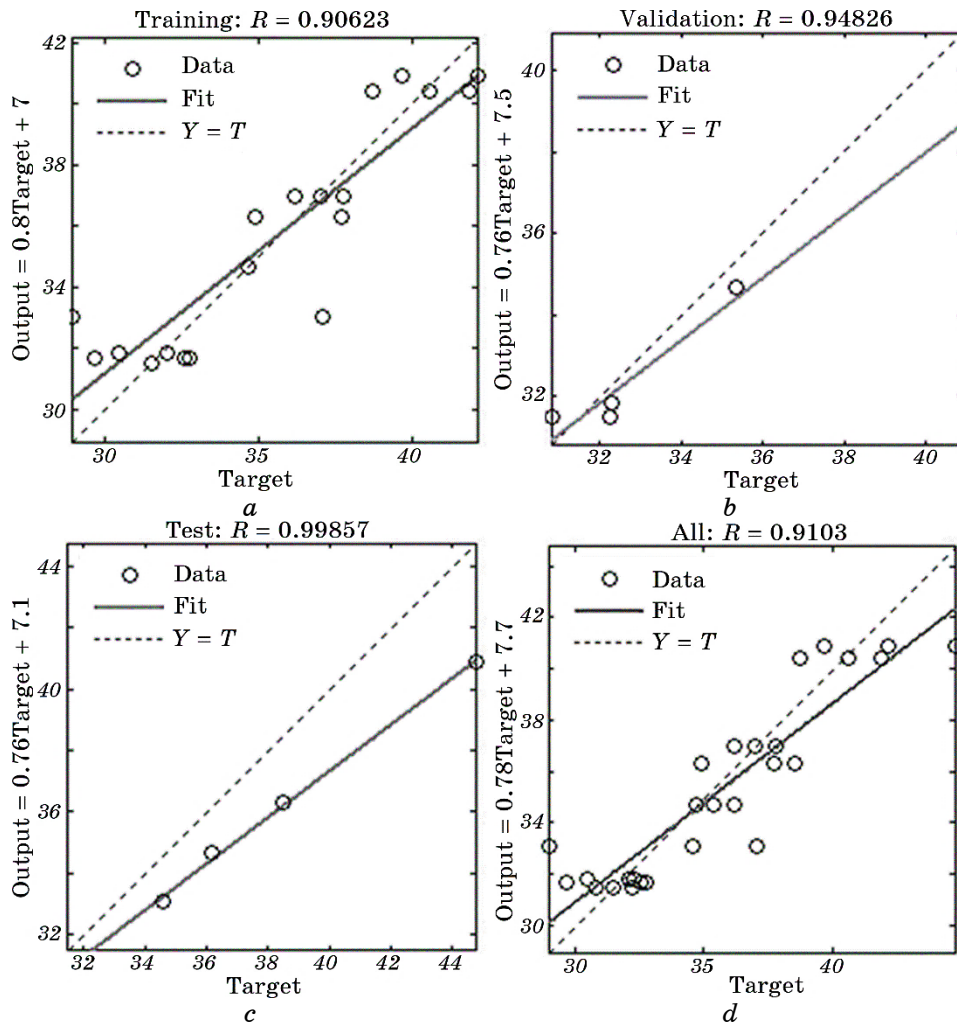


Fig. 10. Neural network regression graph.

ta's general characteristics, encompassing typical values, spread, and shape. Notably, the presence of long tails in the plot suggests significant skewness in the data.

Considering the waste versus order plot, a tool for identifying non-random errors, rapid changes in successive residues' signs reveal a negative correlation in strain and stress. In contrast, Young's modulus exhibits a positive correlation, as the majority of residues share the same sign.

The residuals versus fits plot is expected to display a random pattern of residuals on both sides of zero. However, the observed series of increasing

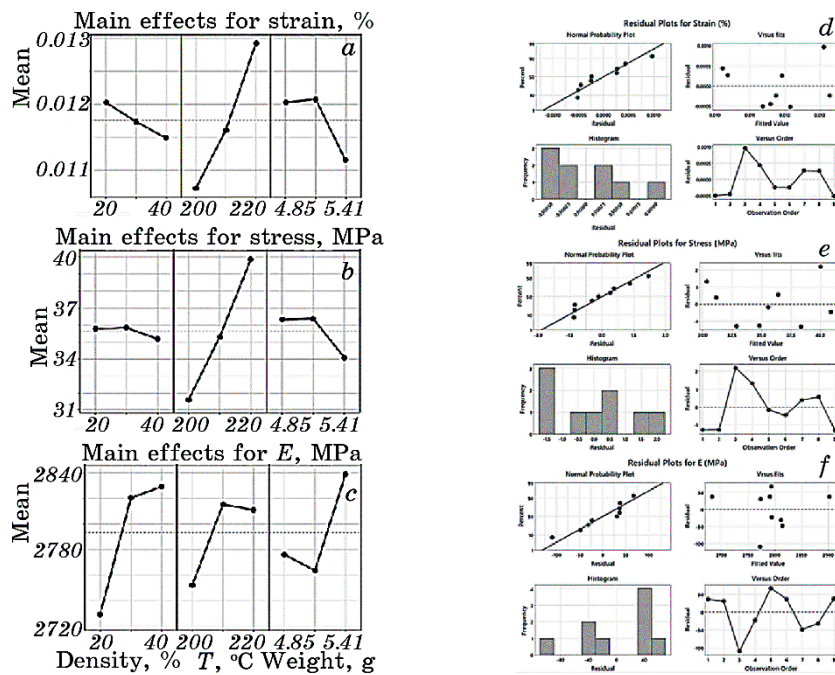


Fig. 11. Plot depicting the primary effects of the input variables and residual plots.

and decreasing points indicates a prevalence of positive residuals over negative ones, pointing towards a non-random nature of the errors.

The optimal parameters were determined by selecting the highest signal-to-noise (S/N) ratio for each factor, chosen to maximize the output parameters, as illustrated in Table 3. The values presented in Table 3 represent average measurements derived from three samples (L9) for each type of PLA sample. The optimal parameters include a maximum strain (ϵ) of 0.0140 MPa and stress (σ) of 42.1891 MPa achieved in run 3, with corresponding S/N ratios of -37.0284 and 32.5040 , respectively. In contrast, a minimum strain of 0.0106 MPa and stress of 31.5246 MPa were attained in run 9, accompanied by S/N ratios of -39.45808 and 29.97301 , respectively. The maximum Young's modulus, reaching 2940.1 MPa, was observed in run 3 with an associated S/N ratio of 69.3672, while the minimum Young's modulus of 2664.5666 MPa was recorded in the initial run, correlating with an S/N ratio of 68.5125. The findings demonstrated a robust alignment between the model and experimental data, showcasing correlation coefficients of 80.75% for stress and 90.13% for strain. However, a comparatively lower value of 50.83% was observed for Young's modulus. Table 4 presents the regression equation for strain, stress, and Young's modulus factor as functions of the three preceding factors.

TABLE 3. Tensile test results incorporating the S/N ratio and tensile predicted values of strain, stress and Young's modulus.

No.	$T, ^\circ\text{C}$	$D, \%$	W, g	ε (exp.), %	σ (exp.), MPa	E (exp.), MPa	S/N (ε)	S/N (σ)	S/N (E)	ε (pr.), %	σ (pr.), MPa	E (pr.), MPa
1	200	20	4.85	0.0108	31.597	2720.0	-39.2	29.9	68.6	0.0112	32.5110	2672.7
2	210	20	5.41	0.0111	33.540	2804.6	-39.0	30.5	68.9	0.0112	33.9823	2797.8
3	220	20	5.14	0.0140	42.189	2664.5	-37.0	32.5	68.5	0.0135	40.8340	2718.6
4	200	30	5.41	0.0106	31.683	2771.4	-39.4	30.0	68.8	0.0101	30.3284	2825.5
5	210	30	5.14	0.0115	35.409	2860.8	-38.7	30.9	69.1	0.0119	36.3227	2813.5
6	220	30	4.85	0.0130	40.401	2828.3	-37.6	32.1	69.0	0.0131	40.8436	2821.4
7	200	40	5.14	0.0106	31.524	2766.6	-39.4	29.9	68.8	0.0107	31.9664	2759.7
8	210	40	4.85	0.0121	36.984	2780.7	-38.2	31.3	68.8	0.0116	35.6299	2834.8
9	220	40	5.41	0.0116	37.045	2940.1	-38.6	31.3	69.3	0.0120	37.9585	2892.8

The obtained results align with Kafshgar *et al.* findings [30], as determined through ANOVA and the Taguchi method. Consistencies were observed in the behaviour of UTS, modulus of elasticity, and yield strength with variations in process parameters. The peak values were identified at an infill density of 60%, extrusion temperature of 220°C, raster angle of 90°, and layer thickness of 0.1 mm. Similarly, elongation at break and toughness exhibited analogous patterns, reaching their highest levels at an infill density of 60%, extrusion temperature of 200°C, raster angle of 45°, and layer thickness of 0.2 mm.

Nugroho *et al.* [31] determined that tensile strength is primarily influenced by infill density, followed by nozzle temperature, infill pattern, and extrusion width. The optimized parameters yielding a tensile strength of 30.52 MPa at a 95% confidence interval were identified as 75% infill density (C3), 215°C nozzle temperature (A3), honeycomb infill (D1), and 0.3 mm extrusion width (B1). Both printing temperature and density emerged as pivotal factors.

Abdulridha *et al.* [32] reported a tensile strength of 55 MPa in their investigation of PLA parts manufactured by FDM printing. The high-

TABLE 4. The regression equation for strain, stress, and Young's modulus factor as functions of the three input factors.

Taguchi response	Regression equation
Strain	$-0.000027 - 0.00256D + 0.00011T - 0.0015551W$
Stress	$-30.2 - 0.0295D + 0.4138T - 3.95W$
Young's modulus	$1470 + 4.97D + 2.92T + 109W$

est value was achieved with 80% density, a grid-filling pattern, layer thickness of 0.25 mm, shell thickness of 0.8 mm, six upper and lower layers, and a filling overlap of 10%.

Teharia *et al.* [33] focused on optimizing PLA-based tensile specimens using FFF technology. Their results indicated that the ideal process parameters for high tensile strength are layer thickness of 200 μm , nozzle temperature of 210°C, speed/feed rate of 50 mm/min, grid filling pattern, and point direction of 0°. The ANN analysis further contributed to identifying optimal parameters, with *R*-values of 95%, indicating minimal error.

4. CONCLUSIONS

This study investigates the tensile strength of a PLA specimen produced through an FDM 3D printer, employing both experimental and statistical analyses with a focus on three process parameters. The experiments were designed using Taguchi and ANN methodologies. The ensuing conclusions are as follows.

Density significantly influences strain, stress, and Young's modulus. Higher density values correlate with increased values for these three output parameters. At 20% density and 200°C, the values were 0.010% strain, 30.46 MPa stress, and 2774 MPa Young's modulus. At 40% density and the same temperature, values increased to 0.013% strain, 39.70 MPa stress, and 282877 MPa Young's modulus.

Rise in temperature led to a reduction in strain and stress. At 200°C and 20% density, values were 0.011% strain, 32.29 MPa stress, and 2630.20 MPa Young's modulus. At 220°C and the same density, strain decreased to 0.010%, stress to 30.82 MPa, while Young's modulus increased to 2785.10 MPa.

Optimization was achieved with a validation score of 0.00070939 at the eleventh iteration through gradient analysis, identified as the optimal point by the ANN.

The ANN model demonstrated high correlation coefficients of 0.960623, 0.94826, and 0.9103 for training, validation, and testing, respectively. Remarkably close agreement between experimental and predicted data is evident, characterized by an exceptionally small average error deviation of $3 \cdot 10^{-5}$.

Optimal parameters were determined by selecting the highest signal-to-noise (*S/N*) ratio for each factor to maximize the output parameters. The highest strain (0.0140 MPa) and stress (42.1891 MPa) were achieved in run 3 with *S/N* ratios of -37.0284 and 32.5040, respectively. The lowest strain (0.0106 MPa) and stress (31.5246 MPa) were attained in run 9 with *S/N* ratios of -39.45808 and 29.97301, respectively. Maximum Young's modulus (2940.1 MPa) was observed in run 3 with an *S/N* ratio of 69.3672, while the minimum (2664.5666 MPa)

was recorded in the initial run with an S/N ratio of 68.5125.

This contribution was created under the support of the PRFU Project A11N01UN280120230002 organized by the Algerian Ministry of Higher Education and Scientific Research.

REFERENCES

1. P. Wu, J. Wang, and X. Wang, *Automation in Construction*, **68**: 21 (2016).
2. A. Su and S. J. Al'Aref, *3D Printing Applications in Cardiovascular Medicine* (Eds. J. K. Min, B. Mosadegh, S. Dunham, and S. J. Al'Aref) (Boston: Academic Press: 2018), ch. 1, p. 1.
3. T. D. Ngo, A. Kashani, G. Imbalzano, K. T. Q. Nguyen, and D. Hui, *Composites B: Eng.*, **143**: 172 (2018).
4. I. J. Petrick and T. Simpson, *Research-Technology Management*, **56**, Iss. 6: 12 (2013).
5. M. Attaran, *Business Horizons*, **60**, Iss. 5: 677 (2017).
6. J. Gardan, *Int. J. Production Research*, **54**, Iss. 10: 3118 (2016).
7. B. Rochlitz and D. Pammer, *Periodica Polytechnica Mech. Eng.*, **61**, No. 4: 282 (2017).
8. A. A. Taylor, E. L. Freeman, and M. J. C. van der Ploeg, *Ecotoxicology and Environmental Safety*, **207**: 111458 (2021).
9. K. V. Wong and A. Hernandez, *ISRN Mech. Eng.*, **2012**: 208760 (2012).
10. G. Kynya and P. Ficzer, *Periodica Polytechnica Mech. Eng.*, **67**, No. 2: 143 (2023).
11. D. Ali, A. F. Huayier, and A. Enzi, *Advances in Science and Technology*, **17**, Iss. 4: 130 (2023).
12. M. S. Meiabadi, M. Moradi, M. Karamimoghadam, S. Ardabili, M. Bodaghi, M. Shokri, and A. H. Mosavi, *Polymers*, **13**, Iss. 19: 3219 (2021).
13. T. Yao, Z. Deng, K. Zhang, and S. Li, *Composites B: Eng.*, **163**: 393 (2019).
14. M. M. Hanon, J. Dobos, and L. Zsidai, *Procedia Manufacturing*, **54**: 244 (2021).
15. *D638-14. Standard Test Method for Tensile Properties of Plastics* (ASTM international: 2014).
16. M. Hassan, A. K. Mohanty, and M. Misra, *Mater. Design*, **237**: 112558 (2023).
17. X. Pang, X. Zhuang, Z. Tang, and X. Chen, *Biotechnol. J.*, **5**, Iss. 11: 1125 (2010).
18. I. C. Noyan and J. B. Cohen, *Residual Stress: Measurement by Diffraction and Interpretation* (Springer: 2013).
19. G. R. Yang and X.-J. Wang, *Neuron*, **107**, Iss. 6: 1048 (2020).
20. I. Goodfellow, Y. Bengio, and A. Courville, *Deep Learning* (MIT Press: 2016).
21. T. Hastie, R. Tibshirani, and J. Friedman, *The Elements of Statistical Learning: Data Mining, Inference, and Prediction* (Springer: 2009), vol. 2.
22. A. Freddi and M. Salmon, *Design Principles and Methodologies. From Conceptualization to First Prototyping with Examples and Case Studies* (Springer: 2019).
23. S. Salam, T. Choudhary, A. Pugazhendhi, T. N. Verma, and A. Sharma, *Fuel*, **279**: 118469 (2020).
24. R. Chaudhari, J. J. Vora, A. Pramanik, and D. M. Parikh, *Spark Erosion Machining* (Eds. N. K. Jain and K. Gupta) (Boca Raton: CRC Press: 2020), p. 190.
25. M. Mia, P. R. Dey, M. S. Hossain, Md. T. Arafat, Md. Asaduzzaman,

- Md. S. Ullah, and S. M. T. Zobaer, *Measurement*, **122**: 380 (2018).
26. R. Benyettou, S. Amroune, S. Mohamed, Y. Seki, and A. Dufresne, *J. Natural Fibers*, **19**, Iss. 17: 15902 (2022).
27. A. Ansari, I. S. Ahmad, A. A. Bakar, and M. R. Yaakub, *IEEE Access*, **8**: 176640 (2020).
28. R. Benyettou, S. Amroune, M. Slamani, and A. Kilic, *Academic J. Manufacturing Eng.*, **21**: 97 (2023).
29. M. Zamouche, H. Tahraoui, Z. Laggoun, S. Mechat, R. Chemchmi, M. I. Kanjal, A. Amrane, A. Hadadi, and L. Mouni, *Processes*, **11**, Iss. 2: 364 (2023).
30. A. R. Kafshgar, S. Rostami, M. R. M. Aliha, and F. Berto, *Procedia Structural Integrity*, **34**: 71 (2021).
31. A. W. Nugroho and C. Budiantoro, *J. Energy Mech. Mater. Manufacturing Eng.*, **4**, No. 1: 29 (2019).
32. H. H. Abdulridha and T. F. Abbas, *Adv. Sci. Technol. Research J.*, **17**, Iss. 6: 49 (2023).
33. R. Teharia, R. M. Singari, and H. Kumar, *Mater. Today: Proc.*, **56**, Pt. 6: 3426 (2022).

PACS numbers: 06.60.Vz, 52.77.Fv, 61.50.Ks, 68.35.bd, 68.37.Hk, 81.20.Ev, 81.20.Vj

The Efficiency of Encapsulation of the Functional Component of the Welding Wire Charge on Changing the Structure and Properties of the Metal of the Deposited Layers

V. V. Peremit'ko, V. I. Sukhomlyn, A. V. Yevdokymov,
and A. A. Holyakevych*

Dniprovsky State Technical University,
2 Dniprobudivska Str.,
UA-51918 Kam'yanske, Ukraine
**TM.WELTEC LLC,*
15 Kazymyr Malevych Str.,
UA-03150 Kyiv, Ukraine

Based on the conducted experiments, the effectiveness of the application of ferrovanadium from the composition of the powdered wire charge in the form of dispersed particles previously covered with a protective layer of plastic, during arc welding has been proven. We used VELTEK-N620 powdered wire with a diameter of 2.0 mm and experimental wires close in chemical composition to the mentioned standard brand, in which powdered fluoroplastic is used to cover ferrovanadium particles (5 g and 50 g of hydrocarbon per 120 g of ferrovanadium). The addition of coated modifiers to the charge did not worsen the arc burning; spattering of the molten metal during the transition to the liquid bath is reduced to moderate. In the case of surfacing the layers with the use of original flux-cored wires, differences are recorded. When using fluoroplastic in the amount of 5 g per 120 g of ferrovanadium, a decrease in the content of the majority of alloying components is observed due to an increase in the temperature of the bath and the time of its existence. Increas-

Corresponding author: Valeriy Viktorovych Peremit'ko
E-mail: vperemitko1965@gmail.ua

Citation: V. V. Peremit'ko, V. I. Sukhomlyn, A. V. Yevdokymov, and A. A. Holyakevych, The Efficiency of Encapsulation of the Functional Component of the Welding Wire Charge on Changing the Structure and Properties of the Metal of the Deposited Layers, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **47**, No. 5: 523–533 (2025). DOI: [10.15407/mfint.47.05.0523](https://doi.org/10.15407/mfint.47.05.0523)

© Publisher PH “Akadempriodyka” of the NAS of Ukraine, 2025. This is an open access article under the CC BY-ND license (<https://creativecommons.org/licenses/by-nd/4.0>)

ing the consumption of fluoroplastic to 50 g ensured preservation from evaporation and increased the presence of vanadium and chromium in the applied layer. Pearlite itself is not found in the structure of the deposited layer. The reason is in the increased presence of carbide-forming elements, which bound carbon into carbide compounds. The reduced amount of unbound carbon in the austenite also prevents the formation of martensite on further cooling. The layer of the base-metal bordering the fusion line with a changed carbon content, when using a wire with the addition of 5 g of fluoroplastic to the charge, had a reduced width of 120 μm , and with the addition of 50 g of fluoroplastic, it is much larger, up to 800 μm . The last fact can be considered as the consequence of an increase in the specific of the carbon particles transferred to the metal to be welded, as well as in the increase in the temperature of the melt and the time of its intensive contact with the base during cooling that leads to an increase in the stability of austenite and intensive diffusion of carbon. Due to the diffusion of carbon into the base metal, the ratio between the pearlite and ferrite components changed that gave indirectly grounds for estimating the carbon content in the mentioned layer at the level of 0.4–0.45 wt. %. Carbides are present in large quantities within all zones. Local accumulations of vanadium carbides are found, mainly at the locations of boundaries. In the zones of bainite transformation from austenite, no unidirectional structure is observed that indicates an unchanged crystallographic connection between these components. That is, the orientation of bainite subcrystals is not related to heat dissipation, but to the thermodynamics of the hardening process. The presence of zones of weld metal in the macrodimension with a directional structure is evaluated positively. It is expected that this will help to increase the wear resistance of the surface layer. The lack of crystallographic orientation of bainite is similarly perceived that acquires additional plasticity and resistance to destruction, when external forces are applied.

Key words: arc surfacing, powdered wire, ferrovanadium, covering particles with plastic, high-alloy steel, changing the structure.

На підставі проведених експериментів доведено ефективність внесення під час дугового нагрівання ферованадію зі складу шихти порошкового дроту у вигляді дисперсних частинок, попередньо покритих захисним шаром пластику. Застосовували порошковий дріт марки ВЕЛТЕК-Н620 діаметром у 2,0 мм і дослідні дроти, наближені за хемічним складом шихти до згаданої стандартної марки, в яких для покриття частинок ферованадію використовували порошкоподібний фторопласт (5 г і 50 г вуглеводню на 120 г ферованадію). Додавання модифікаторів з покриттям до шихти не погіршило горіння дуги; розбризкування нагрітого металу під час переходу у рідку ванну зменшувалося до помірного. У випадку нагрівання шарів із застосуванням оригінальних порошкових дротів зафіксовано відмінності. З використанням фторопласту у кількості 5 г на 120 г ферованадію спостерігається пониження вмісту переважної більшості легувальних компонентів через зростання температури ванни та часу підтримки останньої. Збільшення витрати фторопласту до 50 г забезпечило збереження від випаровування та зростання присутності у нанесеному шарі Ванадію та Хрому. У структурі нагрітого шару власне перліту не

виявлено. Причиною стала підвищена присутність елементів-карбідоутворювачів, які зв'язали Карбон у карбідні сполуки. Зменшений вміст незв'язаного Карбону в аустеніті також запобігає утворенню мартенситу за подальшого охолодження. Суміжний з лінією стоплення шар основного металу зі зміненим вмістом Карбону за використання дроту з додаванням 5 г фторопласту до шихти має зменшену ширину у 120 мкм, а з додаванням 50 г фторопласту — значно більшу, до 800 мкм. Останній факт можна розцінити, як наслідок збільшення питомої частки Карбону, що переходить до металу, який нагрівається, а також зростання температури розтопу та часу його інтенсивного контактування з основою під час остигання, що приводить до збільшення стійкості аустеніту й інтенсивної дифузії Карбону. Через дифузії Карбону в основний метал співвідношення між перлітними та феритними складовими змінилося, що опосередковано дає підстави оцінювати вміст Карбону у згаданому прошарку на рівні 0,4–0,45 мас.%. Карбіди присутні у великій кількості у всіх зонах. Виявляються місцеві скупчення карбідів Ванадію переважно в місцях розташування меж. У зонах бейнітного перетворення з аустеніту не спостерігається однонаправлена структура, що свідчить про незмінний кристалографічний зв'язок між цими складовими. Тобто направленість бейнітних субкристалів пов'язується не з тепловідводом, а з термодинамікою процесу твердіння. Наявність у макровимірі зон нагрітого металу з направленою будовою оцінюється позитивно. Очікується, це буде сприяти підвищенню опірності поверхневого шару щодо зносу. Аналогічно сприймається й відсутність кристалографічної направленості бейніту, який від цього набуває додаткової пластичності та стійкості щодо руйнування під час прикладання зовнішніх сил.

Ключові слова: дугове нагрівання, порошковий дріт, ферованадій, покриття частинок пластиком, високолегована криця, зміна структури.

(Received 25 July, 2024; in final version, 26 November, 2024)

1. INTRODUCTION

Intensive wear of contact surfaces is typical for a wide range of machines and mechanisms used in mining, metallurgy, construction, *etc.* The resource of the corresponding parts is provided due to the use in their manufacture of materials with high resistance to various types of abrasive wear. Restoration and/or surface strengthening of working surfaces is performed using chemical-thermal treatment [1], spraying [2–4] and, most often, electric arc surfacing [5].

The experience of using high-alloy high-carbon steels and white cast irons containing strong carbides in the structure is long-standing. Traditionally, the mentioned materials are alloyed with chromium, titanium, molybdenum, and vanadium [6–9]. The result is an increase in the service life of friction contact pairs by 3–15 times compared to ordinary carbon steels [10].

Given the price of the mentioned alloying elements, attention should be paid to the main carbide-forming metals that are chromium, and vanadium, as increasing their content in cast iron to 1% increases wear resistance [11]. Depending on the conditions of crystallisation and the amount of carbon, chromium forms carbides of different compositions (Cr_3C_2 , Cr_7C_3 , Cr_{23}C_6) in alloys. Vanadium stabilises carbides and promotes the formation of long dendrites that intertwine with each other. This influence of vanadium on the structure contributes to an increase in impact toughness and hardness [12].

The nature of the load taken by the parts makes it necessary to combine the material of contact surfaces with high strength and appropriate viscosity [13]. A significant increase in the mechanical and operational properties of steels and alloys can be achieved by modification and microalloying [14]. In the case of electric arc welding, this is carried out by changing the composition of the materials used, in particular, the charge of powdered tapes or wires [15]. The specified scheme, however, leads to inevitable losses of the components of the charge during the passage through the arc gap. Therefore, the improvement of the scheme of adding additional components to the surfacing bath is an important reserve in increasing the efficiency of the application of this particular method of modification.

This study is devoted to the effectiveness of coating the modifier particles with a layer of plastic on the changes in the structure and properties of the Fe–Cr–C alloy layer, which is applied by electric arc welding with flux-cored wire.

It was previously found that the addition of plastic to the composition of the charge of the powdered welding tape causes a slowdown in the crystallisation of the applied layers, the active diffusion of carbon to the areas of crystallisation of primary chromium carbides, and partial depletion of adjacent austenite to cementite [16].

2. EXPERIMENTAL METHODOLOGY

For the experiments, samples of 09G2S low-alloy steel with a size of 150×250×8 mm were used, on which powdered wires, similar in chemical composition to the VELTEK-H620 brands with a diameter of 2.0 mm (the composition of the metal welded into a copper water-cooled crystallizer, wt.%: C—0.8, Mn—3.5, Si—2.5, Cr—4.5, Mo—3.5, V—0.8, B—0.7, Ti—0.9, S—0.015, P—0.017) a wear-resistant metal layer with a thickness of 4–5 mm was deposited. The difference is that the ferrovanadium particles were previously covered with a layer of plastic.

Powdered fluoroplastic (5 g and 50 g of hydrocarbon per 120 g of ferrovanadium) was used for coating. Drying was carried out in an electric oven at 220°C with a holding time of 15 minutes followed by

sieving through a 400- μm sieve for uniform distribution and absence of moisture. Later, ferrovanadium with fluoroplastic was added to the other part of the wire charge in the mixer.

For comparison, surfacing was also carried out with a standard VELTEK-N620 wire (without covering the modifiers with plastic).

Electric arc surfacing was carried out in automatic mode ($I_{\text{н}} = 220\text{--}250\text{ A}$, $U_{\text{д}} = 25\text{--}28\text{ V}$, $v_{\text{н}} = 220\text{ mm/min}$) in two rounds, on the 'Krystal PNP-2.5' portal type installation.

A spectral analysis of the chemical composition of the deposited metal (SPECTRO MAXx optical emission spectrometer) and metallographic studies of the obtained structures using electron microscopy (REM-106i) were performed.

3. RESULTS AND THEIR DISCUSSION

The addition of coated modifiers to the charge did not impair arc burning, which remained stable for all experimental wires. The transfer of the molten electrode metal ranged from large droplets to jets. Spatter was reduced to moderate when using fluoroplastic as a coating. Surface slag formation is almost absent or insignificant, and the formation of rollers is uniform.

A comparison of the chemical composition of the metal deposited using standard and experimental flux-cored wires (Table 1) revealed the following changes.

In the case of using fluoroplastic to cover particles of the charge components (5 g per 120 g of ferrovanadium, sample No. 2), a decrease in the content of the vast majority of alloying components is observed, which occurred, obviously, due to an increase in the temperature of the bath and the time of its existence. Increasing the consumption of fluoroplastic to 50 g (sample No. 3) ensured preservation from evaporation and increased the presence of vanadium and chromium in the applied

TABLE 1. Chemical analysis of the deposited layer (wt.%).

№	Material brand	C	Mn	Si	P	S	Cr	Ni	Ti	Mo	B	V
1	N-620 without plastic	0.85	2.96	1.57	0.027	0.029	3.25	0.04	0.56	2.12	0.62	0.66
2	N-620 with 5 g of fluoroplastic	0.80	2.77	1.46	0.027	0.033	3.09	0.04	0.51	1.98	0.63	0.51
3	N-620 with 50 g of fluoroplastic	0.86	2.55	1.41	0.026	0.031	3.50	0.04	0.43	1.86	0.57	0.75

layer.

The surfacing performed using VELTEK-N-620 wire and experimental wires based on its charge revealed similar changes.

Even though according to the chemical composition (Table 1), the molten metal must have eutectoid steel (80H3G2M2F); pearlite itself was not found in the structure of the applied layer. The reason was the increased presence of carbide-forming elements that bound carbon into carbide compounds. The reduced amount of unbound carbon in the austenite also prevented the formation of martensite on further cooling.

In the fusion zone, on the side of the base metal, there was undermelting of the metal, followed by the breakdown of austenite by the pearlite mechanism. As a result of complete recrystallization, layering disappeared, and a boundary layer of ferritoperlite structure, typical for steels with $C \cong 0.6$ wt.%, was formed. With distance to the depth of the base, the presence of carbon decreases.

When using a standard VELTEK-N-620 powdered wire, a layer of molten metal bordering the fusion line with a width of $0.2\text{--}0.3\text{ }\mu\text{m}$ contained bainite packets with individual vanadium carbides (Fig. 1, *a*) due to carbon depletion. Above, on the boundaries of the former austenite grains, carbides fell out, which ensured the formation of a shell structure.

At a distance of 0.85 mm (Fig. 1, *b*) from the fusion line, the deposited layer of the metal had a typical structure of an equilibrium type, carbide precipitates were recorded at the grain boundaries, and low-carbon bainite ($\cong 0.3\text{--}0.4$ wt.% C) was found within the grain boundaries.

When moving away from the fusion zone, the grain size increased, probably due to slower cooling and longer exposure at high temperatures.

It is noteworthy that upon further approach to the surface, at a distance of 4.54 mm (Fig. 1, *c*), there was partial absence of carbide boundaries and a thickening of the latter in certain areas. Morphologically, this fact could be considered as the remains of the dendritic structure that existed at the stage of primary crystallisation.

At a distance of 6.16 mm from the fusion line, the grain became finer; the boundaries were porous and thickened. A significant zonal accumulation of vanadium carbides was recorded. Probably, there were they who caused the increase in grain germs. Particles of carbides gravitated to the boundaries, partially fixing at them.

With further approach to the surface, a similar structure was preserved, but the proportion of dendritic areas increased, which reached a maximum at a distance of $0.76\text{ }\mu\text{m}$ from the surface of the applied layer (Fig. 1, *d*)

In the case of depositing the layers with the use of original flux-cored wires, differences were recorded. The layer of the base metal

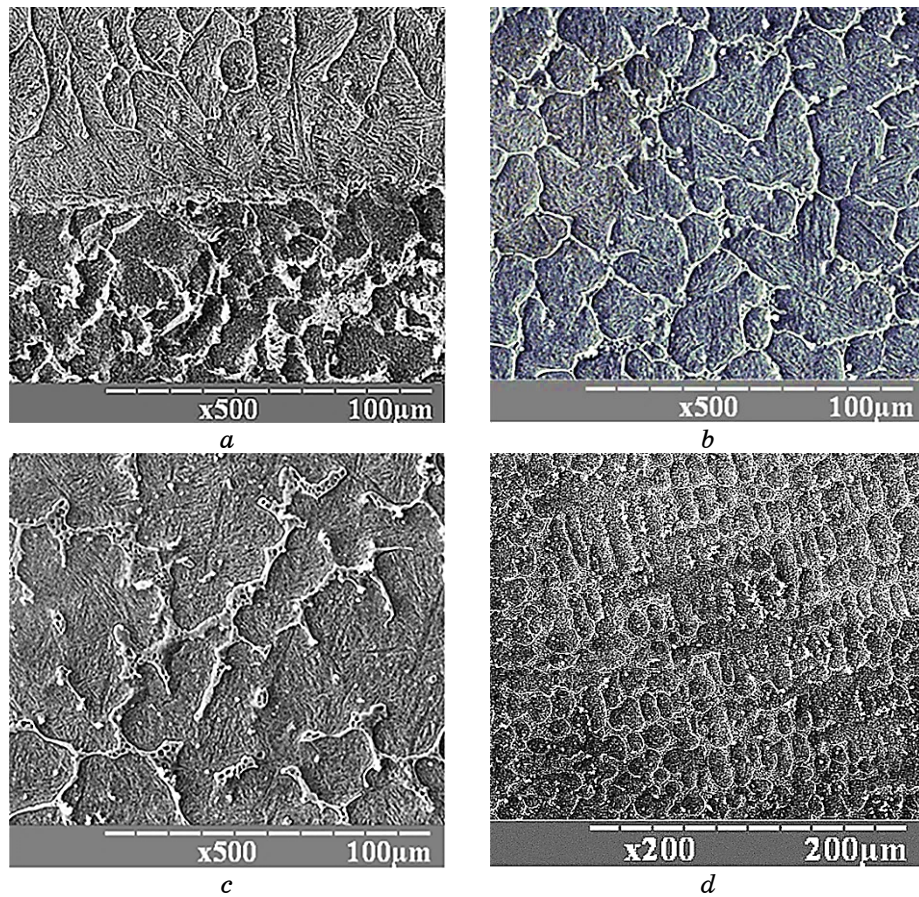


Fig. 1. The structure of the weld metal, at different distances from the fusion line; sample No. 1.

bordering the fusion line with a changed carbon content when using a wire with the addition of 5 g of fluoroplastic to the charge (sample No. 2) had a reduced width (120 μm , Fig. 2, *a*), and with the addition of 50 g of fluoroplastic, it had the maximum width, significantly larger, up to 800 μm (sample No. 3, Fig. 2, *b*, *c*).

The last fact could be regarded as the consequences of an increase in the specific fraction of carbon that passes to the metal that was being welded, as well as an increase in the temperature of the melt and the time of its intense contact with the base during cooling. The above led to an increase in the stability of austenite and intensive diffusion of carbon. Due to the diffusion of carbon into the base metal, the ratio between pearlitic and ferritic components changed, which indirectly gave grounds for estimating the carbon content in the mentioned layer

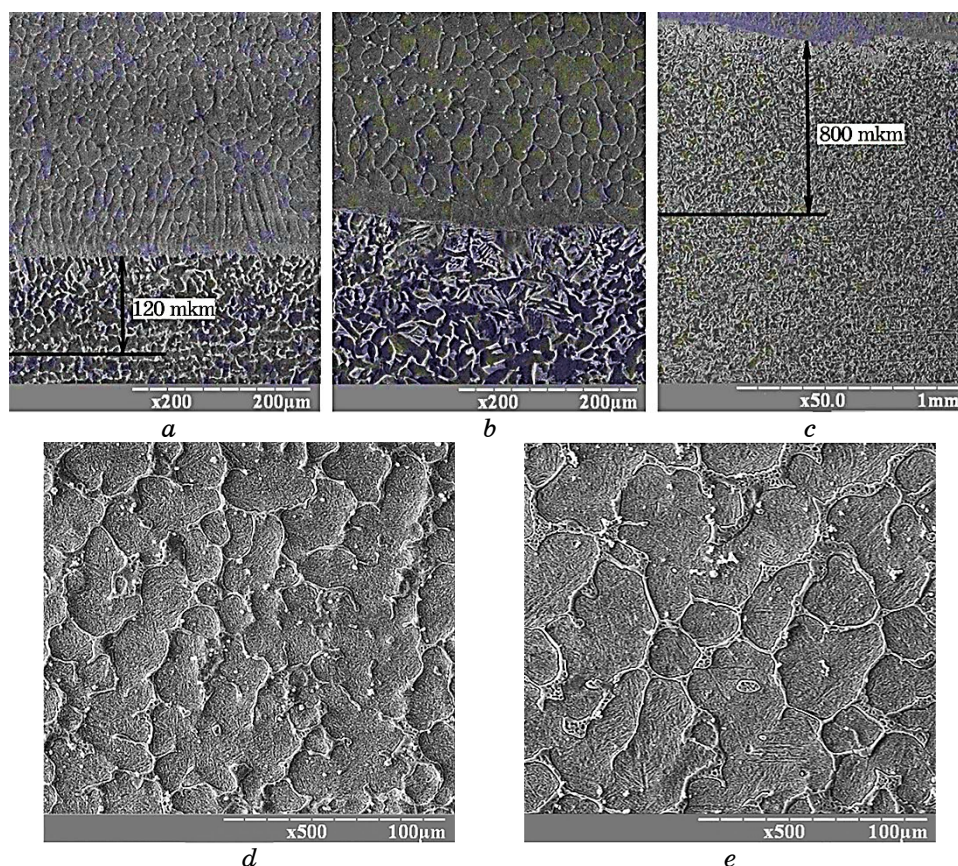


Fig. 2. Thermal influence zone of samples No. 2 (*a*) and No. 3 (*b*, *c*), at a distance of 1.07 mm from the fusion zone of No. 2 (*d*) and No. 3 (*e*).

at the level of 0.4–0.45 wt.% (Fig. 2, *b*). In sample No. 2, where the amount of carbon transferred due to diffusion was much smaller, the width of the layer was also reduced, and the ratio of ferrite and pearlite corresponded to the carbon content at the level of 0.2–0.25 wt.% (Fig. 2, *a*). In the case of a significant addition of plastic (sample No. 3), not only an increase in the presence of carbon in the metal but also the presence of silicon, chromium and vanadium was recorded. This determined the stability of austenite even at a decrease in temperature. As a result, complete recrystallization takes place, which was confirmed by the expansion of the crushed grain zone.

At a distance of more than 1.07 mm from the fusion zone, very weakly directed crystallisation was observed on sample No. 2 (Fig. 2, *d*). The structure was represented by balanced cells, and the thickness of the boundaries was thinned—as a result of the increased

cooling rate. At approximately the same distance on sample No. 3, the crystallisation mostly also had a weak directionality, however, the grains located higher acquired a more regular equilibrium shape and were doubled in size (Fig. 2, *e*).

At further distance from the fusion zone ($h \cong 3.0$ mm) on sample No. 2, a distinct directionality of grains was observed (Fig. 3, *a*), weakly repeated at $h \cong 6$ mm (Fig. 3, *c*) and disappearing when approaching the surface at a distance of 1.0 mm (Fig. 3, *d*). Such a picture could be explained by the fact of successive application of two layers. In the case of surfacing of sample No. 3, the mentioned orientation of the crystals was less pronounced, but the size of the grains was twice as large (Fig. 3, *b*). This was probably due to the previously mentioned delayed heat dissipation. At a distance $h \cong 6$ mm from the TIZ in sample No. 3 there was no directionality of crystallisation, but the grain size was the

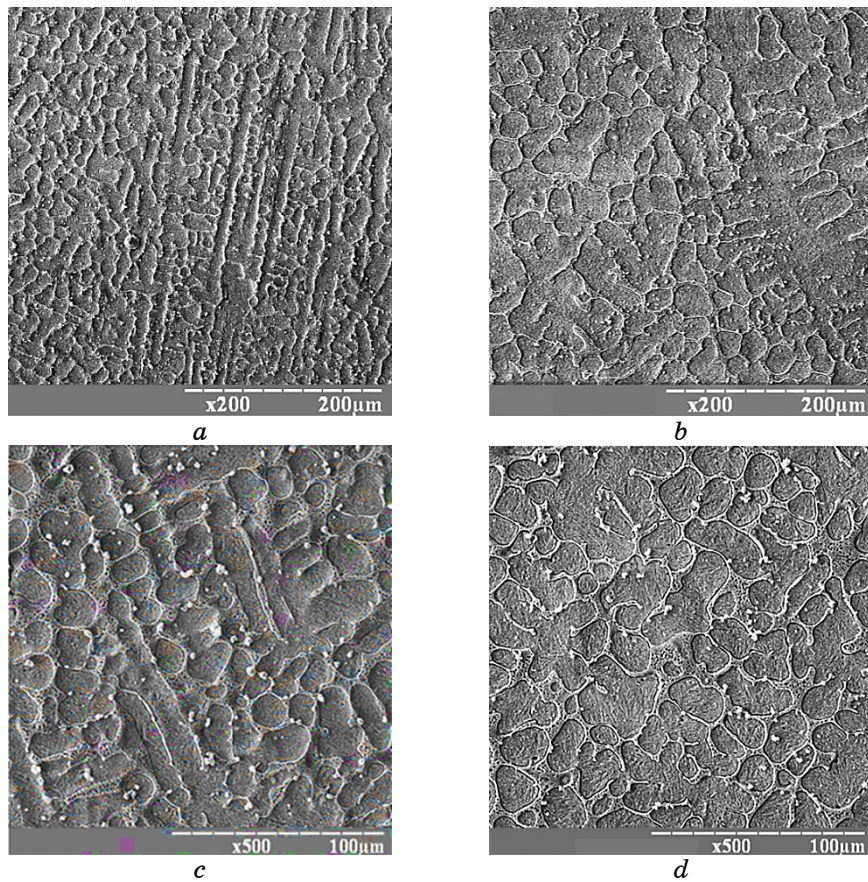
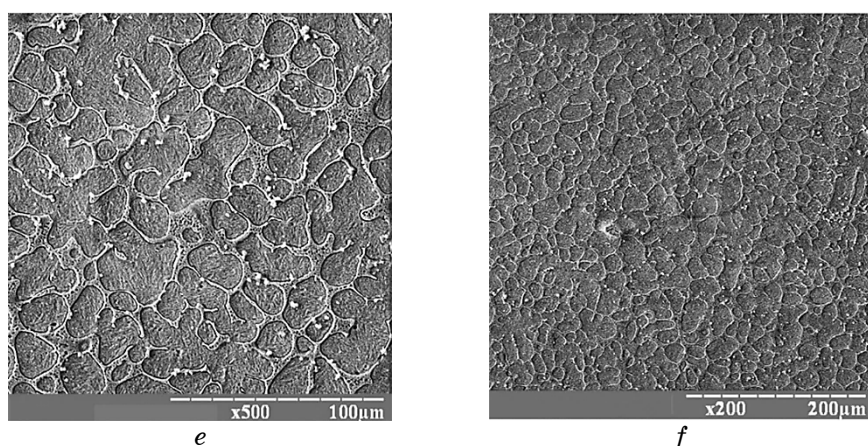


Fig. 3. Differences in the structure of the layers deposited with original flux-cored wires (sample No. 2 (*a*, *c*, *e*); sample No. 3 (*b*, *d*, *f*)).



Continuation **Fig. 3.**

same as in sample No. 2 (Fig. 3, *d*), and at a distance of 1.0 mm from the surface in this case the structure became partially dendritic (Fig. 3, *f*).

Carbides were present in large quantities in all zones. This was because they were in a liquid melt. The latter affected the size of the grains, their orientation, and the thickness of the carbide layers. Local accumulations of vanadium carbides were found, mainly at the locations of borders. In the zones of bainite transformation from austenite, no unidirectional structure was observed, which indicates an unchanged crystallographic connection between these components. That is, the orientation of bainite subcrystals was not related to heat dissipation, but to the thermodynamics of the hardening process.

The presence of zones of weld metal with a directional structure in the macro dimension was evaluated positively because it would contribute to increasing the resistance of the surface layer to wear. The lack of crystallographic orientation of bainite is similarly perceived, which acquires additional plasticity and resistance to destruction when external forces are applied.

4. CONCLUSIONS

1. The effectiveness of the scheme for regulating the composition, structure, and properties of the deposited metal due to the preliminary coating of the functional components of the flux-cored wire charge for its application has been experimentally confirmed.
2. It has been established that the addition of plastic to the welding wire charge contributes to the preservation of carbides and causes a thermal effect, slowing down the cooling rate of the heated layer and

increasing the time the metal stays at high temperatures.

3. The use of plastic to form a buffer layer on the particles of the charge ensures the grinding of the structural components of the deposited metal, its saturation with carbon and the formation of a structure favourable for wear resistance, with zones of preserved directionality of dendrites and finely dispersed equilibrium bainite within the grains.

REFERENCES

1. O. G. Cherneta, V. I. Sukhomlyn, and S. V. Ralinichenko, *Mathematical Modeling*, **1**, No. 40: 194 (2019) (in Ukrainian).
2. Yu. S. Borisov, Yu. A. Kharlamov, S. L. Sidorenko, and Ye. N. Ardatovskaya, *Gazotermicheskie Pokrytiya iz Poroshkovykh Materialov* [Gas Thermal Coatings from Powder Materials] (Kiev: Naukova Dumka: 1987) (in Russian).
3. T. Terajima, F. Takeuchi, K. Nakata, S. Adachi, K. Nakashima, and T. Igarashi, *J. Alloys Comd.*, **504**, Iss. 1: 288 (2010).
4. A. V. Hruzevych and V. V. Shvets, *The Paton Welding J.*, **10**: 40 (2021) (in Ukrainian).
5. V. I. Pokhmurskyi, M. M. Student, V. M. Dovhunyk, H. V. Pokhmurska, and I. Y. Sydorak, *Ehlektroduhovi Vidnovni ta Zakhysni Pokryttya* [Electric Arc Restorative and Protective Coatings] (Lviv: National Academy of Sciences of Ukraine, Physical-Mechanical Institute named after G. V. Karpenko: 2005), p. 190 (in Ukrainian).
6. M. V. Kindrachuk, V. Z. Kutsova, M. A. Kovzel, and O. V. Tisov, *Friction and Wear Problems*, **1**, No. 70: 112 (2016).
7. V. A. Masliuk, Ye. S. Karaimchuk, and A. A. Bondar, *The Scientific Technical Journal Metal Science and Treatment of Metals*, **24**, No. 2: 44 (2018) (in Ukrainian).
8. V. I. Tikhonovich, V. P. Havrilyuk, V. V. Tikhonovich, and A. N. Hripachevskiy, *Metallurgy and Metal Processing*, **3**: 16 (2003).
9. Yen Chien Lung, Fu Je Chen, and Yung Ning Pan, *Adv. Mater. Res.*, **859**: 64 (2013).
10. M. N. Brykov, M. I. Andryushchenko, and R. A. Kulikovskiy, *New Materials and Technologies in Metallurgy and Mechanical Engineering*, **2**: 59 (2006) (in Russian).
11. H. Ye. Fedorov, M. M. Yamshynskyi, Ye. O. Platonov, A. Yu. Kuzmenko, and K. S. Radchenko, *Scientific News of NTUU 'KPI'*, **1**: 95 (2009) (in Ukrainian).
12. G. V. Ksendzik, *Primenenie Iznosotoikikh Chugunov dlya Naplavki Stalnykh Detaley* [The Use of Wear-Resistant Cast Irons for Surfacing Steel Parts] (Kiev: Machinery: 1968) (in Russian).
13. M. M. Brykov, *Metalozn. Obrobka Met.*, **26**: 54 (2020) (in Ukrainian).
14. A. A. Babinets and I. O. Ryabtsev, *The Paton Welding J.*, **10**: 3 (2021) (in Ukrainian).
15. O. P. Voronchuk, O. P. Zhudra, T. V. Kaida, O. V. Petrov, L. M. Kapitanchuk, and I. L. Bogaichuk, *The Paton Welding J.*, **8**: 29 (2022).
16. V. Peremitko, A. Golyakevich, A. Yevdokymov, V. Sukhomlyn, and V. Artemchuck, *Schweissen und Schneiden*, **1–2**: 40 (2024).

PACS numbers: 06.60.Vz, 61.72.Ff, 61.72.Qq, 62.20.Qp, 81.05.Rm, 81.15.Lm, 81.20.Vj

**Вплив типу та гранулометричного складу компонентів осердя
металопорошкових електродних дротів на структуру
та властивості багат шарового нагрітого металу системи
легування C–Cr–Mo–W–V**

А. А. Бабінець*, С. Л. Шваб*, М. М. Ворон**

**Інститут електрозварювання ім. Є. О. Патона НАН України,
вул. Казимира Малевича, 11,
03150 Київ, Україна*

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

Експериментально досліджено вплив типу та гранулометричного складу металевих компонентів осердя металопорошкових дротів на їхні характеристики топлення, а також якість формування, властивості та структуру покриттів, одержаних методом електродугового нагрітання. В якості шихтових компонентів осердя дослідних дротів використовували гранульований порошок марки ПГ-Р6М5 фракцією у 50...300 мкм і 200...250 мкм. В якості еталону використовували порошковий дріт, осердя якого складалось із компонентів у вигляді порошків феростопів, вміст яких був розрахований так, щоб одержати хемічний склад, аналогічний до дослідних дротів. Електродугове нагрітання виконували на стандартному обла-

Corresponding author: Anatoliy Anatoliyovych Babinets
E-mail: a_babinets@ukr.net

**E.O. Paton Electric Welding Institute, N.A.S. of Ukraine,
11 Kazymyr Malevych St., UA-03150 Kyiv, Ukraine*

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

Citation: A. A. Babinets, S. L. Schwab, and M. M. Voron, The Influence of the Type and Granulometric Composition of the Core Components of Metal Powder Electrode Wires on the Structure and Properties of the Multilayer Deposited Metal of the C–Cr–Mo–W–V Alloying System, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, 47, No. 5: 535–554 (2025). DOI: [10.15407/mfint.47.05.0535](https://doi.org/10.15407/mfint.47.05.0535)

© Publisher PH “Akadempriodyka” of the NAS of Ukraine, 2025. This is an open access article under the CC BY-ND license (<https://creativecommons.org/licenses/by-nd/4.0>)

днанні під флюсом АН-26П з дотриманням однакових режимів для коректності порівняння. Оцінку якості топлення порошкових дротів визначали за допомогою розробленої методики на основі визначених коефіцієнтів розтоплення, натоплення та втрат. Стабільність процесу натоплення визначали за дисперсією поточних значень величин струму та напруги на дузі за розрахованими коефіцієнтами варіації. Параметри режиму фіксували за допомогою цифрового записувального мультиметра, оснащеного високошвидкісним аналого-цифровим перетворювачем. Підготовку зразків і дослідження мікроструктури натопленого металу виконували за стандартними методиками металографічних досліджень. Експериментально визначено, що використання в якості компонентів осердя дослідних дротів гранульованого порошку майже однакового, збільшеного розміру (200...250 мкм) приводить до погіршення стабільності процесу електродугового натоплення і, як наслідок, підвищення неоднорідності структури натопленого металу та збільшення кількості мікрodefektів у ньому. Найбільша стабільність процесу натоплення металопорошковим дротом досягається з використанням у його осерді гранульованого порошку фракцією у 50...300 мкм. Завдяки однаковому хемічному складу та фізичним властивостям частинок гранульованого порошку, а також їхній меншій забрудненості шкідливими домішками у порівнянні із частинками феростопів і більш щільній упаковці в осерді порошкового дроту (у порівнянні із аналогічним порошком грануляцією у 200...250 мкм) досягається підвищення однорідності структури натопленого металу та зменшення кількості мікрodefektів у ньому.

Ключові слова: дугове натоплення, натоплений метал, гранульований стоп, феростоп, твердостопні порошки, структура металу, мікротвердість, включення.

The effect of the type and granulometric composition of the metal components of the core of metal powder wires on their melting characteristics, as well as the quality of formation, properties and structure of coatings obtained by the method of electric-arc welding, is experimentally investigated. Granulated powder of the PG-R6M5 brand with a fraction of 50...300 μm and 200...250 μm is used as the charge components of the core of the experimental wires. As a standard, a powder wire is used, the core of which consists of components in the form of ferroalloy powders, the content of which is calculated to obtain a similar chemical composition to the experimental wires. Electric-arc surfacing is performed on standard equipment under AN-26P flux, observing the same regimes for the correctness of the comparison. Evaluation of the quality of melting of flux-cored wires is determined using the developed methodology based on the determined coefficients of melting, surfacing and losses. The stability of the surfacing process is determined by the dispersion of the instantaneous estimates of the current and voltage values on the arc according to the calculated coefficients of variation. Mode parameters are recorded using a digital recording multimeter equipped with a high-speed analog-to-digital converter. Preparation of samples and investigation of the microstructure of the deposited metal are carried out according to standard methods of metallographic research. As determined experimentally, the use of granulated powder of almost the same, increased size

(200...250 μm) as core components of test wires leads to a deterioration in the stability of the electric-arc welding process and, as a result, to an increase in the heterogeneity of the structure of the deposited metal and to an increase in the number of microdefects in it. The greatest stability of the process of surfacing with metal powder wire is achieved, when granulated powder with a fraction of 50...300 μm is used in its core. Due to the same chemical composition and physical properties of the particles of the granulated powder, as well as their lower contamination with harmful impurities compared to the particles of ferroalloys and denser packing in the core of the powder wire compared to a similar powder with a granulation of 200...250 μm , an increase in the uniformity of the structure of the deposited metal and reducing the number of microdefects in it are achieved.

Key words: arc surfacing, deposited metal, granular alloy, ferroalloy, hard-alloy powder, metal structure, microhardness, inclusions.

(Отримано 14 квітня 2024 р.; остаточн. варіант — 8 жовтня 2024 р.)

1. ВСТУП

Процеси нагрівання широко використовуються як для зміцнення нових деталей машин і механізмів, так і для відновлення геометричних розмірів зношених поверхонь деталей після тривалої експлуатації їх. Для цього з використанням різних джерел теплової енергії (електричної або плазмової дуги, лазерного або електронного променя тощо), на поверхню деталі по чергові наносять шари розтопленого металу, ідентичного до його хімічного складу або більш легированого, якщо необхідно підвищити експлуатаційні властивості, такі як зносо- та термостійкість, втомна довговічність тощо [1–3].

Властивості покриттів, одержаних в такий спосіб, в першу чергу визначаються хімічним складом і структурою металу. Одними з основних шляхів поліпшення їх наразі є застосування різних хімічних або технологічних методів впливу, прикладами яких є підвищене легування або, навпаки, застосування мікролегувальних добавок різних хімічних елементів, використання зовнішніх технологічних імпульсних, магнетних, вібраційних й інших впливів на метал в процесі його кристалізації тощо [4–9].

Широкі можливості по управлінню хімічним складом, структурою та властивостями нагрітого металу дає використання металопорошкових дротів, які в найпростішому уявленні є трубкою, виготовленою з металевої стрічки, в осерді якої знаходиться порошкова композиція. Порошкові дроти знайшли найширше застосування для нагрівання та зварювання криць і стопів різного типу та призначення: низьколегированих конструкційних і легированих інструментальних криць, спеціальних стопів на основі заліза, тита-

ну, ніклю, кобальту та ін. [1, 4–7].

Разом з тим, в якості осердя порошкових дротів, призначених для натоплення та зварювання криць і стопів на основі заліза, в основному, застосовуються феростопи — стопи заліза з Si, Mn, Cr та ін. елементами, які використовуються для легування та поліпшення властивостей рідкого металу під час витопки криці. Основним недоліком цих матеріалів є їхня відносно висока забрудненість неметалевими включеннями, такими як сірка, фосфор тощо [10]. Ці включення є шкідливими, адже можуть негативно впливати на структуру та властивості готових виробів, переходячи із вихідних матеріалів у шари натопленого металу, проявляючи тим самим негативну хемічну та структурну спадковість [11].

Відомі приклади успішного використання в якості матеріялу осердя металопорошкових дротів ґранульованих порошків різних металів і стопів, одержаних методами розпорошення металевого розтопу [9, 12–14]. Основною перевагою таких матеріалів є їхня більш висока чистота від неметалевих включень й одержання натопленого металу практично будь-якого хемічного складу в порівнянні з традиційним порошковим дротом, склад якого обмежується вихідним вмістом кожного легувального елемента у відповідному феростопі від 45 до 75%.

Є й суперечливі дані про вплив ґранулометричного складу осердя порошкових дротів на структуру натопленого ними металу: іншими словами — про структурну спадковість між вихідними матеріялами та натопленим металом. За даними [15] використання порошкових матеріалів з частинками певного розміру (200...250 мкм) може істотно впливати на зварювально-технологічні властивості порошкових дротів, стабільність процесу натоплення і, як наслідок, на структуру та властивості натопленого металу.

Метою даної роботи є порівняльне експериментальне дослідження впливу типу та ґранулометричного складу металевих компонентів осердя металопорошкових дротів на якість формування, структуру та властивості багатошарових покриттів, одержаних методом електродугового натоплення.

2. МЕТОДИ ТА МАТЕРІЯЛИ ДОСЛІДЖЕНЬ

Дослідні зразки одержували методом електродугового натоплення топкими електродними порошковими дротами під шаром флюсу АН-26П, який призначений для захисту рідкої ванни та застиглого натопленого металу від атмосферного повітря. Всі зразки натоплювались у п'ять шарів, враховуючи високий коефіцієнт перемішування, характерний для дугових методів натоплення, щоб одержати розрахунковий хемічний склад металу в 3–4-му натопленому шарі.

Натоплення виконували на стандартному обладнанні: універсальній установці для натоплення У-653 із джерелом живлення ВДУ-506. Для одержання коректних результатів досліджень режими натоплення кожного шару для всіх зразків були однаковими: струм — 200 А, напруга — 30 В, швидкість натоплення — 18 м/год. Перед натопленням підігрівали зразки до температури у 300°C для уникнення гарячих тріщин у натопленому металі. В якості основного металу, на який виконували натоплення, використовували пластилини з криці Ст. 3 товщиною у 15 мм.

Дослідні металопорошкові дроти мали трубчасту конструкцію. Оболонку виготовлено з металевої стрічки з криці 08кп товщиною у 0,4 мм і шириною у 12 мм. Діаметер всіх дротів — 2,0 мм, коефіцієнт заповнення — 30%. Виготовлення порошкових дротів здійснювалося на потоковій лінії, яка включає волочильний стан і формувальний пристрій. Крицева стрічка проходить через профілювальні ролики, послідовно формуючись й одержуючи потрібний профіль заготовки. На певній стадії формування у стрічку засипається дозована кількість шихти. Сформована та заповнена шихтою заготовка дроту надходить на волочильний стан, де протягується маршпрутом до необхідного діаметра [16].

В якості шихтових компонентів осердя в дроті №1 використовували гранульований порошок марки ПГ-Р6М5 з розміром частинок у 50...300 мкм. Такий діапазон розміру для шихтових компонентів є стандартним під час виготовлення порошкових дротів згідно з рекомендаціями [16].

В осерді дроту №2 використовували порошок тієї ж марки, але гранулометричний склад був обмежений — 200...250 мкм. Як вказувалося вище, згідно з даними роботи [15], за таких розмірів частинок шихтових матеріалів в осерді самозахисного порошкового дроту забезпечується ліпше засвоєння Карбону та підвищується стабільність горіння дуги під час електродугового натоплення.

В осерді дроту №3 використовували порошки феростопів та інших металів, вміст яких був розрахований так, щоб одержати метал хемічного складу, аналогічного до дротів №№1 і 2. Гранулометричний склад порошків — 50...300 мкм. Цей порошковий дріт використовувався в якості еталону. Хемічний склад шихтових матеріалів, які використовувались у дослідженнях, наведено у табл. 1.

Оцінку стабільності процесу натоплення та якості формування натопленого металу виконували візуально й кількісно. Кількісну оцінку виконували, аналізуючи розраховані характеристики топлення порошкових дротів — коефіцієнти розтоплення (α_r), натоплення (α_n) та втрат (ψ) і дисперсію поточних значень величин струму та напруги на дузі за розрахованими коефіцієнтами варіації (k_i , k_u). Коефіцієнти варіації по струму та напрузі визначали як частку величини середньоквадратичного відхилення до середнього значення

ТАБЛИЦЯ 1. Хемічний склад матеріалів, які використовувалися для виготовлення дослідних порошкових дрітків.**TABLE 1.** Chemical composition of the materials used for the fabrication of experimental powder-coated wires.

Марка матеріалу	Хемічний склад, %										
	Fe	C	Cr	W	Mo	V	Si	Mn	Ni	S	P
ПГ-Р6М5	Осн.	1,0	4,0	6,5	5,0	1,9	0,5	0,5	2,0	0,03	0,03
Ферохром	Осн.	8,0	65,0	—	—	—	2,0	—	—	0,08	0,05
Феромолібден	Осн.	0,05	—	0,3	60,0	—	0,8	—	—	0,10	0,06
Ферованадій	Осн.	0,6	—	—	—	60,0	2,0	5,0	—	0,03	0,07
Феросиліцій	Осн.	0,1	0,3	—	—	—	75,0	0,4	—	0,02	0,04
Фероманган	Осн.	7,0	—	—	—	—	6,0	80,0	—	0,03	0,10
Графіт	1,60	98,0	—	—	—	—	—	—	—	0,05	—
Реліт	0,15	≤ 4,0	—	96,0	—	—	—	—	—	—	—
Ніклевий порошок	0,10	0,02	—	—	—	—	0,03	—	99,5	0,008	—
Залізний порошок	99,5	0,02	—	—	—	—	0,05	0,2	—	0,015	0,015
Стрічка 08кп	98,0	0,07	0,1	—	—	—	0,03	0,3	0,3	0,04	0,035

відповідного параметра. Розрахунок коефіцієнтів розтоплення (α_r), натоплення (α_n) та втрат (ψ) визначали, використовуючи широковідомі вирази:

$$\alpha_r = G_r / (It), \quad (1)$$

$$\alpha_n = G_n / (It), \quad (2)$$

$$\psi = ((\alpha_r - \alpha_n) / \alpha_r) \cdot 100\%, \quad (3)$$

де G_r — маса розтопленого металу [г], G_n — маса натопленого металу [г], I — зварювальний струм [А], t — час натоплення [год.].

Параметри режиму (величину струму та напруги на дузі) фіксували за допомогою цифрового записувального мультиметра ANENG AN9002, оснащеного високошвидкісним аналого-цифровим перетворювачем.

Визначення хемічного складу, що здійснювали рентгеноспектральним методом, і твердості металу за Роквеллом по шкалі *HRC* виконували в п'ятому натопленому шарі кожного зразка згідно зі стандартними методиками. Визначення мікротвердості натопленого металу виконували на мікротвердомірі ПМТ-3 під навантаженням у 100 г. Заміри мікротвердості виконували, починаючи з основного металу, відступивши від лінії стоплення на 0,25 мм і далі з кроком

у 0,5 мм по вертикальній осі нагрітих шарів.

Підготовку зразків для дослідження структури нагрітого металу виконували за стандартними методиками, які включають поетапне шліфування поверхні зразків з використанням алмазних паст різної дисперсності та наступне електролітичне щавлення в 20%-розчині хромової кислоти. Вивчення структури металу виконували на оптичному мікроскопі Neophot-2.

3. РЕЗУЛЬТАТИ ТА ЇХ ОБГОВОРЕННЯ

Візуально встановлено, що метал, нагрітий дослідними дротами №№1 і 2 має достатньо високу якість формування і в ньому відсутні як зовнішні (рис. 1, *a*), так і внутрішні (рис. 1, *b*) макродефекти. Дещо гіршу якість формування відмічено для металу, нагрітого дротом №3; макродефекти в ньому також відсутні. Якість відділення шлакової кірки з поверхні нагрітого металу є задовільною для всіх зразків.

Результати рентгеноспектральної аналізи та вимірювання твердості металу, нагрітого дротами трьох типів, показали (табл. 2), що метал всіх типів має практично однаковий хімічний склад і твердість. За цими показниками нагрітий метал відповідає низьколегованій інструментальній криці 30B2ХМФ.

Потрібно відзначити меншу забрудненість металу, нагрітого дротами з осердям із гранульованим стопом (№№1, 2), у порівнянні з дротом-еталоном, осердя якого складається з феростопів (№3), такими шкідливими домішками як Сульфур і Фосфор. Це має позитивно вплинути на структуру та властивості нагрітого металу. Крім того, діапазон показників твердості для металу, нагрітого порошковим дротом №3, найбільш широкий, що може свідчити про

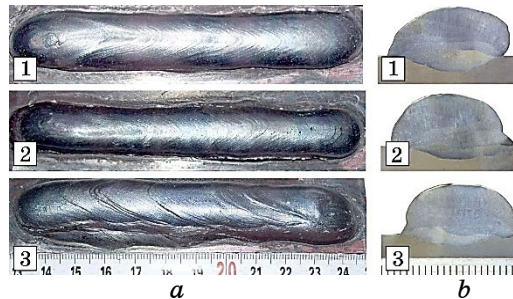


Рис. 1. Зовнішній вигляд поверхні зразків, нагрітих у п'ять шарів дротами №№ 1–3 (*a*), та їхні поперечні макрошліфи (*b*).

Fig. 1. Appearance of the surface of the samples deposited in five layers with wires Nos. 1–3 (*a*); their cross-sections (*b*).

ТАБЛИЦЯ 2. Хемічний склад і твердість металу, натопленого дослідними дротами.**TABLE 2.** Chemical composition and hardness of the metal deposited by experimental wires.

№	Вміст хемічних елементів у натопленому металі, % ваг.										Твердість, HRC
	Fe	C	Cr	Mo	W	V	Mn	Si	S	P	
1		0,19	1,2	1,64	1,70	0,50	0,3	0,56	0,020	0,022	30...32
2		0,19	1,2	1,71	1,74	0,51	0,3	0,56	0,021	0,024	29...31
3	Осн.	0,25	1,38	1,27	1,63	0,35	0,38	0,73	0,027	0,037	28...32
*		0,2– 0,3	1,0– 1,4	1,0– 1,7	1,5– 2,0	0,3– 0,5	0,3– 0,5	0,3– 0,5	$\leq 0,04 \leq 0,04$		30...32

* дано розрахунковий хемічний склад і твердість натопленого металу.

більшу хемічну неоднорідність металу.

На рисунку 2 наведено гістограми розподілу величин струму та напруги, тобто частоти появи цих величин, розділеної по проміжках. Узагальнені розрахункові результати оцінки стабільності процесу натоплення різними дротами й якості топлення їх наведено у табл. 3.

З наведених даних видно, що характеристики топлення дротів трьох типів знаходяться приблизно на однаковому рівні, проте дроти №№1 і 2 із осердям у вигляді гранульованого порошку мають вищі на $\cong 25\%$ коефіцієнти розтоплення та натоплення у порівнянні з дротом-еталоном із шихтою з феростопів. Це позитивно позначається і на коефіцієнті втрат, який у 2,9...4,0 рази нижчий для дротів №№1 і 2 у порівнянні із дротом-еталоном №3.

Найбільш стабільним є процес натоплення дротом №1: він характеризується найменшим діапазоном коливань по величинам струму та напруги від заданого, що підтверджується гістограмами розподілу частоти фіксації відповідних параметрів (рис. 2) і коефіцієнтами їхньої варіації (табл. 2). Найменшою стабільністю характеризується процес натоплення дротом-еталоном №3 з осердям із феростопів.

Визначені залежності можуть бути пояснені різницею в типі шихтових компонентів у осерді порошкових дротів. Гранульований металевий порошок є більш чистим та однорідним за хемічним складом і фізичними властивостями (температурою топлення, електропровідністю, густиною) у порівнянні із порошками різних феростопів [17], які використовувались у осерді дроту-еталона, що, очевидно, буде впливати на кінетику процесу топлення.

Ліпші показники топлення та стабільності у дроту №1 у порівнянні з дротом №2, в осерді яких був гранульований порошок, може бути пояснено різницею у гранулометричному складі порош-

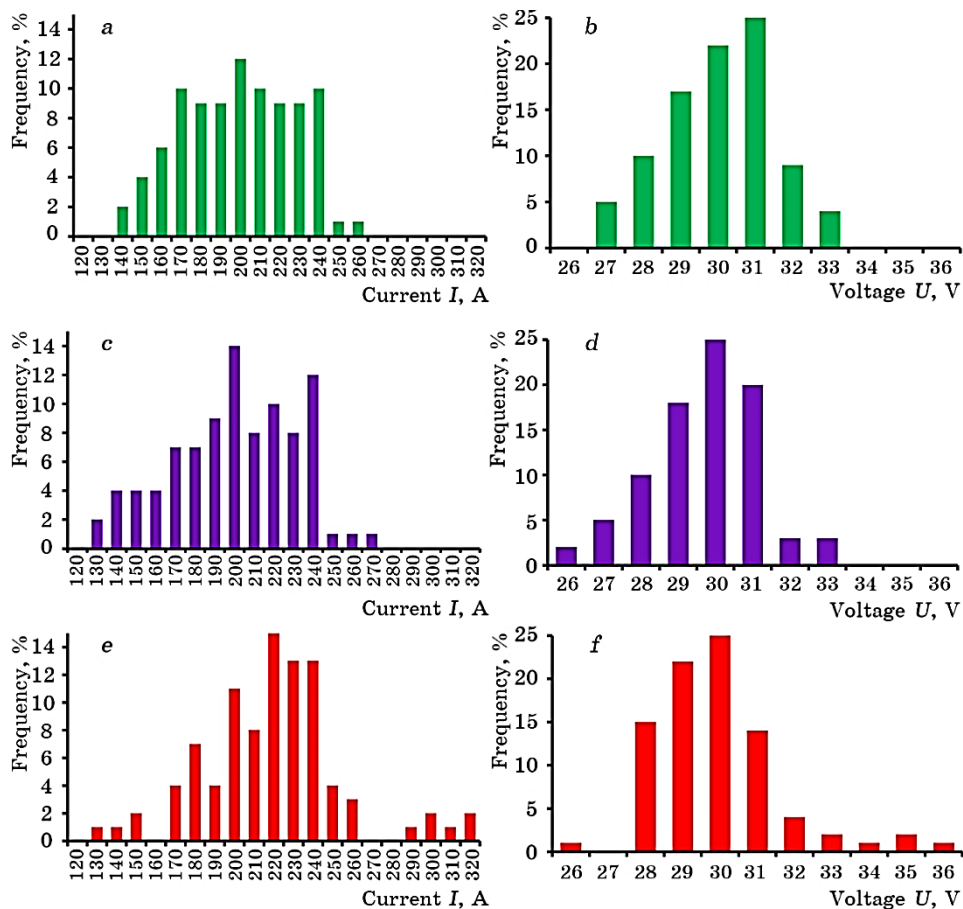


Рис. 2. Гістограми частоти розподілу значень струму (*a, c, e*) та напруги (*b, d, f*) за натоплення дротами №1 (*a, b*), №2 (*c, d*) та №3 (*e, f*).

Fig. 2. Histograms of the frequency distribution of current (*a, c, e*) and voltage (*b, d, f*) values under surfacing with wires №1 (*a, b*), №2 (*c, d*) and №3 (*e, f*).

ків. Як було зазначено вище, розмір частинок порошку в осерді дроту №1 був від 50 до 300 мкм (рис. 3, *a*), а в дроті №2 — 200...250 мкм (рис. 3, *b*).

На нашу думку, використання в осерді металопорошкових дротів компонентів майже однакової форми та розміру (200...250 мкм) за внутрішнього діаметра дроту у 1200 мкм під час виготовлення дроту призводить до утворення значної кількості пустот; коефіцієнт пакування частинок (η) складає 83,5% (рис. 3, *d*), що негативно впливає на кінетику топлення порошкового електродного дроту. За використання в осерді порошкових дротів частинок із широким

ТАБЛИЦЯ 3. Параметри якості топлення порошкових дротів і стабільності процесу.**TABLE 3.** Quality parameters of flux cored wires and process stability.

Параметер	Тип дроту		
	№1	№2	№3
Коефіцієнти, %:			
- розтоплення α_p	17,1	16,2	13,6
- натоплення α_n	16,8	15,8	12,6
- втрат ψ	1,75	2,47	7,35
Задана величина струму, А		200,0	
Мінімальне значення струму, А	136,4	127,8	128,6
Максимальне значення струму, А	252,0	266,0	312,0
Сер. квадр. відхилення по струму, А	27,51	28,67	34,60
Середнє значення струму, А	194,8	194,9	213,8
Коефіцієнт варіації по струму k_i , %	14,12	14,71	16,18
Задана величина напруги, В		28,0	
Мінімальне значення напруги, В	26,03	25,91	25,27
Максимальне значення напруги, В	32,39	32,72	36,41
Середньо квадратичний відхил по напрузі, В	1,47	1,38	1,79
Середнє значення напруги, В	29,19	29,45	29,46
Коефіцієнт варіації по напрузі k_u , %	4,73	4,99	6,08

діапазоном по гранулометричному складу (50...300 мкм) таких пустот утворюється значно менше, коефіцієнт пакування складає 93,3% (рис. 3, с), порошковий дріт є більш щільним та однорідним і топиться більш стабільно.

Дослідження мікроструктури зразків натопленого металу показало, що зона стоплення першого шару натопленого металу з металом основи в зразку №1 має ширину близько 20 мкм (рис. 4, а). Зони перегріву та неповного розтоплення мають товщини близько 100 мкм, на що вказують горизонтальні лінії в будові металу-основи. Структура натопленого металу поблизу лінії стоплення характеризується наявністю дрібних зерен стовпчастої орієнтації, які мають напрямок зростання перпендикулярно металу-основи — у напрямку тепловідведення. Вагомим у даному випадку є спостереження, що самі зерна первинного аустеніту формуються дрібними, а їхні межі залишаються малопомітними після розпаду на ферит і сорбітоподібний перліт (рис. 4, б).

Центральна частина натопленого металу (3–4-й шар) зразка №1 має майже однорідну будову первинно сформованих аустенітних зерен шириною у 40...60 мкм і довжиною у 200...400 мкм від третього до четвертого шару (рис. 4, с, d).

З віддаленням від металу-основи за розпаду аустеніту підвищується неоднорідність сорбітоподібного перліту та збільшується розмір феритної складової.

У п'ятому шарі межі зерен представлено виділеннями фериту, а також спостерігається формування мікрооб'ємів псевдоперліту

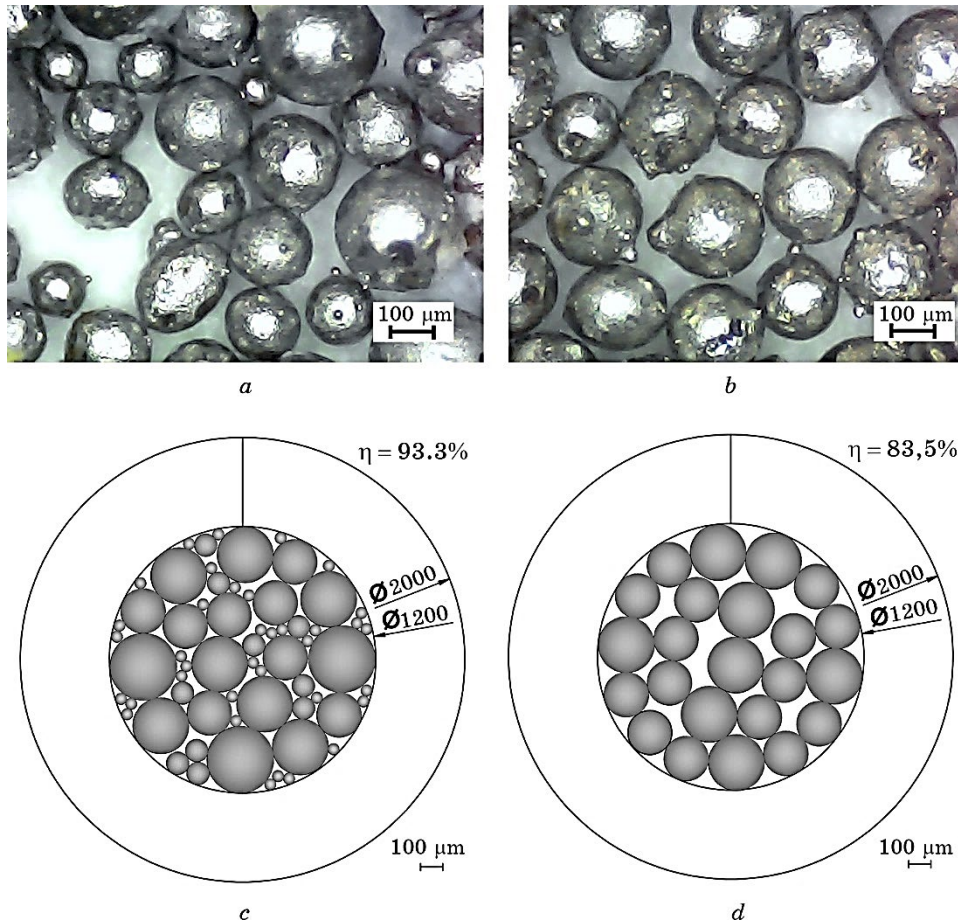


Рис. 3. Зовнішній вигляд зразків порошку Р6М5 (*a, b*) грануляцією у 50...300 мкм (*a*) та 200...250 мкм (*b*); модель розподілу частинок порошку шихти розмірами у 50...300 мкм (*c*) і 200...250 мкм (*d*) у осерді дроту зовнішнім діаметром у 2,0 мм, виготовленого зі стрічки товщиною у 0,4 мм.

Fig. 3. The appearance of samples of R6M5 powder (*a, b*) with granulation of 50...300 μm (*a*) and 200...250 μm (*b*); the pattern of distribution of particles of the charge powder with sizes of 50...300 μm (*c*) and 200...250 μm (*d*) in the core of a powder wire with an outer diameter of 2.0 mm, made of a tape with a thickness of 0.4 mm.

(рис. 4, *e, f*).

Ближче до верхнього краю натопленого металу, у ньому форму-

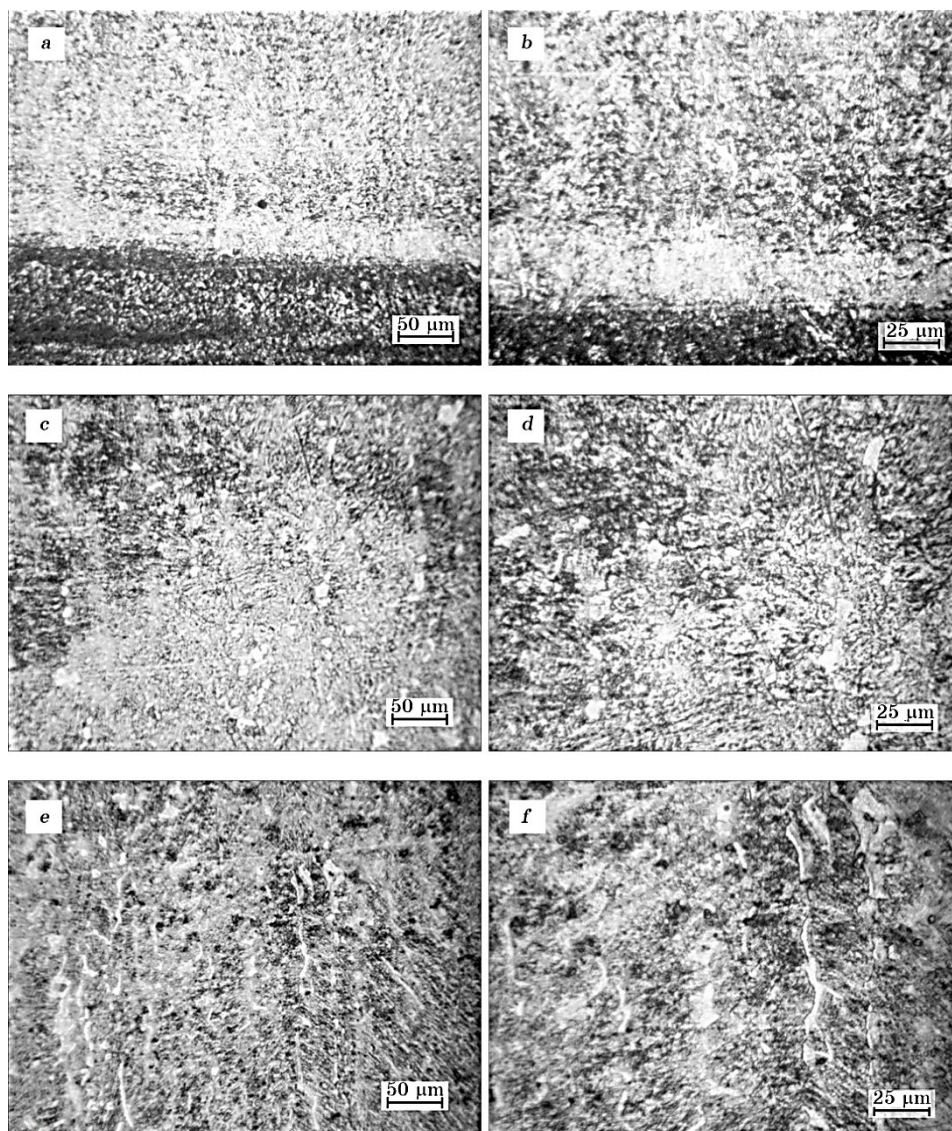


Рис. 4. Мікроструктура металу поблизу лінії стоплення першого натопленого шару (вгорі) та основного металу (внизу) (*a, b*), а також мікроструктура третього (*c, d*) та п'ятого (*e, f*) шарів натопленого металу у зразку №1.

Fig. 4. The microstructure of the metal near the fusion line of the first deposited layer (above) and the base metal (below) (*a, b*), and the microstructure of the third (*c, d*) and fifth (*e, f*) layers of the deposited metal in the sample №1.

ються рівновісні первинні зерна аустеніту, після розпаду яких утворюється дрібнодисперсна структура, схожа на суміш фериту та троститу гартування, що можна пояснити підгартуванням верхнього шару металу під час остигання зразка на спокійному повітрі.

Зразок №2 з більш рівномірним гранулометричним складом осердя порошкового дроту (200...250 мкм) має зону стоплення шириною у 20...25 мкм; ширина та протяжність первинних зерен аустеніту є меншою, ніж в попередньому зразку (близько 20 мкм і 150–200 мкм відповідно). В структурі наявні поодинокі крупні неметалеві включення (рис. 5, *a, b*), а сама вона представлена дрібнодисперсною сумішшю фериту, сорбітоподібного перліту та дрібнодисперсних карбідних включень. Такі відмінності можна пояснити меншою температурою розтопу зварювальної ванни під час натоплення, що зумовлено більш крупним гранулометричним складом осердя порошкового дроту №2. Очевидно, що за однакових енерговитрат розтоплення більшої кількості крупних частинок шихти металопорошкового дроту буде забирати більше енергії; тому температура такого розтопу буде дещо нижчою. Саме тому, через менший перегрів, буде утворюватися більш дрібнозерниста структура і так само через це розчинення або виведення неметалевих включень буде менш ефективним. Будова центральних шарів натопленого металу зразка №2 має теж змішану структуру колишніх первинних зерен (рис. 5, *c, d*). Мікроструктура цієї області так само характеризується пониженою рівномірністю та представлена крупними відокремленими ділянками фериту й сорбітоподібного перліту, як і в зразку №1. Окремі мікрооб'єми за своєю будовою більше нагадують перліт або псевдоперліт. Слід відзначити наявність пор і неметалевих включень. У верхній частині натопленого металу формуються рівновісні первинні зерна аустеніту (рис. 5, *e, f*). Отже, розглянуті характерні зони зразка №2 є схожими на аналогічні зони попереднього зразка. Характерною відмінністю тут можна назвати помітно високу кількість пор і неметалевих включень у зразку №2. Формування їх і залишок, як вже було сказано, є наслідком пониження температури зварювальної ванни, що пов'язане з використанням в осерді порошкового дроту більш крупних частинок.

Зразок №3 має найбільш виражену градієнтну структуру зони стоплення та неповного розтоплення, ширина яких складає 40...100 мкм (рис. 6, *a*), а більше значення відповідає осі, по якій у зварювальну ванну подавався топкий електродний порошковий дріт. Первинні аустенітні зерна натопленого металу мають будову та розміри, схожі на ті, якими характеризується зразок №1. Їхня ширина складає в середньому 25 мкм, а довжина — 20 мкм. Після розпаду аустеніт утворює більш крупну, ніж у попередніх зразків, суміш фериту та сорбітоподібного перліту (рис. 6, *b*). На це може впливати дещо підвищена кількість Силіцію в натопленому металі №3 як не-

карбідоутворювального феритного стабілізатора.

У будові нагрітого шару відмічено різноманітні мікроефекти — пори та крупні неметалеві включення. Будова центральних ша-

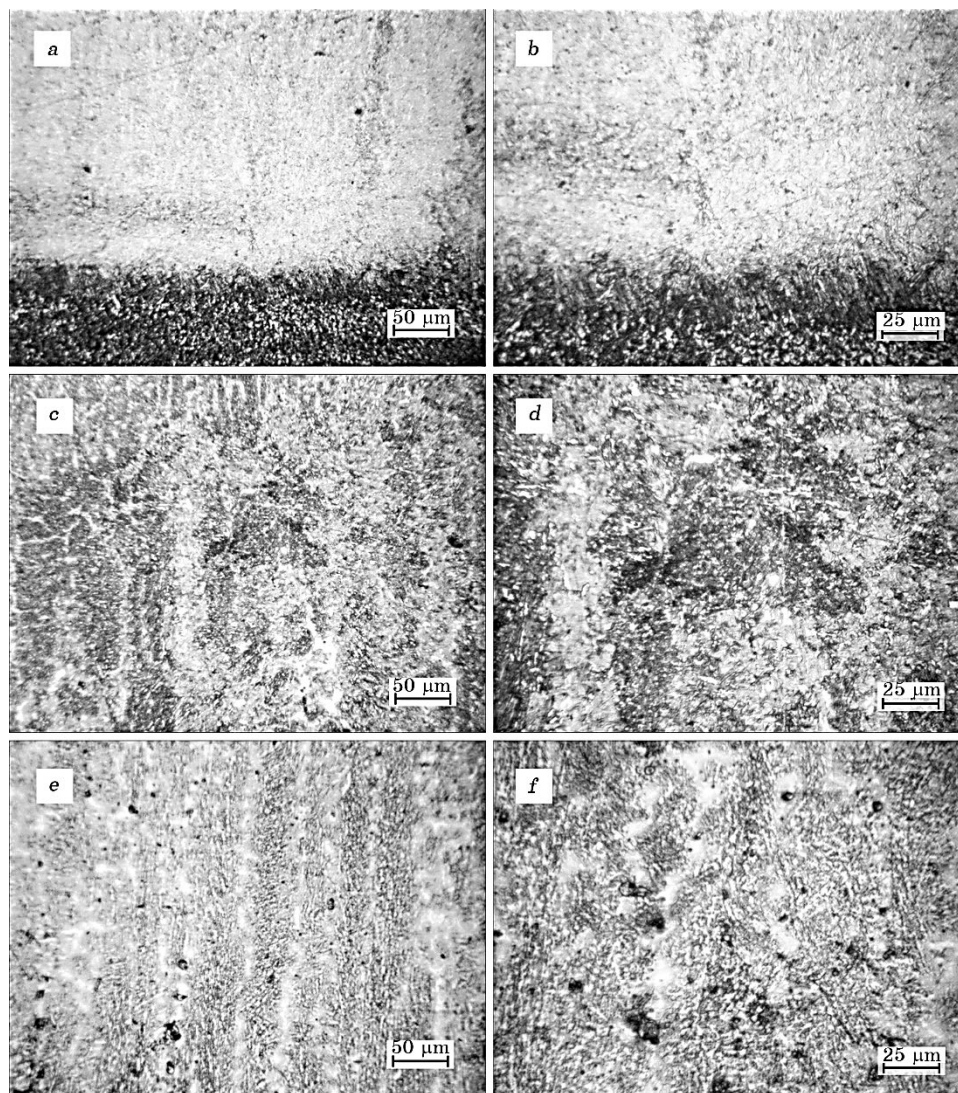


Рис. 5. Мікроструктура металу поблизу лінії стоплення першого нагрітого шару (вгорі) й основного металу (внизу) (*a, b*), а також мікроструктура третього (*c, d*) та п'ятого (*e, f*) шарів нагрітого металу у зразку №2.

Fig. 5. The microstructure of the metal near the fusion line of the first deposited layer (above) and the base metal (below) (*a, b*), and the microstructure of the third (*c, d*) and fifth (*e, f*) layers of the deposited metal in the sample №2.

рів нагрітого металу в зразку №3 має схожу будову первинно утворених зерен, порівняно з першими шарами.

Після розпаду аустеніту в третьому та четвертому шарах на ме-

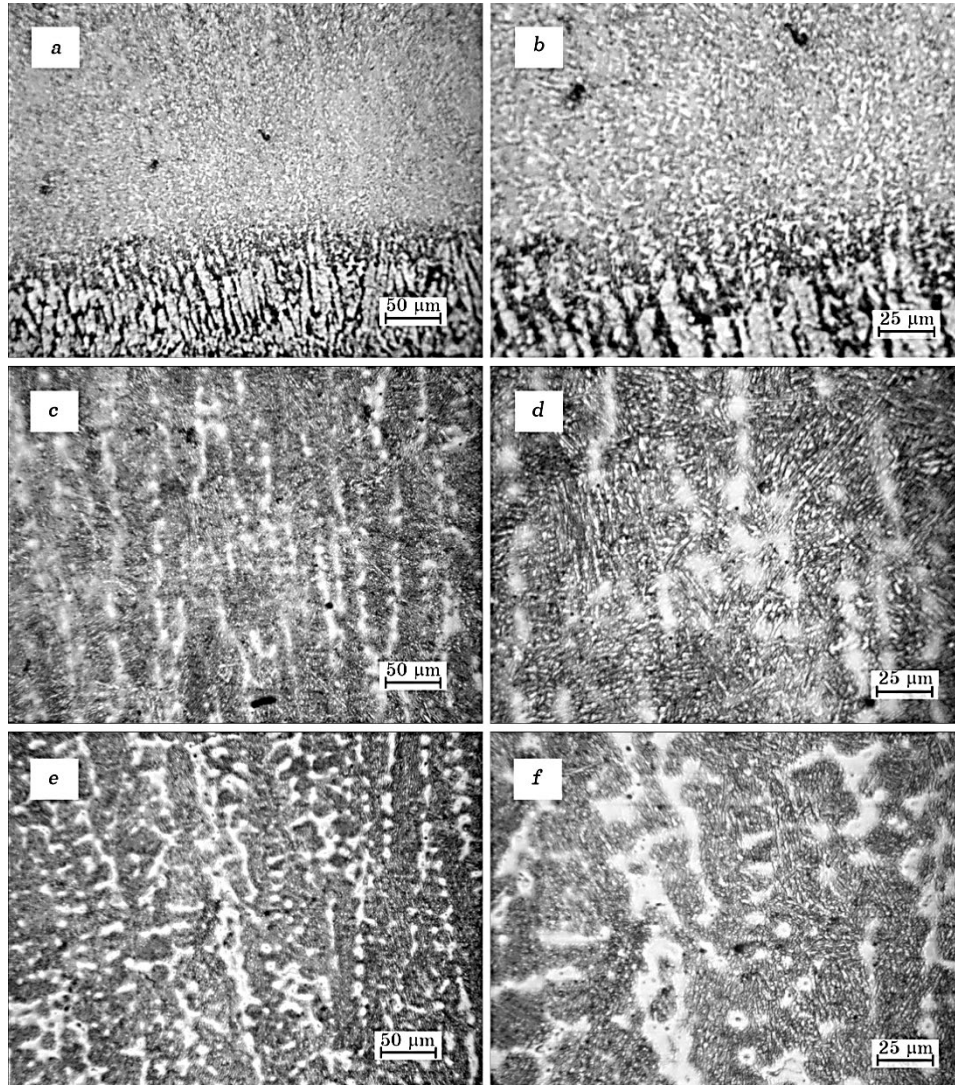


Рис. 6. Мікроструктура металу поблизу лінії стоплення першого нагрітого шару (вгорі) й основного металу (внизу) (*a, b*), а також мікроструктура третього (*c, d*) та п'ятого (*e, f*) шарів нагрітого металу у зразку №3.

Fig. 6. The microstructure of the metal near the fusion line of the first deposited layer (above) and the base metal (below) (*a, b*), and the microstructure of the third (*c, d*) and fifth (*e, f*) layers of the deposited metal in the sample №3.

жах його колишніх зерен утворюється велика кількість крупних ділянок фериту (рис. 6, *c*, *d*). Таке явище ймовірніше за все є результатом нерівномірного розподілу різних компонентів (феростопів) шихти металопорошкового дроту №3. Зокрема, збільшення феритних ділянок найбільше пов'язане з підвищеною концентрацією Силіцію й інших феритостабілізуювальних елементів.

Вказана особливість неоднорідності хемічного складу дроту з феростопним наповненням ще більш контрастно проявляється у верхніх шарах (рис. 6, *e*, *f*). Водночас, аустеніт у них має дендритну будову, що вказує на більшу тривалість кристалізації та можливе утворення евтектики. Більш тривала кристалізація верхніх нагнених шарів також підтверджується утворенням структури, яка більше схожа на перліт або сорбітоподібний перліт окремо від фериту. У верхніх шарах також відзначено велику кількість мікродфектів, які являють собою неметалеві включення та, зрідка, пори.

Треба відзначити наявність у центральній частині нагненого металу зразка №3 розмежування структури (рис. 7, *a*) та нерозтоплених фрагментів порошкового дроту (рис. 7, *b*), що вказує на неоднорідність хемічного складу шихтової суміші металопорошкового нагненого дроту, осердя якого складається із феростопів.

Загалом, можна сказати, що нагнений метал зразка №3 має найбільш неоднорідну будову, що пов'язане з типом обраної шихти для виробництва нагненого дроту — різних феростопів. Неоднорідний хемічний склад і фізичні властивості феростопів, а також більша кількість домішок у них, зокрема Силіцію, сприяє утворенню такої більш неоднорідної структури та підвищенню кількості де-

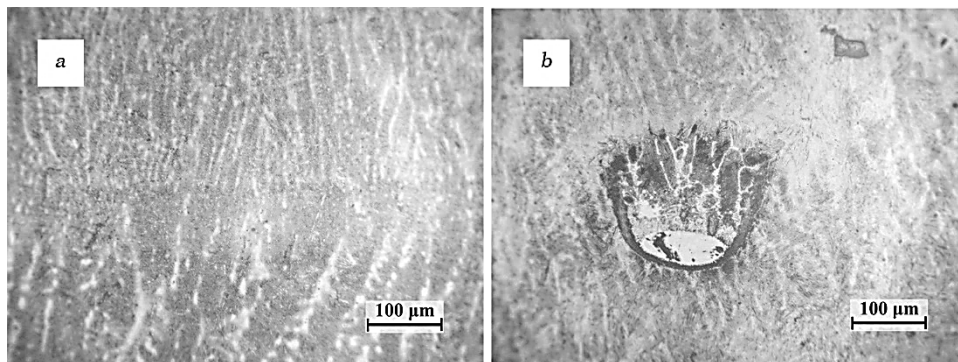


Рис. 7. Мікроструктура центральної частини нагненого металу в зразку №3 із вираженим розмежуванням структури (*a*) та нерозтопленими включеннями осердя порошкового дроту (*b*).

Fig. 7. Microstructure of the central part of the deposited metal in sample №3 with pronounced demarcation of the structure (*a*) and unfused inclusions of the flux cored wire (*b*).

фектів і неметалевих включень зразка, нагрітого дротом з феростопною шихтою.

Аналіза розподілу мікротвердості по висоті шарів нагрітого металу в зразках №№1–3 показала (рис. 8), що мікротвердість основного металу біля лінії стоплення у всіх зразках приблизно однакова та становить $HV1\ 1280\ldots1320$ МПа. Мікротвердість в першому нагрітому шарі становить: в зразку №1 — $HV1\ 1910\ldots2230$ МПа, №№2 та 3 — $HV1\ 1850\ldots2150$ МПа. В центральній частині нагрітого металу (3-й шар) мікротвердість зразка №1 становить $HV1\ 2400\ldots2500$ МПа, зразка №2 — $HV1\ 2300\ldots2410$ МПа, зразка №3 — $HV1\ 2330\ldots2450$ МПа. В останньому, п'ятому, нагрітому шарі мікротвердість зразка №1 становить $HV1\ 2600\ldots2670$ МПа, № 2 —

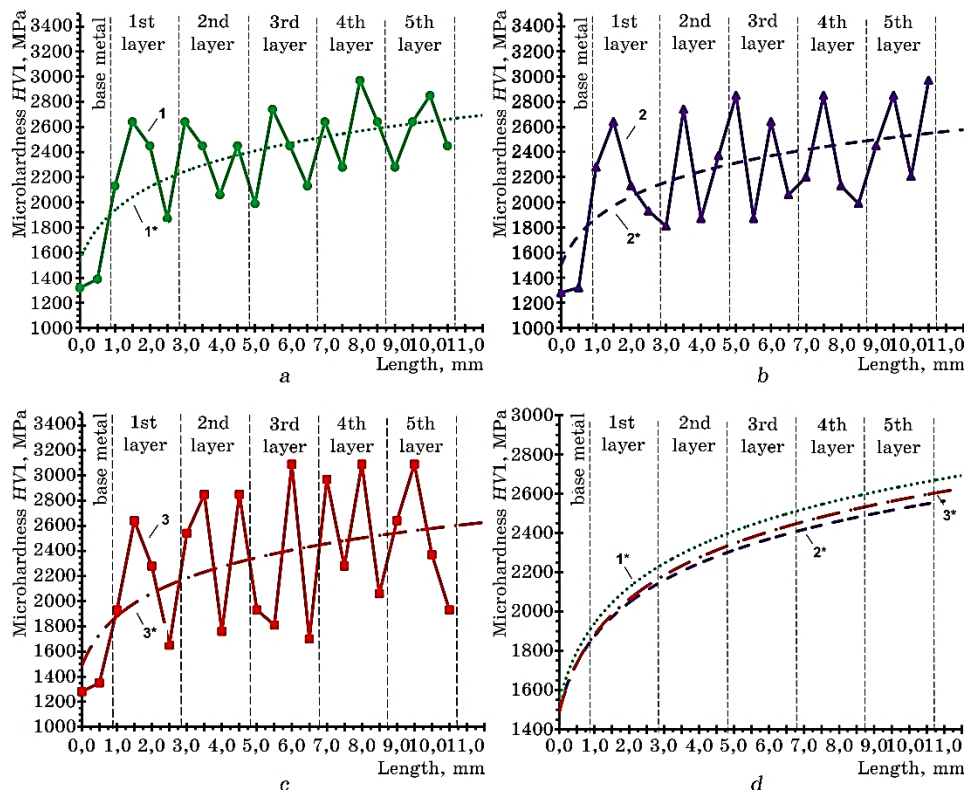


Рис. 8. Розподіл мікротвердості по шарах нагрітого металу зразків №1 (a), №2 (b), №3 (c) та регресійні рівняння (1–3*) одержаних залежностей (d).

Fig. 8. Distribution of microhardness in the layers of deposited metal of samples №1 (a), №2 (b), №3 (c), and regression equations (1–3*) of the obtained dependences (d).

HV1 2500...2550 МПа, № 3 — HV1 2530...2600 МПа.

Результати мікродюрOMETричних мірянь структурних складових у окремих ділянках зразка №3 показали, що твердість яскраво виражених лікваций залишкового аустеніту становить *HV1 2540...2740 МПа*, а твердість феритної складової набагато вища — *HV1 3220...3830 МПа* (рис. 6, *f*). Мікротвердість феритної складової у аналогічній зоні зразків №1 і 2 (рис. 4, *f* і 5, *f*) складає *HV1 2640...2970 МПа*, а залишкового аустеніту — *HV1 2060...2280 МПа*; та водночас важливо, що структура зразків №1 і 2 є більш однорідною і в ній такі ліквацийні ділянки менш виражені у порівнянні зі зразком №3.

Таким чином, визначено, що ферит, який оточує зерна колишнього аустеніту, має більші значення мікротвердості. Це означає, що він має високий ступінь легованості феритними стабілізаторами — Хромом, Ванадієм, Молібденом, Силіцієм і Вольфрамом. Високий вміст їх у окремих ділянках зразка №3 у порівнянні зі зразками №№1 і 2 може пояснюватися неповним розтопленням компонентів шихти, яка складається із різних феростопів, недостатньою гомогенізацією хемічного складу утворюваних мікрооб'ємів розтопу та, як наслідок, — утворенням лікваций. Високий ступінь легування фериту є одним з чинників його високої твердості. Додатковим чинником також може виступати наявність у фериті дрібних карбідів, які могли як утворитися в феритних зернах, так і перейти до їхнього складу з феростопів за рахунок неповного розтоплення їх і розчинення.

Експериментально визначено, що мікротвердість у зразка №1 трохи вище за показниками у порівнянні зі зразками №№2 й 3. Окрім того, показники мікротвердості зразка №1 характеризуються меншою величиною дисперсії, що може бути пояснено особливостями характеристик осердя дослідних порошкових дротів, описаними вище та, як наслідок, більшою стабільністю у процесі нагрівання дротом №1. Високий структурний й, очевидно, хемічний ступінь неоднорідності нагрітого металу №3 може негативно сказатися на його експлуатаційних властивостях, особливо якщо подібні деталі будуть працювати в умовах абразивного чи втомного зношування.

4. ВИСНОВКИ

1. Експериментально визначено, що тип і ґранулометричний склад металевих компонентів осердя металопорошкових дротів мають значний вплив на характеристики та стабільність процесу електродугового нагрівання металопорошковими дротами, що, як наслідок, позначається на характеристиках нагрітого металу та його структури.

2. Використання в якості осердя порошкових дротів гранульованих стопів, хемічно більш чистих і більш однорідних за фізичними властивостями, уможлиблює підвищити зварювально-технологічні властивості порошкових дротів на 20...30% у порівнянні із дротом-еталоном, в осерді якого використовувалися стандартні феростопи. Водночас, найбільшою стабільністю відзначено порошкові дроти, гранулометричний склад осердя яких знаходиться в межах 50...30 мкм і які характеризуються вищим коефіцієнтом пакування.

3. Вищезазначені особливості приводять до деякого підвищення мікротвердості металу, більшої однорідності його структури та зменшення кількості мікродефектів під час нагрівання дротами із осердям з гранульованих стопів у порівнянні із металом аналогічного хемічного складу, нагрітого порошковим дротом з феростопною шихтою в осерді.

ЦИТОВАНА ЛІТЕРАТУРА

1. I. Ryabtsev, S. Fomichov, V. Kuznetsov, Y. Chvertko, and A. Banin, *Electric Arc Surfacing. Surfacing and Additive Technologies in Welded Fabrication* (Cham, Switzerland: Springer: 2023).
2. Д. Л. Луцак, П. М. Присяжнюк, М. О. Карпаш, В. М. Пыльпий, В. О. Коцюбинський, *Металлофиз. новейшие технол.*, **38**, №9: 1265 (2016).
3. Т. В. Тарасова, Е. В. Попова, *Металлофиз. новейшие технол.*, **35**, №11: 1487 (2013).
4. I. A. Ryabtsev, A. I. Panfilov, A. A. Babinets, I. I. Ryabtsev, G. N. Gordan, and I. L. Babichuk, *The Paton Welding J.*, Nos. 5–6: 78 (2015).
5. L. M. Lobanov, I. O. Ryabtsev, M. O. Pashchyn, A. A. Babinets, O. M. Syzonenko, I. I. Ryabtsev, I. P. Lentuygov, A. S. Torpakov, and O. L. Mikhodui, *Strength Mater.*, **55**: 469 (2023).
6. Н. В. Pokhmurs'ka, М. У. Holovchuk, У. В. Dz'oba, В. М. Hvozdet's'kyi, and L. V. Dzyubyk, *Mater. Sci.*, **53**: 868 (2018).
7. В. Д. Кузнецов, Д. В. Степанов, В. В. Перемітько, О. Л. Косинська, А. І. Панфілов, І. В. Коломоець, *Металофиз. новітні технол.*, **42**, №8: 1107 (2020).
8. V. O. Lebedev and S. V. Novykov, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **44**, No. 3: 419 (2022).
9. S. Schwab, R. Selin, and M. Voron, *Weld World*, **67**: 981 (2023).
10. M. Gasik, V. Dashevskii, and A. Bizhanov, *Ferroalloys: Theory and Practice* (Switzerland: Springer Nature: 2020).
11. I. A. Ryabtsev, *The Paton Welding J.*, No. 11: 8 (2006).
12. И. А. Кондратьев, *Порошковая проволока, заполненная гранулированным сплавом. Наплавка. Технологии, материалы, оборудование: Сб. статей* (Київ: ИЭС им. Е. О. Патона НАН України: 2015).
13. I. A. Ryabtsev, E. F. Pereplyotchikov, I. V. Mits, and I. A. Bartenev, *The Paton Welding J.*, No. 10: 18 (2007).
14. A. P. Zhudra, S. Yu. Krivchikov, and V. I. Dzykovich, *The Paton Welding J.*, No. 12: 36 (2014).
15. A. P. Zhudra, S. Yu. Krivchikov, and V. V. Petrov, *The Paton Welding J.*, No. 11:

- 43 (2006).
16. И. К. Походня, А. М. Суптель, В. Н. Шлепаков, *Сварка порошковой проволокой* (Киев: Наукова думка: 1972).
 17. В. П. Пиптюк, А. Ф. Петров, С. В. Греков, В. А. Буршитин, *Физико-химическая оценка свойств промышленных ферросплавов. Фундаментальные и прикладные проблемы черной металлургии: Сб. научн. тр.* (Днепропетровск: ИЧМ НАН Украины: 2007), № 14, с. 235.

REFERENCES

1. I. Ryabtsev, S. Fomichov, V. Kuznetsov, Y. Chvertko, and A. Banin, *Electric Arc Surfacing. Surfacing and Additive Technologies in Welded Fabrication* (Cham, Switzerland: Springer: 2023).
2. D. L. Lutsak, P. M. Prysyazhnyuk, M. O. Karpash, V. M. Pylypiv, and V. O. Kotsyubynsky, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **38**, No. 9: 1265 (2016) (in Russian).
3. T. V. Tarasova and E. V. Popova, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **35**, No. 11: 1487 (2013) (in Russian).
4. I. A. Ryabtsev, A. I. Panfilov, A. A. Babinets, I. I. Ryabtsev, G. N. Gordan, and I. L. Babichuk, *The Paton Welding J.*, Nos. 5–6: 78 (2015).
5. L. M. Lobanov, I. O. Ryabtsev, M. O. Pashchyn, A. A. Babinets, O. M. Syzonenko, I. I. Ryabtsev, I. P. Lentyugov, A. S. Torpakov, and O. L. Mikhodui, *Strength Mater.*, **55**: 469 (2023).
6. H. V. Pokhmurs'ka, M. Y. Holovchuk, Y. V. Dz'oba, V. M. Hvozdet's'kyi, and L. V. Dzyubyk, *Mater Sci*, **53**: 868 (2018).
7. V. D. Kuznetsov, D. V. Stepanov, V. V. Peremitko, O. L. Kosynska, A. I. Panfilov, and I. V. Kolomojets, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **42**, No. 8: 1107 (2020) (in Ukrainian).
8. V. O. Lebedev and S. V. Novykov, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **44**, No. 3: 419 (2022).
9. S. Schwab, R. Selin, and M. Voron, *Weld World*, **67**: 981 (2023).
10. M. Gasik, V. Dashevskii, and A. Bizhanov, *Ferroalloys: Theory and Practice* (Switzerland: Springer Nature: 2020).
11. I. A. Ryabtsev, *The Paton Welding J.*, No. 11: 8 (2006).
12. I. A. Kondratyev, *Poroshkovaya Provoloka, Zapolnennaya Granulirovannym Splavom* [Flux-Cored Wire Filled with Granular Alloy] (Kiev: E. O. Paton Electric Welding Institute, N.A.S. of Ukraine: 2015) (in Russian).
13. I. A. Ryabtsev, E. F. Pereplyotchikov, I. V. Mits, and I. A. Bartenev, *The Paton Welding J.*, No. 10: 18 (2007).
14. A. P. Zhudra, S. Yu. Krivchikov, and V. I. Dzykovich, *The Paton Welding J.*, No. 12: 36 (2014).
15. A. P. Zhudra, S. Yu. Krivchikov, and V. V. Petrov, *The Paton Welding J.*, No. 11: 43 (2006).
16. I. K. Pokhodnya, A. M. Suptel, and V. N. Shlepakov, *Svarka Poroshkovoy Provolokoy* [Welding with Flux-Cored Wire] (Kiev: Naukova Dumka: 1972) (in Russian).
17. V. P. Piptyuk, A. F. Petrov, S. V. Grekov, and V. A. Burshitin, *Fiziko-Khimicheskaya Otsenka Svoistv Promyshlennykh Ferrosplavov* [Physico-Chemical Assessment of the Properties of Industrial Ferroalloys] (Dnepropetrovsk: Iron and Steel Institute, N.A.S. of Ukraine: 2007), No. 14, p. 235 (in Russian).

PACS numbers: 61.05.cp, 61.50.Ks, 61.66.Dk, 61.66.Fn, 61.72.jd, 81.05.Je, 81.20.Ev

Kinetics of Interaction of IIT-4 Grade Ti with VN and Graphite during Mechanical Alloying

N. M. Bilyavina, A. M. Kuryliuk, P. P. Kogutyuk, and R. V. Ostapenko

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

A detailed x-ray diffraction study of test samples selected after each hour of the mechanochemical processing of two equimolar (IIT-4 Ti)–VN and (IIT-4 Ti)–VN–C blends in a high-energy planetary ball mill is carried out. Initial mixtures contain individual VN and C_{Gr} (graphite), as well as TiH₂ and α-Ti phases in IIT-4 grade titanium powder. Because of the crystal-structure refinement of each phase existing in the mixtures milled, it is shown that the interaction between the charge components occurs in two stages during 10 hours of processing. Namely, the formation of vacancies in VN phase dominates at the first stage, which is accompanied by embedding of released V atoms into the tetrahedral voids of the TiH₂ structure and dehydrogenating of TiH₂. The second stage is characterized by embedding of Ti atoms forming because of α-Ti destruction into VN crystal lattice with a concurrent embedding of carbon atoms into the TiH₂ structure. The final products of the mechanochemical synthesis, in addition to α-Ti, contain the following compounds: $\cong \text{TiV}_{0.33}\text{H}_{0.66}$ ((IIT-4 Ti)–VN blend) and $\cong \text{TiV}_{0.33}\text{H}_{0.66}\text{C}_{0.22}$ ((IIT-4 Ti)–VN–C blend) on the base of TiH₂ hydride, as well as $\cong \text{V}_{0.67}\text{Ti}_{0.33}\text{N}_{0.93}$ (both blends) solid solution on the base of VN. Nanoscale final products (crystallite size of up to 20 nm) of the mechanical alloying will be compacted to determine the stability of the new phases formed and to study the properties of compacts prepared in order to find out prospects of their further application.

Corresponding author: Nadiya Mykolayivna Bilyavina
E-mail: nbilyavina@ukr.net

Citation: N. M. Bilyavina, A. M. Kuryliuk, P. P. Kogutyuk, and R. V. Ostapenko, Kinetics of Interaction of IIT-4 Grade Ti with VN and Graphite during Mechanical Alloying, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **47**, No. 5: 555–565 (2025). DOI: [10.15407/mfint.47.05.0555](https://doi.org/10.15407/mfint.47.05.0555)

© Publisher PH ‘Akadempriodyka’ of the NAS of Ukraine, 2025. This is an open access article under the CC BY-ND license (<https://creativecommons.org/licenses/by-nd/4.0>)

Key words: mechanochemical synthesis, hydride, nitride, crystal structure, x-ray diffractometry.

Проведено докладне рентгенівське дослідження тестових проб, відібраних через кожну годину механохімічного оброблення у високоенергетичному планетарному млині двох еквімолярних сумішей (ПТ-4 Ti)–VN і (ПТ-4 Ti)–VN–C, які містять VN і C_{Gr} (графіт), а також TiH_2 й α -Ti в порошку титану марки ПТ-4. В результаті уточнення кристалічних структур фазових складових, наявних в оброблених сумішах, показано, що за час проведення експерименту (10 годин оброблення) взаємодія між компонентами шихти проходить у два етапи. А саме, на першому етапі синтезу домінує процес формування вакансій у нітриді VN з подальшим втіленням атомів Ванадію, які через це утворилися, до тетраедричних пор структури TiH_2 , а також перебігає процес дегідрування TiH_2 . На другому етапі відбувається втілення до структури нітриду VN атомів Титану, які утворюються в результаті руйнування структури α -Ti, а також втілення атомів Карбону до структури TiH_2 . Показано, що фінальні продукти механохімічної синтезу, окрім α -Ti, містять такі сполуки: $\cong TiV_{0,33}H_{0,66}$ (в суміші (ПТ-4 Ti)–VN) і $\cong TiV_{0,33}H_{0,66}C_{0,22}$ (в суміші (ПТ-4 Ti)–VN–C) на основі гідриду TiH_2 , а також твердий розчин $\cong V_{0,67}Ti_{0,33}N_{0,93}$ (в обох сумішах) на основі нітриду VN. Одержані нанорозмірні матеріали будуть компактовані для вивчення властивостей і визначення подальших перспектив їхнього використання.

Ключові слова: механохімічна синтеза, гідрид, нітрид, кристалічна структура, рентгенівська дифракція.

(Received 18 March, 2025; in final version, 10 May, 2025)

1. INTRODUCTION

Titanium and its alloys are widely used in medical device industry due to such characteristics as low Young's modulus, excellent corrosion resistance and increased biocompatibility [1–3]. Therefore, such titanium alloys as T6Al4V, T6Al4V (ELI) (so-called medical titanium alloys) are widely used in the manufacture of surgical instruments, external and internal prostheses, implants, *etc.* [4, 5].

Usually the sponge titanium (99.1–99.7% Ti) with Al, V and other alloying elements are used to produce titanium alloys (including T6Al4V (ELI) alloys). However, as mentioned in Refs. [6, 7] the addition of TiH_2 to initial charge of Ti alloy has a positive effect on mechanical properties of the material manufactured due to compaction of its microstructure and an increase in plasticity. Thus, the introducing of TiH_2 as an alloying element with a pore-forming ability and as an active agent in the synthesis of medical titanium Ti6Al4V made it possible to obtain a biocompatible material with a Young's modulus of 5.8–9.5 GPa, similar to human cancellous bone, which alleviates the prob-

lem of mechanical mismatch between bone and metallic titanium implant [8]. The titanium raw material that contains its hydride is industrial titanium powder of grade IIT-4, which is specifically used for the manufacture of medical implants.

Titanium carbide TiC is an ideal strengthening dopant for titanium alloys [9]. However, a set of unique properties such as high melting point and hardness, good thermal conductivity, high chemical stability [10] and even biocompatibility [11, 12] are also inherent to VN. Since TiC easily forms strong interfacial bonds with titanium matrix [9], it is also interesting to specify the nature of interaction of VN with titanium matrix. In this research, the hydrated IIT-4 grade titanium powder was selected as a component of the charge for studying the nature of interaction of VN nitride with a titanium matrix.

Therefore, the aim of this work was to study in detail the kinetics of interaction between components of two powder mixtures containing IIT-4 Ti at mechanical alloying in a high-energy planetary ball mill. Results of the study of test samples of the first equimolar (IIT-4 Ti)–VN blend, which were selected after a certain processing time, are aimed to define the nature of interaction of VN with Ti matrix. It is also assumed that TiC formed at mechanical alloying may be an additional phase in the products of mechanical alloying of the second equimolar (IIT-4 Ti)–VN–C blend.

2. EXPERIMENTAL/THEORETICAL DETAILS

Two equimolar mixtures, namely, (IIT-4 Ti)–VN (1:1) (marked as Blend 1) and (IIT-4 Ti)–VN–C (1:1:1) (Blend 2) were the objects of this study. These blends as starting components contain dispersed (up to 50 μm) powders of IIT-4 Ti (98.0% wt. of purity), VN (99.9% wt. of purity) and graphite (C, 99.99% wt. of purity). Taking into account the results of our previous research [13], 1% vol. graphite was also added to Blend 1 to prevent possible oxidation of a charge.

The prepared mixtures were placed in steel vials for further mechanical alloying in a high-energy planetary ball mill. Processing of the charges was carried out using steel balls (10 mm of diameter, the mass ratio of the balls to powder was 20:1) at a rotation speed of 1400 rpm in a cyclic mode (20 min of treatment and 10 min of cooling). Temperature of the working reactor of the mill did not exceed 100°C.

Phase transformations that the charge components undergo during mechanical processing were studied by x-ray diffraction (XRD) method on the test samples selected after each 1 hour of milling. XRD data were collected with ДРОН-3М automatic diffractometer (radiation CuK_α) in a discrete mode under the following scanning parameters: observation range $2\theta = 20^\circ\text{--}100^\circ$, step scan of 0.05° and counting time per step at 3 s. The original software package [14], including full com-

plex of standard Rietveld procedures, has been used for analysis and interpretation of the XRD 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 the least square method for lattice parameters refinement; testing of the structure models proposed and refining crystal structure parameters (including coordinates of atoms, atomic position filling, temperature parameter, *etc.*).

3. RESULTS AND DISCUSSION

The results XRD study of initial powders of graphite, VN and IIT-4 Ti revealed the following: graphite and vanadium nitride powders contain C_{Gr} and $VN_{0.93}$ phases, consequently, while IIT-4 titanium powder is a mixture of TiH_2 , completely filled with nitrogen atoms, and α -Ti itself. According to the quantitative phase analysis, content of TiH_2 phase in IIT-4 titanium powder is equal to 60% wt. (64% vol.). The diffraction patterns of the initial equimolar Blend 1 and Blend 2 mixtures are shown in Fig. 1.

The results of XRD study of the interaction kinetics of IIT-4 Ti with VN and graphite revealed following: the phase composition of the test samples obtained from (IIT-4 Ti)–VN mixture (Blend 1) does not change at mechanochemical processing, while the graphite phase in test samples obtained from (IIT-4 Ti)–VN–C mixture (Blend 2) gradually disappears (Fig. 1).

VN and TiH_2 are the main phase components of all test samples but

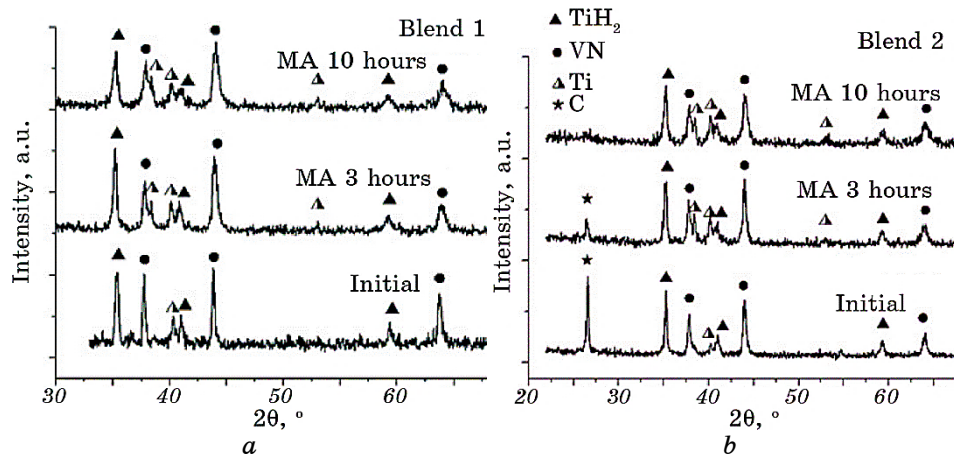


Fig. 1. Fragments of XRD patterns of the equimolar (IIT-4 Ti)–VN (Blend 1) and (IIT-4 Ti)–VN–C (Blend 2) mixtures: initial and after processing in a ball mill.

their crystal structure is somehow modified at mechanochemical processing. First of all, the lattice parameters of these phases gradually change (Fig. 2).

As a result of the calculations performed for refinement of the VN crystal structure, it was found that q_1 —the filling degree of $4a$ position by vanadium atoms—gradually changes, resulting in the total number of atoms per lattice equal to $4q_1$ (Table 1). This undoubtedly indicates the formation of atomic vacancies in the structure, the number of which is $4(1 - q_1)$ per unit cell. Figure 3, *a* illustrates the change in the total number of atomic vacancies per VN lattice at mechanical alloying.

The crystal structure of TiH_2 phase undergoes transformations, which are more complex. At the beginning of mechanical alloying this phase keeps a cubic structure of the CaF_2 type, which transforms into rhombohedral after 2 hours of milling due to internal deformation (Table 1). However, external deformation of the crystal lattice is not observed, which allows providing the lattice parameter calculations of TiH_2 phase in the cubic syngony (Fig. 2, *b*). That is why further considerations of TiH_2 lattice parameters will be presented in the cubic aspect.

According to our model (listed in Table 1 and presented in Fig. 4 in cubic aspect), one half of the undeformed tetrahedral voids of TiH_2 gradually loses hydrogen atoms, while another half of the tetrahedral voids is partially filled with vanadium atoms, displacing hydrogen atoms at the same time. Those processes lead to a certain deformation of voids at the beginning of mechanical alloying.

Analysis of the structural calculation data revealed that at the beginning of mechanical alloying (up to 5 hours of milling) the amount of hydrogen in TiH_2 rapidly decreases (Fig. 5), while the number of va-

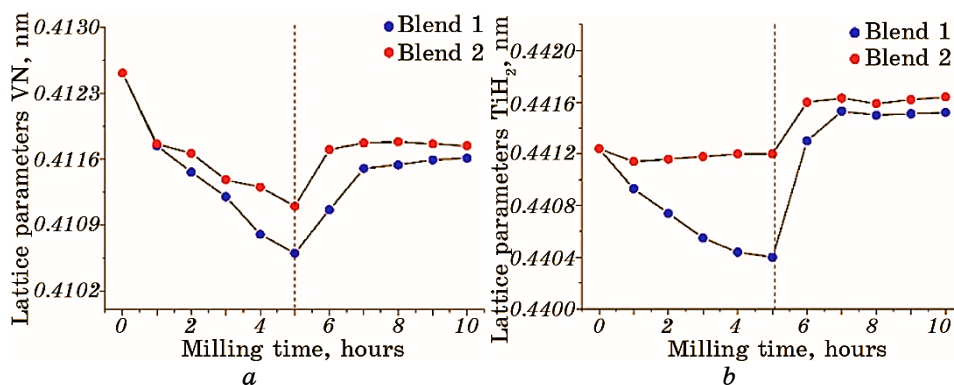


Fig. 2. Dependences of lattice parameters of VN (*a*) and TiH_2 (*b*) phases of equimolar (IIT-4 Ti)-VN (Blend 1) and (IIT-4 Ti)-VN-C (Blend 2) mixtures after their processing in a ball mill.

TABLE 1. Crystal structure data for VN and TiH₂ phases of (ИТ-4 Ti)–VN–C mixture (Blend 2) at the beginning of its processing in a ball mill (3 hour of milling).

Atom	Site	Site occ.	x	y	z
VN					
V	4a	0.770(4)	0	0	0
N	4b	0.935	0.5	0.5	0.5
Space group			$F\bar{4}3m$ (No. 216)		
Lattice parameter a , nm			0.41138(6)		
Total isotropic B factor, nm ²			$B = 1.82(3) \cdot 10^{-2}$		
Phase			$V_{0.77}N_{0.93}$		
Reliability factor			$R_B = 0.006$		
Atom	Site	Site occ.	x	y	z
Rhombohedrally distorted TiH ₂					
Ti	3a	1.00(1)	0	0	0
V	3a	0.28(1)	0	0	0.327(2)
H(1)	3a	0.72(1)	0	0	0.327(2)
H(2)	3a	0.55(2)	0	0	0.666(2)
C	3a	0.04(2)	0	0	0.666(2)
Space group			$R\bar{3}m$ (No. 160)		
Lattice parameter a , c , nm			$a = 0.3121(2)$, $c = 0.7647(3)$		
Total isotropic B factor, nm ²			$B = 1.72(3) \cdot 10^{-2}$		
Calculated phase content, at. %			TiV _{0.3} H _{1.3} C _{0.04}		
Reliability factor			$R_B = 0.02$		

cancies formed in the VN corresponds to the number of V atoms embedded in the tetrahedral voids of TiH₂ structure (Fig. 3). At the same stage, the carbon atoms from the graphite of (ИТ-4 Ti)–VN–C mixture (Blend 2) start to displace the hydrogen atoms in undeformed tetrahedral voids (Figs. 4, 5). This leads to a decrease in the amount of graphite phase in Blend 2 mixture (Fig. 1).

Certain stabilization of TiH₂ structure is achieved after 5 hours of mechanochemical processing, when the undeformed tetrahedral voids become empty: filling of the position with H(2) atoms is zero for Blend 1, while in the case of Blend 2 these empty voids are gradually filled with carbon atoms (Tables 1, 2, Fig. 4). Moreover, the number of additional vanadium atoms in TiH₂ structure practically does not change (Fig. 3, *b*). However, at this stage, other processes dominate, in which the number of vacancies in VN structure gradually decreases (Fig. 3,

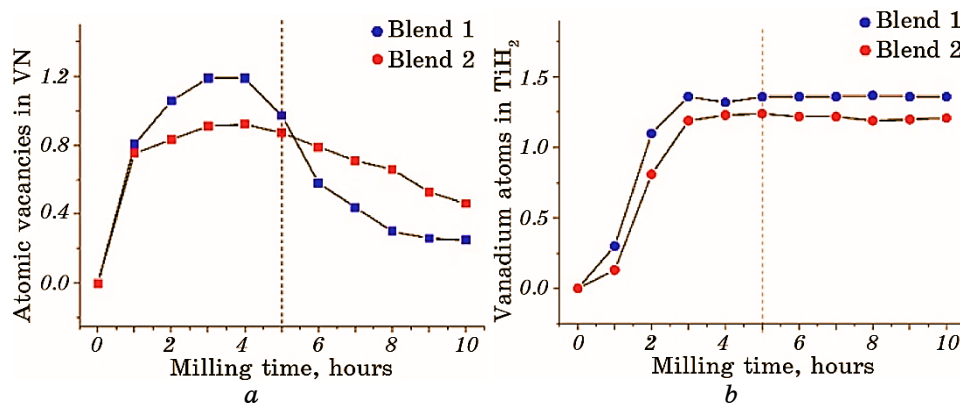


Fig. 3. Dependences of atomic vacancies number in VN (a) and additional V atoms in TiH₂ phases of equimolar (IIT-4 Ti)-VN (Blend 1) and (IIT-4 Ti)-VN-C (Blend 2) mixtures after their processing in a ball mill.

a). The crystal data for VN and TiH₂ phases of the final product of the mechanochemical synthesis of (IIT-4 Ti)-VN-C mixture (Blend 2) are listed in Table 2.

XRD results obtained here for test samples selected after each full hour of mechanical alloying of equimolar (IIT-4 Ti)-VN and (IIT-4 Ti)-VN-C mixtures in a high-energy planetary ball mill provide information on the kinetics of interaction of the phases present in these blends, namely, the TiH₂ and α -Ti phases, which are the components of IIT-4 Ti, VN and graphite. It is shown that mechanical alloying takes place in two

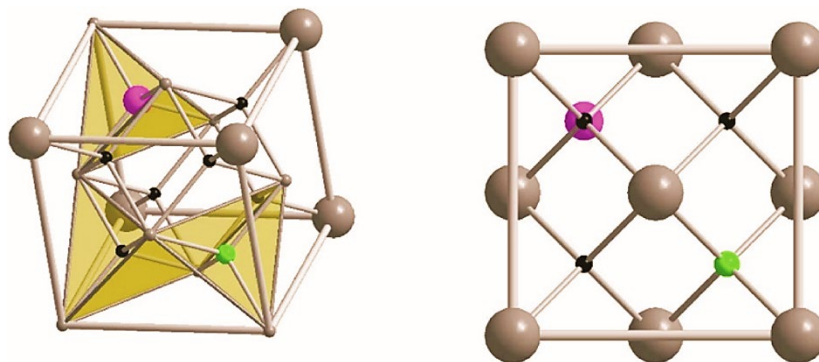


Fig. 4. Crystal structure of the rhombohedrally deformed TiH₂ phase and its projection presented in the cubic aspect. Slightly deformed VTi₄ polyhedra with V atom in the centre (Ti atoms is grey circles, V atoms is purple circles) and undeformed HTi₄ and CTi₄ polyhedra with a hydrogen or a carbon atom in the centre (hydrogen atoms is small black circles, carbon atoms is small green circles).

stages regardless of the charge composition (presence/absence of graphite). Each stage is characterized by its own mechanism.

At the first stage of mechanical alloying (up to 5 hours of milling), part of V atoms leaves the crystal structure of VN, forming individual V clusters in the reaction zone of a mill because of the applied shock load. This process is accompanied by a gradual accumulation of vacancies in VN (Fig. 3, *a*). Most of V clusters formed (probably as ions) are embedded in the tetrahedral voids of the rhombohedrally deformed structure of TiH_2 , which are released during its dehydrogenation (Figs. 3, *b*, 5). At the same stage, the process of filling the released voids of TiH_2 structure with carbon atoms begins, apparently.

At the end of the first stage of mechanical alloying, both dehydration and transformation of TiH_2 structure become balanced (the number of embedded V atoms does not change (Figs. 3, *b*, 5)). Therefore, at the second stage of synthesis (after 5 hours of processing), in our opinion, the process of embedding of Ti atoms (formed during partial decomposition of α -Ti) into the crystal structure of VN prevails and leads to a gradual decrease in the fraction of vacancies (Fig. 3, *a*).

It should be noted that during experiment, TiH_2 does not show any signs of destruction (except for some dehydrogenation; Fig. 4), and its interaction with VN and carbon leads to the formation of a compound with the composition $\cong \text{TiV}_{0.33}\text{H}_{0.66}\text{C}_{0.22}$ ($\text{Ti}_3\text{VH}_2\text{C}_{0.66}$). In turn, VN accumulates a certain amount of titanium, forming $\text{V}_{0.67}\text{Ti}_{0.33}\text{N}_{0.93}$ solid solution with about 16 at.% of Ti. These results fully correspond to the data of Refs. [15, 16]. M. A. Roldán *et al.* [15] synthesized $\text{V}_{0.75}\text{Ti}_{0.25}\text{N}_{0.87}$ solid solution in a nitrogen environment from mixture of pure metals

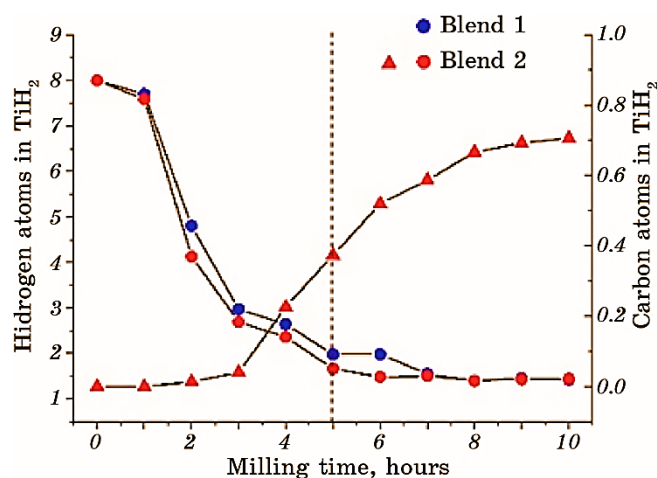


Fig. 5. Dependences of the number of hydrogen atoms (circles) and carbon atoms (triangles) in the structure of TiH_2 of equimolar (IIT-4 Ti)–VN (Blend 1) and (IIT-4 Ti)–VN–C (Blend 2) mixtures after their processing in a ball mill.

TABLE 2. Crystal data for VN and TiH₂ of (IIT-4 Ti)–VN–C mixture (Blend 2) at the end of its processing in a ball mill (10 hour).

Atom	Site	Site occ.	x	y	z
VN					
V	$4a$	0.640(4)	0	0	0
Ti	$4a$	0.300(4)	0	0	0
N	$4b$	0.935	0.5	0.5	0.5
Space group			$F\bar{4}3m$ (No. 216)		
Lattice parameter a , nm			0.41178(5)		
Total isotropic B factor, nm ²			$B = 0.90(4) \cdot 10^{-2}$		
Phase			$V_{0.67}Ti_{0.33}N_{0.93}$		
Reliability factor			$R_B = 0.026$		
Atom	Site	Site occ.	x	y	z
Rhombohedrally distorted TiH ₂					
Ti	$3a$	1.00(1)	0	0	0
V	$3a$	0.33(1)	0	0	0.327(2)
H(1)	$3a$	0.66(1)	0	0	0.327(2)
C	$3a$	0.22(2)	0	0	0.666(2)
Space group			$R\bar{3}m$ (No. 160)		
Lattice parameters a , c , nm			$a = 0.3120(2)$, $c = 0.7649(3)$		
Total isotropic B factor, nm ²			$B = 1.58(5) \cdot 10^{-2}$		
Calculated phase content, at. %			$TiV_{0.33}H_{0.66}C_{0.22}$		
Reliability factor			$R_B = 0.026$		

(Ti and V) using mechanochemical method, while according to our results [16] $V_{0.75}Ti_{0.25}N_{1.6}$ solid solution supersaturated with nitrogen was synthesized by mechanical alloying of VN and TiN mixture.

Comparison of the nature of interaction between components of (IIT-4 Ti)–VN (Blend 1) and (IIT-4 Ti)–VN–C (Blend 2) mixtures based on the kinetic curves shows that the processes studied here are occurring more ‘softly’ in the presence of graphite (Figs. 2, 3). The final products of the blend component interaction are the following compounds: $\cong TiV_{0.33}H_{0.66}$ (Blend 1) and $\cong TiV_{0.33}H_{0.66}C_{0.22}$ (Blend 2) based on the TiH₂, as well as the solid solution $\cong V_{0.67}Ti_{0.33}N_{0.93}$ (Blend 1, Blend 2) based on the VN.

4. CONCLUSION

1. A detailed XRD study of test samples selected after each hour of

mechanochemical processing in a high-energy planetary ball mill of two equimolar (IIT-4 Ti)–VN and (IIT-4 Ti)–VN–C mixtures, which contain VN and C_{Gr} (graphite) phases, as well as TiH₂ and α -Ti phases in IIT-4 grade titanium was carried out.

2. Kinetics of interaction of the components was studied applying X-ray diffraction method, based on the refinement of the crystal structure of each phase present in the mixtures milled.

3. It is shown that the interaction of the components of the mixtures takes place in two stages. At the first stage, the process of formation of vacancies in VN dominates, which is accompanied by embedding of knocked out V atoms into the tetrahedral voids of TiH₂ structure and dehydrogenation of TiH₂. At the second stage, Ti clusters are embedded into the structure of VN while the carbon atoms are embedded into TiH₂ structure.

4. The final products of the interaction process at mechanical alloying of the mixtures studied are following compounds: $\cong \text{TiV}_{0.33}\text{H}_{0.66}$ (Blend 1) and $\cong \text{TiV}_{0.33}\text{H}_{0.66}\text{C}_{0.22}$ (Blend 2) on the base of TiH₂, as well as $\cong \text{V}_{0.67}\text{Ti}_{0.33}\text{N}_{0.93}$ (Blend 1, Blend 2) solid solution of the base of VN.

5. The nanocrystalline (crystalline size up to 20 nm) final products of mechanochemical synthesis, obtained in the work, will be compacted to determine the stability of the phases formed, as well as to study the properties of these materials to find out prospects of their further application.

The work was carried out with the financial support of the Ministry of Education and Science of Ukraine (project No. 24BF051-01) and a grant for the promising development of the scientific direction ‘Mathematical Sciences and Natural Sciences’ at the Taras Shevchenko National University of Kyiv.

REFERENCES

1. M. Kulkarni, A. Mazare, P. Schmuki, A. Iglič, and A. Seifalian, *Nanomedicine*, **111**, No. 615: 111 (2014).
2. M. J. Jackson, J. Kopac, M. Balazic, D. Bombac, M. Brojan, and F. Kosel, *Surgical Tools and Medical Devices* (Eds. W. Ahmed and M. J. Jackson) (Springer: 2016), p. 475.
3. A. Festas, A. Ramos, and J. P. Davim, *Proc. the Institution of Mech. Eng. B: J. Eng. Manufacture*, **236**, No. 4: 309 (2022).
4. J. Kudrman, J. Fousek, V. Brezina, R. Míková, and J. Vesely, *Kovove Materiology*, **45**, No. 4: 199 (2007).
5. W. Abd-Elaziem, M. A. Darwish, A. Hamada, and W. M. Daoush, *Mater. Design*, **241**: 112850 (2024).
6. H. T. Wang, M. Lefler, Z. Z. Fang, T. Lei, S. M. Fang, J. M. Zhang, and Q. Zhao, *Key Eng. Mater.*, **436**: 57 (2010).
7. F. Kuang, Y. Pan, J. Sun, Y. Liu, C. Lei, and X. Lu, *J. Mater. Process. Technol.*, **329**: 118459. (2024).
8. Y. W. Gu, M. S. Yong, B. Y. Tay, and C. S. Lim, *Mater. Sci. Eng. C*, **29**, No. 5:

- 1515 (2009).
9. V. R. M. Gonçalves, D. R. N. Corrêa, T. S. P. de Sousa, C. A. F. Pintão, C. R. Grandini, C. R. M. Afonso, and P. N. Lisboa-Filho, *J. Mater. Res. Technol.*, **30**: 879 (2024).
10. S. Wang, X. Yu, J. Zhang, L. Wang, K. Leinenweber, D. He, and Y. Zhao, *Crystal Growth Design*, **16**, Iss. 1: 351 (2016).
11. C. Yang, H. Yu, Y. Gao, W. Guo, Z. Li, Y. Chen, and C. Guo, *Nanoscale*, **11**, No. 4: 1968 (2019).
12. J. Bautista-Ruiz, A. Elhadad, and W. Aperador, *Mater. Chem. Phys.*, **326**: 129856 (2024).
13. T. G. Avramenko, A. M. Kuryliuk, O. I. Nakonechna, and N. N. Belyavina, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **44**, No. 6: 713 (2022).
14. M. Dashevskiy, O. Boshko, O. Nakonechna, and N. Belyavina, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **39**, No. 4: 541 (2017).
15. M. A. Roldán, M. D. Alcalá, and C. Real, *Ceram. Int.*, **38**, Iss. 1: 687 (2012).
16. N. Belyavina, O. Nakonechna, A. Kuryliuk, P. Kogutyuk, D. Stratiichuk, and V. Turkevich, *Mater. Proc.*, **14**, Iss. 1: 16 (2023).