

Vol. 45, No. 8
August 2023

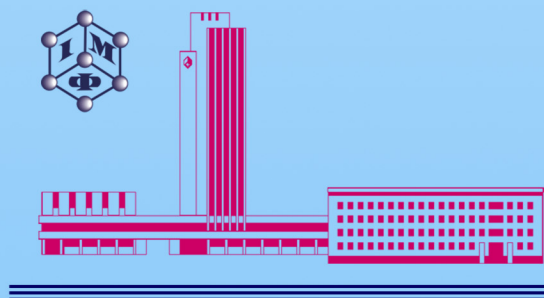
ISSN 1024-1809

METALLOPHYSICS and ADVANCED TECHNOLOGIES

МЕТАЛОФІЗИКА ТА НОВІТНІ ТЕХНОЛОГІЇ

METALLOFIZIKA I NOVEISHIE TEKHNologii

Том 45, № 8 (2023)



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

Засновник: НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ, ІНСТИТУТ МЕТАЛОФІЗИКИ ІМ. Г. В. КУРДЮМОВА НАН УКРАЇНИ
Видавець: ВД «Академперіодика» НАН України

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

Щомісячний науковий журнал		A Monthly Research Journal	
РЕДАКЦІЙНА КОЛЕГІЯ		EDITORIAL BOARD	
В. А. ТАТАРЕНКО	<i>головний редактор, чл.-кор. НАН України (Інститут металофізики ім. Г. В. Курдюмова НАН України, Київ)</i>	V. A. TATARENKO	<i>Editor-in-Chief, Corresponding Member of the N.A.S.Ukr., G.V. Kurdymov Institute for Metal Physics, N.A.S.Ukr., Kyiv</i>
С. В. АХОНІН	<i>акад. НАН України (Інститут електрозварювання ім. Є. О. Патона НАН України, Київ)</i>	S. V. AKHONIN	<i>Member of the N.A.S.Ukr., E. O. Paton Electric Welding Institute, N.A.S.Ukr., Kyiv</i>
М. О. БІЛОГОЛОВСЬКИЙ	<i>проф. (Київський академічний університет НАН та МОН України, Київ)</i>	M. O. BELOGOLOVSKIY	<i>Professor, Kyiv Academic University, N.A.S.Ukr. & M.E.S.Ukr., Kyiv</i>
Т. М. БРИК	<i>д-р фіз.-мат. наук (Інститут фізики конденсованих систем НАН України, Львів)</i>	T. M. BRYK	<i>Dr. Sc. (Phys.-Math.), Institute for Condensed Matter Physics, N.A.S.Ukr., Lviv</i>
М. О. ВАСИЛЬСВ	<i>проф. (Інститут металофізики ім. Г. В. Курдюмова НАН України, Київ)</i>	M. O. VASILIEV	<i>Professor, G.V. Kurdymov Institute for Metal Physics, N.A.S.Ukr., Kyiv</i>
В. Г. ГАВРИЛЮК	<i>проф. (Інститут металофізики ім. Г. В. Курдюмова НАН України, Київ)</i>	V. G. GAVRILJUK	<i>Professor, G.V. Kurdymov Institute for Metal Physics, N.A.S.Ukr., Kyiv</i>
О. С. ГАЦЕНКО	<i>відповідальний секретар редколегії, канд. фіз.-мат. наук (Інститут металофізики ім. Г. В. Курдюмова НАН України, Київ)</i>	O. S. GATSENKO	<i>Executive Managing Editor, Ph.D. (Phys.-Math.), G.V. Kurdymov Institute for Metal Physics, N.A.S.Ukr., Kyiv</i>
Г. С. ГРЕЧНСВ	<i>проф. (Фізико-технічний інститут низьких температур ім. Б. І. Веркіна НАН України, Харків)</i>	G. E. GRECHNEV	<i>Professor, B. Verkin Institute for Low Temperature Physics and Engineering, N.A.S.Ukr., Kharkiv</i>
Т. В. ЗАПОРОЖЕЦЬ	<i>проф. (Черкаський національний університет імені Богдана Хмельницького МОН України, Черкаси)</i>	T. V. ZAPOROZHETS	<i>Professor, Bohdan Khmelnytsky National University of Cherkasy, M.E.S.Ukr., Cherkasy</i>
О. М. ІВАСИШИН	<i>акад. НАН України (Інститут металофізики ім. Г. В. Курдюмова НАН України, Київ)</i>	O. M. IVASISHIN	<i>Member of the N.A.S.Ukr., G.V. Kurdymov Institute for Metal Physics, N.A.S.Ukr., Kyiv</i>
Ю. М. КОВАЛЬ	<i>чл.-кор. НАН України (Інститут металофізики ім. Г. В. Курдюмова НАН України, Київ)</i>	YU. M. KOVAL'	<i>Corresponding Member of the N.A.S.Ukr., G.V. Kurdymov Institute for Metal Physics, N.A.S.Ukr., Kyiv</i>
О. А. КОРДЮК	<i>акад. НАН України (Київський академічний університет НАН та МОН України, Київ)</i>	O. A. KORDYUK	<i>Member of the N.A.S.Ukr., Kyiv Academic University, N.A.S.Ukr. & M.E.S.Ukr., Kyiv</i>
С. О. КОТРЕЧКО	<i>заступник головного редактора, чл.-кор. НАН України (Інститут металофізики ім. Г. В. Курдюмова НАН України, Київ)</i>	S. O. KOTRECHKO	<i>Deputy Editor-in-Chief, Corresponding Member of the N.A.S.Ukr., G.V. Kurdymov Institute for Metal Physics, N.A.S.Ukr., Kyiv</i>
Ю. В. КУДРЯВЦЕВ	<i>проф. (Інститут металофізики ім. Г. В. Курдюмова НАН України, Київ)</i>	YU. V. KUDRYAVTSEV	<i>Professor, G.V. Kurdymov Institute for Metal Physics, N.A.S.Ukr., Kyiv</i>
С. Г. ЛЕНЬ	<i>заступник головного редактора, проф. (Інститут металофізики ім. Г. В. Курдюмова НАН України, Київ)</i>	E. G. LEN	<i>Deputy Editor-in-Chief, Professor, G.V. Kurdymov Institute for Metal Physics, N.A.S.Ukr., Kyiv</i>
В. В. ЛІЗУНОВ	<i>проф. (Інститут металофізики ім. Г. В. Курдюмова НАН України, Київ)</i>	V. V. LIZUNOV	<i>Professor, G.V. Kurdymov Institute for Metal Physics, N.A.S.Ukr., Kyiv</i>
В. Ф. ЛОСЬ	<i>проф. (Інститут магнетизму НАН та МОН України, Київ)</i>	V. F. LOS	<i>Professor, Institute of Magnetism, N.A.S.Ukr. & M.E.S.Ukr., Kyiv</i>
П. Є. МАРКОВСЬКИЙ	<i>д-р техн. наук (Інститут металофізики ім. Г. В. Курдюмова НАН України, Київ)</i>	P. E. MARKOVSKY	<i>Dr. Sc. (Tech.), G.V. Kurdymov Institute for Metal Physics, N.A.S.Ukr., Kyiv</i>
Б. М. МОРДЮК	<i>д-р фіз.-мат. наук (Інститут металофізики ім. Г. В. Курдюмова НАН України, Київ)</i>	B. M. MORDYUK	<i>Dr. Sc. (Phys.-Math.), G.V. Kurdymov Institute for Metal Physics, N.A.S.Ukr., Kyiv</i>
В. М. НЕСТЕРЕНКОВ	<i>чл.-кор. НАН України (Інститут електрозварювання ім. Є. О. Патона НАН України, Київ)</i>	V. M. NESTERENKOV	<i>Corresponding Member of the N.A.S.Ukr., E. O. Paton Electric Welding Institute, N.A.S.Ukr., Kyiv</i>
О. Д. ПОГРЕБНЯК	<i>проф. (Сумський державний університет, МОН України, Суми)</i>	O. D. POGREBNJAK	<i>Professor, Sumy State University, M.E.S.Ukr., Sumy</i>
Ю. М. ПОДРЕЗОВ	<i>д-р фіз.-мат. наук (Інститут проблем матеріалознавства ім. І. М. Францевича НАН України, Київ)</i>	YU. M. PODREZOV	<i>Dr. Sc. (Phys.-Math.), I. M. Frantsevych Institute for Problems of Materials Science, N.A.S.Ukr., Kyiv</i>
Т. М. РАДЧЕНКО	<i>д-р фіз.-мат. наук (Інститут металофізики ім. Г. В. Курдюмова НАН України, Київ)</i>	T. M. RADCHENKO	<i>Dr. Sc. (Phys.-Math.), G.V. Kurdymov Institute for Metal Physics, N.A.S.Ukr., Kyiv</i>
О. Д. РУДЬ	<i>проф. (Інститут металофізики ім. Г. В. Курдюмова НАН України, Київ)</i>	O. D. RUD'	<i>Professor, G.V. Kurdymov Institute for Metal Physics, N.A.S.Ukr., Kyiv</i>
В. М. УВАРОВ	<i>чл.-кор. НАН України (Інститут металофізики ім. Г. В. Курдюмова НАН України, Київ)</i>	V. M. UVAROV	<i>Corresponding Member of the N.A.S.Ukr., G.V. Kurdymov Institute for Metal Physics, N.A.S.Ukr., Kyiv</i>
А. І. УСТИНОВ	<i>проф. (Інститут електрозварювання ім. Є. О. Патона НАН України, Київ)</i>	A. I. USTINOV	<i>Professor, E. O. Paton Electric Welding Institute, N.A.S.Ukr., Kyiv</i>
О. В. ФІЛАТОВ	<i>д-р фіз.-мат. наук (Інститут металофізики ім. Г. В. Курдюмова НАН України, Київ)</i>	O. V. FILATOV	<i>Dr. Sc. (Phys.-Math.), G.V. Kurdymov Institute for Metal Physics, N.A.S.Ukr., Kyiv</i>
С. О. ФІРСТОВ	<i>акад. НАН України (Інститут проблем матеріалознавства ім. І. М. Францевича НАН України, Київ)</i>	S. O. FIRSTOV	<i>Member of the N.A.S.Ukr., I. M. Frantsevych Institute for Problems of Materials Science, N.A.S.Ukr., Kyiv</i>
Т. С. ЧЕРЕПОВА	<i>д-р техн. наук (Інститут металофізики ім. Г. В. Курдюмова НАН України, Київ)</i>	T. S. CHEREPOVA	<i>Dr. Sc. (Tech.), G.V. Kurdymov Institute for Metal Physics, N.A.S.Ukr., Kyiv</i>

EDITORIAL ADVISORY BOARD MEMBERS AND REGIONAL EDITORS

Professor Ing. Ivo DLOUHÝ <i>Institute of Physics of Materials, Czech Academy of Sciences, Brno, Czech Republic</i>	Professor Janusz DUBOWIK <i>Institute of Molecular Physics, Polish Academy of Sciences, Poznań, Poland</i>	Professor Elena V. PERELOMA <i>University of Wollongong, School of Mechanical, Materials and Mechatronic Engineering, Wollongong, Sydney Area, Australia</i>
Professor Han DONG <i>School of Materials Science and Engineering, Shanghai University, Shanghai, P.R. China</i>	Professor Leszek B. MAGALAS <i>AGH University of Science and Technology, Faculty of Metals Engineering and Industrial Computer Science, Kraków, Poland</i>	Dr. Patrice E. A. TURCHI <i>Lawrence Livermore National Laboratory, Condensed Matter and Materials Division, Livermore, CA, U.S.A.</i>

AN INTERNATIONAL RESEARCH JOURNAL

METALLOPHYSICS AND ADVANCED TECHNOLOGIES

(Metallofizika i Noveishie Tekhnologii)

FOUNDED IN SEPTEMBER, 1979

Volume 45, No. 8; August 2023

CONTENTS

Editorial Announcements	Information for Foreign Subscribers	V
	Information for Contributors	VII
Electronic Structure and Properties	Effect of Dielectric Confinement on Energetics of Quantum Metal Films: Analysis of Calculation Results <i>V. V. POGOSOV</i>	935
Crystal-Lattice Defects	Sintered Al–Si–Ni Alloy: Structure and Properties. I. Powder Production <i>G. A. BAGLIUK, T. O. MONASTYRSKA, V. V. KAVERINSKY, V. P. BEVZ, V. K. NOSENKO, I. M. KIRIAN, D. L. PAKULA, V. V. KYRYLCHUK, A. M. LAKHNIK, and O. D. RUD</i>	951
Metallic Surfaces and Films	Morphology of Barrier Coatings and Formation of an Interphase Boundary by Brazing of Dissimilar Alloys <i>S. V. MAKSYMOMA, P. V. KOVALCHUK, and V. V. VORONOV</i>	963
	Influence of Refractory Elements on Phase–Structural Stability of Heat-Resistant Corrosion-Resistant Alloys for Gas-Turbine Blades <i>Y. H. KVASNYTSKA, I. A. SHALEVSKA, A. I. BALITSKII, L. M. IVASKEVICH, I. I. MAKSIUTA, and K. H. KVASNYTSKA</i>	975
	Machining of Titanium Alloys With a Cemented Carbide Cutting Tools with Tungsten-Based Vacuum-Arc Nitride Coatings <i>I. V. SERDIUK, V. O. STOLBOVYI, V. BUSHLYA, R. V. KRYVOSHAPKA, Remi LEMAIRE, and Romain WALTER</i>	993
Physics of	A Physically-Based Criterion for Determining the	

Strength and Plasticity	Critical Brittleness Temperature from Charpy Impact PRV Tests for Reactor Steels and Their Welds <i>S. KOTRECHKO, V. REVKA, and K. SOROKA</i>	1015
	Mechanical Stability and Brittleness of Metals and Alloys. Pt. 1. Parameters and Criteria of the Stable State <i>Yu. Ya. MESHKOV and H. P. ZIMINA</i>	1029

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

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

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

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

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

Printed by Publishing House ‘Akademperiodyka’, 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.45.08>

МЕТАЛОФІЗИКА
ТА
НОВІТНІ ТЕХНОЛОГІЇ

МІЖНАРОДНИЙ НАУКОВИЙ ЖУРНАЛ
ЗАСНОВАНИЙ У ВЕРЕСНІ 1979 р.
Том 45, № 8; серпень, 2023

ЗМІСТ

Редакційні оголошення	Інформація для закордонних передплатників	V
	Інформація для авторів	VII
Електронні структура та властивості	Вплив діелектричного оточення на енергетику квантових металевих плівок. Аналіза результатів розрахунків <i>В. В. ПОГОСОВ</i>	935
Дефекти кристалічної ґратниці	Спечений стоп Al–Si–Ni: структура та властивості. І. Одержання порошку <i>Г. А. БАГЛЮК, Т. О. МОНАСТИРСЬКА, В. В. КАВЕРИНСЬКИЙ, В. П. БЕВЗ, В. К. НОСЕНКО, І. М. КІР'ЯН, Д. Л. ПАКУЛА, В. В. КИРИЛЬЧУК, А. М. ЛАХНІК, О. Д. РУДЬ</i>	951
Металічні поверхні та плівки	Морфологія бар'єрних покриттів і формування міжфазної межі лютуванням різномірних стопів <i>С. В. МАКСИМОВА, П. В. КОВАЛЬЧУК, В. В. ВОРОНОВ</i>	963
	Вплив вогнетривких елементів на фазово-структурну стійкість жароміцних корозійностійких стопів для лопаток газових турбін <i>Ю. Г. КВАСНИЦЬКА, І. А. ШАЛЕВСЬКА, А. І. БАЛИЦЬКИЙ, Л. М. ІВАСКЕВИЧ, І. І. МАКСЮТА, К. Г. КВАСНИЦЬКА</i>	975
	Механічне оброблення титанових стопів твердостопним різальним інструментом з вакуумно-дуговими нітридними покриттями на основі вольфраму <i>І. В. СЕРДЮК, В. О. СТОЛБОВИЙ, В. БУШЛЯ, Р. В. КРИВОШАПКА, Ремі ЛЕМАР, Ромен ВОЛТЕР</i>	993
Фізика міцності та пластичності	Фізично обґрунтований критерій визначення критичної температури крихкості за випробувань на ударну в'язкість реакторних криць і їхніх зварних	

	швів <i>С. КОТРЕЧКО, В. РЕВКА, К. СОРОКА</i>	1015
	Механічна стабільність і крихкість металів і стопів. Ч. 1. Параметри та критерії стабільного стану <i>Ю. Я. МЄШКОВ, Г. П. ЗІМІНА</i>	1029

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

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

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

Затверджено до друку вченою радою Інституту металофізики ім. Г. В. Курдюмова НАН України
Друкується за постановою редакційної колегії журналу англійською, або українською мовами

Підписано до друку 30.08.2023 р. Формат 70 × 100/16.

Ум. друк. арк. 9,26. Обл.-вид. арк. 8,52.

Тираж 61 пр. Зам. № 7124 від 07.12.2023 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.45.08>

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 латинській 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: 41.20.Cv, 71.15.Mb, 73.22.Dj, 73.30.+y, 73.40.Ns, 77.55.-g

Effect of Dielectric Confinement on Energetics of Quantum Metal Films: Analysis of Calculation Results

V. V. Pogoso

*Zaporizhzhia Polytechnic National University,
64 Zhukovsky Str.,
UA-69063 Zaporizhzhya, Ukraine*

We examine thin film on a dielectric substrate (vacuum/Al/SiO₂) in the stabilized jelly model. We investigate the surface and size effects on the effective potential and the electron work function for the weak quantization regime. We find that a dielectric environment generally leads to the decrease of the work function. We introduce the position of a conduction band for the dielectric as the input parameter in the self-consistency procedure. The effect of dielectric confinement for the energy characteristics of the asymmetric metal–dielectric sandwiches is reduced to only by the surface-area weighted average value of the dielectric constants. This conclusion follows from the application of the Gauss theorem for a conducting sphere with an inhomogeneous dielectric coating. The flow of electrons from the dielectric face to the vacuum one due to the contact-potential difference manifests itself in the appearance of a potential barrier above the vacuum level or positive values of the effective potential. The barrier height depends on the used local or non-local approximation of the exchange–correlation energy. The nontrivial origin and behaviour of the calculated effective potential on the vacuum side of the film, as well as the reasons for it, are discussed. In the focus of our representations, we analyse the recent results of measurements of the contact-potential difference depending on the number of Si atoms deposited on the free face of ytterbium nanofilms on the Si(111) substrates. Comparison and discrepancies between our self-consistent calculations for simple metals and these experiments are discussed.

Key words: surface electronic phenomena, work function, surface potential, contact potential difference, metal–insulator interfaces, sandwiches, films,

Corresponding author: Valentyn Val'terovych Pogoso
E-mail: vpogoso@zntu.edu.ua

Citation: V. V. Pogoso, Effect of Dielectric Confinement on Energetics of Quantum Metal Films: Analysis of Calculation Results, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **45**, No. 8: 935–949 (2023). DOI: [10.15407/mfint.45.08.0935](https://doi.org/10.15407/mfint.45.08.0935)

jelly models.

В моделю стабільного желе для режиму слабого квантування досліджено вплив поверхневого та розмірного ефектів на ефективний потенціал і роботу виходу електрона металевій наноплівці на діелектричній підкладинці (вакуум/ Al/SiO_2). Виявлено, що контакт з діелектриком, як правило, приводить до зменшення роботи виходу електрона. У процедурі самоузгодження в якості вхідного параметра введено положення зони провідності для діелектрика. Вплив контакту з діелектриками на енергетичні характеристики асиметричних метал-діелектричних сандвічей зводиться лише до середнього зваженого за площею контакту значення діелектричних проникностей обкладинок. Цей результат є наслідком застосування Гаусової теореми для провідної сфери з неоднорідним діелектричним покриттям. Зсув електронів у плівці від діелектричної підкладинки до вакуумного інтерфейсу за рахунок контактної різниці потенціалів проявляється у появі потенціального бар'єру над вакуумним рівнем або позитивних значень ефективного потенціалу. Висота бар'єру залежить від використуваного локального або нелокального наближення для обмінно-кореляційної енергії. Обговорюються нетривіальна поведінка розрахованого ефективного потенціалу на вакуумній стороні плівки, а також причини цього. На основі одержаних результатів проаналізовано нещодавні результати мірянй контактної різниці потенціалів в залежності від кількості атомів Si, нанесених на вільну грань наноплівок ітербію на підкладинці Si(111). Обговорюються порівняння та розбіжності між нашими самоузгодженими розрахунками для простих металів і цими експериментами.

Ключові слова: поверхневі явища, робота виходу електрона, поверхневий потенціал, контактна різниця потенціалів, метал-діелектричні інтерфейси, сандвічі, плівки, модель стабільного желе.

(Received August 12, 2023; in final version, August 13, 2023)

1. INTRODUCTION

Thin films of metals, dielectrics and semiconductors are widely used in many fields of technology, primarily in micro- and nanoelectronics. Physical processes in thin films proceed differently than in bulk materials. As a result, film elements have characteristics that differ from those of bulk samples and allow one to observe effects that are not characteristic of bulk samples.

Films in the nanometer range exhibit the size and quantum effects. The Friedel oscillations of the electron density are always present in a metallic film. Their amplitude depends on the contact with the substrate. For thick films, these oscillations are localized near the surface and decay deep into the bulk of the film. With a decrease in the film thickness, the quantum-size density oscillations (standing waves) begin to appear, superimposed on the Friedel oscillations. In addition,

the substrate material can have a significant effect on the energy characteristics of thin films [1, 2]. One of the fundamental characteristics of metal nanostructures is the electron work function.

The possibility of light localization makes it possible to demonstrate, based on the surface plasmon resonance spectroscopy, their efficiency and performance as the hybrid plasmonic waveguides, the biological and chemical sensors, nanoantennas, metamaterials, and the highly reflective coatings (see Refs. [3–5] and references therein).

The complexity of obtaining objects and measurement methods is evidenced by a relatively small number of experiments devoted, as a rule, to quantum size effects [5–12].

Various approaches and models make it possible to calculate the electron structure of the slabs suspended in vacuum and consisting of several monolayers (ML), finite in one direction and quasi-continuous in two other directions [13–17]. Within the framework of the density functional theory and the stabilized jelly, we calculated the electron characteristics of metal–dielectric nanosandwiches for the strong quantization regime [18–21].

The aim of the present work is the calculation and analysis of the energy diagram, the electron work function, and near-surface space distribution of a one-electron effective potential for an aluminium film on a promising substrate SiO_2 [22].

To control calculations by the Kohn–Sham method of the energy diagram of a metal film with an inhomogeneous dielectric coating, the simplest electrostatic analogue of the problem, for example, about a point charge [23] at the interface with several dielectrics, is required. Subsequently, we will present its solution in the form necessary for our purposes, as it was proposed in [21].

2. ELECTROSTATIC ANALOGUE

Let us consider a conducting sphere in an inhomogeneous dielectric environment: from a straight line passing through the centre of the sphere of radius R and charge Q , the i half-planes diverge fan-shaped, forming dihedral angles $\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_i$ such that (Fig. 1, *a*)

$$\sum_i \beta_i = 2\pi.$$

In the region $r > R$, the space inside each of the corners is filled with homogeneous dielectrics with constants $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \dots, \varepsilon_i$, respectively. Determining the potential on the surface of a sphere, we first assume that the general form of the solution for the potential in the region $r \geq R$ has the form

$$\phi_i = C_i Q/r.$$

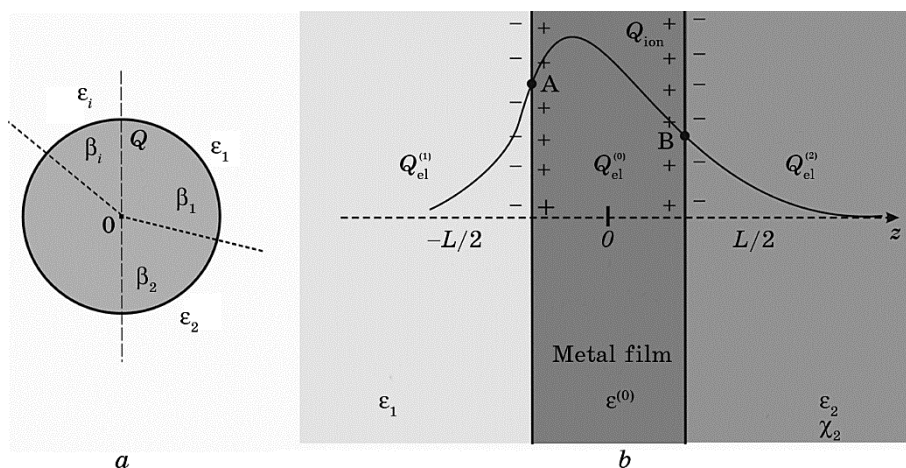


Fig. 1. The illustrations of a conducting sphere in contact with dielectrics (a) (the planes separating the dielectrics are perpendicular to the plane of the figure), metal film in the contacts (b).

From the boundary conditions for the equality of the potential at the corresponding boundaries with dielectrics, we obtain

$$\phi_1^R = \phi_2^R = \dots = \phi_i^R \Rightarrow C_i = C.$$

The unknown coefficient C is determined by the Gauss theorem

$$\oint_S \mathbf{D} d\mathbf{S} = 4\pi Q. \quad (1)$$

To find the area of a segment $S_i = \alpha_i S$ on a radius R (α_i is the fraction of the surface covered by a dielectric with a constant ϵ_i), we introduce a z -axis along the line of separation of the dielectrics. Then, according to the Cavalieri's principle, each i -th area will be determined by the angle β_i (Fig. 1, a) or

$$\alpha_i = \frac{\beta_i}{2\pi},$$

and the integral in Eq. (1) is divided into i parts

$$S \sum_i D_i^n \alpha_i = 4\pi Q. \quad (2)$$

Substituting the area of the sphere and $D_i^n = \epsilon_i C Q / R^2$, we get $C = 1/\tilde{\epsilon}$, where

$$\tilde{\epsilon} \equiv \sum_i \epsilon_i \alpha_i. \quad (3)$$

Thus, the area-weighted average dielectric constant $\tilde{\varepsilon}$ is introduced into the theory, and the potential of the sphere surface $\phi^R = Q/(\tilde{\varepsilon}R)$ is common for all contacts with dielectrics, as well as the asymptotics of the potential in the limit $r/R \gg 1$:

$$\phi(r) = \frac{Q}{\tilde{\varepsilon}r}. \quad (4)$$

For a metal sphere in contact with two dielectrics (inhomogeneous coating), we have

$$\tilde{\varepsilon} = \varepsilon_1 \alpha_1 + \varepsilon_2 \alpha_2. \quad (5)$$

Mentally ‘flattening’ the metal ball [21], let us consider a metal film. In the Cartesian co-ordinate system, it is more convenient to use a macroscopic metal cube [24] with a volume $\Omega = L_x \times L_y \times L_z$, symmetrically located between the dielectrics in the plane xy . Then, flattening the cube along the z -axis, we consider a slab with a thickness L (Fig. 1, *b*). Neglecting the ends, the total film area S , parameters α and $\tilde{\varepsilon}$ have the trivial form:

$$S = 2L_x L_y + O\left(\frac{L}{L_x}\right), \alpha_1 = \alpha_2 = \frac{1}{2}, \tilde{\varepsilon} = \frac{1}{2}(1 + \varepsilon_2). \quad (6)$$

Next, we use the Kohn–Sham method to analyse the energy diagram for the passive contact of film with an insulator. Previously, we considered such a problem for a quantum metal film in dielectric environment [18–20].

3. MODEL OF FILM

For an electrically neutral metal film (slab), the total charge of the subsystem of conduction electrons and ions is zero. Therefore, there is no electric field at infinity.

In the stabilized jelly model, the field is nonzero only near the surface, where the electron density profile $n(z)$ changes from the bulk value in metal bulk $\bar{n} = \bar{\rho}$ to zero beyond the boundary of the positive ion charge distribution given in a stepwise form

$$\rho(z) = \begin{cases} 0, & z < -L/2, \\ \bar{n}, & |z| \leq L/2, \quad \bar{n} = \frac{1}{(4/3)\pi r_s^3}, \\ 0, & z > L/2. \end{cases} \quad (7)$$

Let us conventionally divide the space distribution of conduction

electrons into regions (Fig. 1, *b*):

$$n(z) = n_1(z) + n_0(z) + n_2(z),$$

in which the charges are accumulated

$$\begin{aligned} Q_{\text{el}}^{(1)} &= -e \frac{1}{2} S \int_{-\infty}^{-L/2} n_1(z) dz, \quad Q_{\text{ion}} = +e \frac{1}{2} S \int_{-L/2}^{L/2} \rho(z) dz, \\ Q_{\text{el}}^{(0)} &= -e \frac{1}{2} S \int_{-L/2}^{L/2} n_0(z) dz, \quad Q_{\text{el}}^{(2)} = -e \frac{1}{2} S \int_{L/2}^{\infty} n_2(z) dz, \end{aligned} \quad (8)$$

where e is the unit positive charge. The sum of charges satisfies the electrical-neutrality condition

$$Q_{\text{ion}} + Q_{\text{el}}^{(1)} + Q_{\text{el}}^{(0)} + Q_{\text{el}}^{(2)} = 0. \quad (9)$$

The spatial electron distribution is determined by the Poisson equation

$$\begin{aligned} \nabla^2 \phi &= -4\pi e \frac{v(z)}{\varepsilon(z)}, \\ v(z) &= n(z) - \rho(z). \end{aligned} \quad (10)$$

The step function

$$\varepsilon(z) = \begin{cases} \varepsilon_1, & z < -L/2, \\ \varepsilon^{(0)}, & |z| \leq L/2, \\ \varepsilon_2, & z > L/2 \end{cases} \quad (11)$$

fixes the area of contacts with vacuum and dielectric; $\varepsilon^{(0)} = 1$ (ions and electrons in a metal are always in a vacuum).

The count of the potential is selected from its value $\phi = 0$ at a sphere of infinite radius (this is true for a finite sample of arbitrary shape).

From the joint solution of the Kohn–Sham equations and the Poisson equation (10), the equilibrium profiles $n(z)$, $\phi(z)$, $v_{\text{eff}}(z)$ and the electron work function W under the condition of the co-ordinate-independent chemical potential of electrons are found:

$$\mu(\varepsilon_1, \varepsilon_2, x, y, z) = \text{const} = -W. \quad (12)$$

Thus, condition (12) also fixes the mutual influence of dielectrics on the asymptotic potential $v_{\text{eff}}(z)$ behaviour [25].

The one-electron effective potential is defined as the sum

$$v_{\text{eff}}(z) = e\phi(z) + v_{\text{xc}}(z) + \langle \delta v \rangle_{\text{WS}} \theta(L/2 + z)\theta(L/2 - z), \quad (13)$$

where v_{xc} is the exchange–correlation potential in the local density approximation (LDA), $\langle \delta v \rangle_{\text{WS}}$ is the stabilization potential (zero point energy), and $\theta(z)$ is the Heaviside unit function.

It is assumed that the electron escaping from the metal film is accompanied by a spherically symmetric hole, which is trapped in the image plane and spreads out within this plane as the electron moves apart from the surface [26].

In the version of [20], the Ritz method was used to obtain an analytical expression for the nonlocal Coulomb potential of a hole, which was then matched on the image plane with the local exchange–correlation potential calculated by the Kohn–Sham method under condition (12). Thus, the effective potential is self-consistently and asymmetrically matched outside the film with the image potentials (‘short-range asymptotics’ for the faces)

$$+ \frac{e^2}{4\epsilon_1(z + L/2)} \text{ and } - \frac{e^2}{4\epsilon_2(z - L/2)}. \quad (14)$$

For thin films, in which the bottom of the effective potential is not flat due to the Friedel and size oscillations of the electron density, the work function, as for clusters of atoms, is defined as

$$W = -\epsilon_F. \quad (15)$$

Here, the Fermi energy $\epsilon_F < 0$ is counted down the energy scale from a value $\phi = 0$ on infinity.

The convergence problems of the iterative procedure significantly complicate the calculations for large film thicknesses, when the quantum-size oscillations of the work function are negligibly small.

For thick films, in which the bottom of the one-electron effective potential in film is flat in the vicinity of $z = 0$, the work function can be found, as in a semi-infinite metal, in the form:

$$W = -\bar{v}_{\text{eff}} - \bar{\epsilon}_F, \quad \bar{v}_{\text{eff}} = e\bar{\phi} + \bar{v}_{\text{xc}} + \langle \delta v \rangle_{\text{WS}}, \quad \bar{\epsilon}_F = (\hbar^2/(2m))(3\pi^2\bar{n})^{2/3}, \quad (16)$$

where $\bar{v}_{\text{eff}}$ is the bottom of the conduction band in a massive metal, $\bar{\epsilon}_F > 0$ is the Fermi energy of a homogeneous degenerate electron gas in the Sommerfeld model (here, it is already generally accepted to choose $\bar{\epsilon}_F$ a reading up the energy scale from $\bar{v}_{\text{eff}} < 0$).

If the terms $\bar{\phi}$ and $\bar{v}_{\text{xc}}$ are of Coulomb origin, then, in addition to the exchange–correlation contribution, $\langle \delta v \rangle_{\text{WS}}$ also contains the non-Coulomb contribution of $\bar{\epsilon}_F$.

In Figure 1, b pluses and minuses show the distribution of charges

providing the ordinary dipole barrier ($-e\bar{\phi}$) near faces.

4. CALCULATION RESULTS AND DISCUSSION

Calculations are made for the asymmetric and symmetric ‘sandwiches’

$$\begin{aligned} 1 : \{\varepsilon_1 \mid \text{Al} \mid \varepsilon_2\}, \\ 2 : \{\tilde{\varepsilon} \mid \text{Al} \mid \tilde{\varepsilon}\}, \quad \tilde{\varepsilon} = \frac{1}{2}(\varepsilon_1 + \varepsilon_2), \\ 3 : \{\varepsilon_1 \mid \text{Al} \mid \varepsilon_2, \chi_2\} \end{aligned} \quad (17)$$

in two approximations ($\chi_2 = 0$ and $\chi_2 \neq 0$): vacuum on the left; polycrystalline Al film ($r_s = 2.07a_0$, a_0 is the Bohr radius) of thickness $L = 32a_0 = 7$ ML in the centre; SiO_2 on the right ($\varepsilon_2 = 4$, $\chi_2 = 1.1$ eV) within the framework of our approaches [18–20]. For sandwich 3, a non-local exchange–correlation potential was used [19].

Figures 2 and 3 demonstrate the most interesting fragments of the equilibrium profiles of the electron density and electrostatic potential. The tails of electronic profiles 1 and 3 almost coincide, but at the same time, they shift asymmetrically relative to the symmetrical sandwich 2 towards the dielectric. For all cases, the electronic charge $Q_{\text{el}}^{(0)}$ in the $|z| \leq L/2$ area remains almost the same. This is manifested in the equality of the potential for points A and B in Fig. 3, which exactly corresponds to theorem (1) and result (4).

The tails in Figure 2, which make up the charges $Q_{\text{el}}^{(1)}$ and $Q_{\text{el}}^{(2)}$, visually differ slightly. However, these tails are present in the Poisson equation with different weights: $n_1(z)/\varepsilon_1$ and $n_2(z)/\varepsilon_2$. Due to the sig-

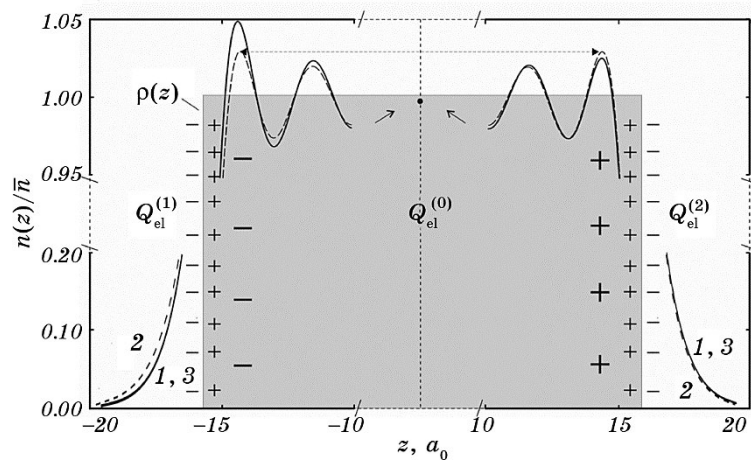


Fig. 2. Calculated electron density profiles in accordance with the notation (17).

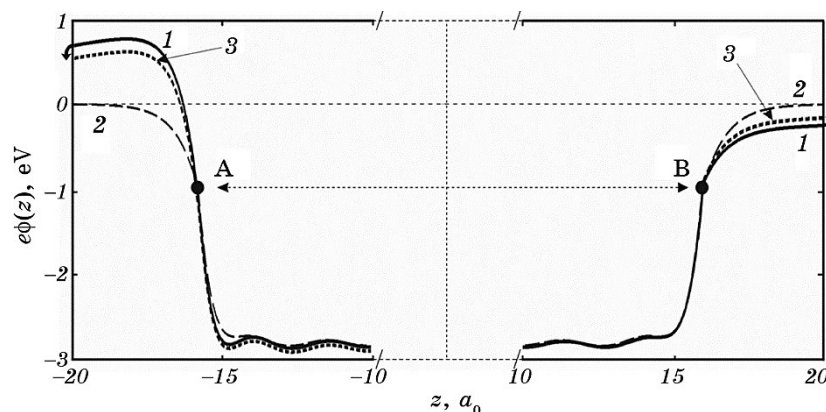


Fig. 3. Calculated electrostatic potential profiles.

nificant difference in ε_1 and ε_2 , a small difference in n_1 and n_2 cannot fundamentally affect the wings of the potential $\phi(z)$ (Fig. 3) and the Maxwellian stress tensor in the system.

The boundary conditions for $\phi(z)$ provide reliable equipotential surfaces passing through points A, B, and $|z| = \infty$. For sandwich 2, the wings of the potential are expectedly symmetrical. For a sandwich in approximations 1 and 3, as well as for small film thicknesses, the potential wings behave quite differently.

In Figure 3, the potential wings in the dielectric for 1 and 3 lie lower than for the symmetrical sandwich 2 and tend to $\phi = 0$, much more slowly. It is important not only that in this region the action of the charge $(Q_{\text{ion}} + Q_{\text{el}}^{(0)}) > 0$ predominates, but also its spatial distribution inside the film. Indeed, the electronic charge inside the film is distributed asymmetrically (the extreme peak on the left is higher than the extreme peak on the right), which creates an additional dipole between the left and right faces (it is indicated in Fig. 2 by large pluses and minuses). This leads to the fact that in vacuum the potential $\phi(z)$ increases sharply (the effect of two infinitely charged 'planes'), exceeding the potential for a symmetrical sandwich, crosses $\phi = 0$, reaches a maximum, crosses again $\phi = 0$ and tends to $\phi = 0$ at infinity from the lower half-plane. Thus, Figure 2 shows the flow of electrons inside the film from the dielectric side to the vacuum side due to the contact potential difference. In turn, this is clearly manifested in the appearance of a potential barrier above the vacuum level or, in other words, positive values on the left wing of the potential in Fig. 3. The contact potential difference is determined by the dependence of the work function [27] of half-infinite Al in passive contact with a dielectric (Fig. 4) or, equivalently, of an 'infinitely' thickness film in identical faces with constant ε .

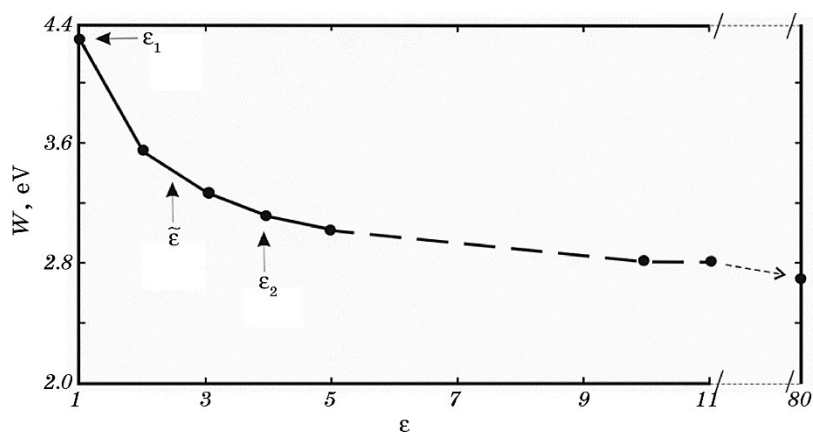


Fig. 4. The work function vs dielectric coating in the absence of size oscillations.

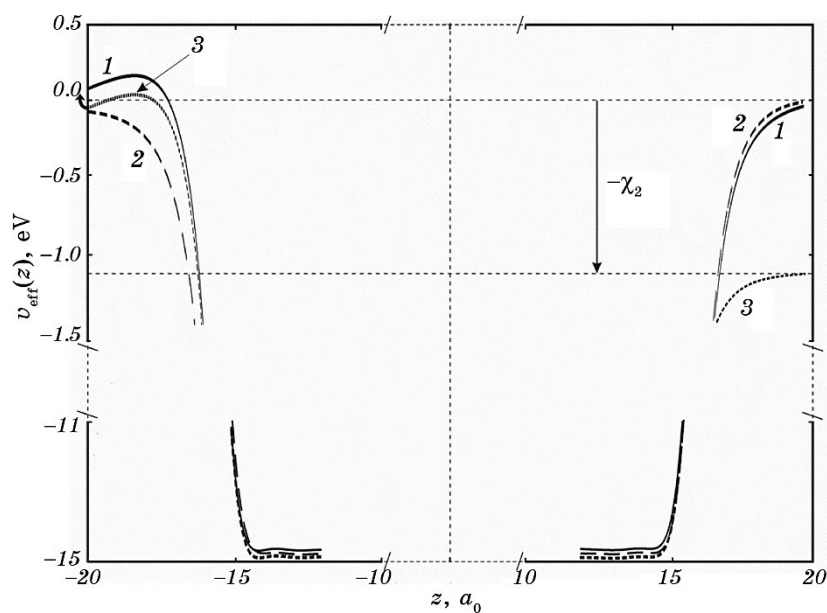


Fig. 5. Calculated effective potential profiles.

The difference in versions 1 and 3 did not affect the value of $\varepsilon_F = -3.17$ eV in (15). For comparison, the work function (16) exceeds this value by only 5% (weak quantization regime). On the other hand, the difference in the versions noticeably changed the wings of the potential $v_{\text{eff}}(z)$ (Fig. 5). The use of the nonlocal exchange–correlation potential in the iterative procedure led to a significant suppression in

vacuum of the potential barrier of the effective potential (now its height is only 0.16 eV). For the electrostatic potential, this change is much smaller (dependences 1 and 3 are compared in Fig. 3). In the $z < -L/2$ area, effective electric field

$$E_{\text{eff}}(z) = -\nabla v_{\text{eff}}(z) / e$$

changes sign twice. In theorem (1), apparently, one should make the change $\mathbf{D} \rightarrow \mathbf{D}_{\text{eff}}$.

In a metal, it is not enough to confine oneself to taking into account only the electrostatic potential calculated in accordance with the principle of superposition; the prevailing contribution to energy is made by the exchange–correlation potential due to the small distance between electrons r_s [26]. Therefore, at distances smaller than the lateral dimensions of the film ($z \ll L_x$), both asymptotics (14) work. At a much greater distance from the faces, when the exchange–correlation effects become negligible with increasing distance r_s , the superposition principle is dominant. In this case, one ‘long-range’ asymptotics of the form (4) with a weighted average dielectric constant $\tilde{\epsilon}$ should work. Numerical investigation of the asymptotic behaviour of the potential does not allow the calculation algorithm instability near the vacuum level.

To analyse the complex behaviour of the potential, it is necessary to go beyond the model with stepwise distributions of a homogeneous positively charged background (7) and the dielectric constant in (11). It is also necessary to take into account not only the response of the electronic, but also the ionic subsystem to the presence of a dielectric. If atomic planes are introduced into the film model, then the interplanar distances will be determined by the balance of forces on the left and right on each of them. The effective force acting from the outside on the film is due to the inhomogeneous distribution of electrons and should lead to its compression in z direction. As the thickness decreases, the role of alternating deformation increases. Most likely, this will lead to some refinement of the electron work function, but not a significant change in the potential wings.

Modernization of the stepwise manner into function $\epsilon(z)$ (11) can be carried out using, for example, a more realistic inclusion function in the region of dielectrics:

$$\epsilon(z) = \epsilon^{(0)} + \begin{cases} (\epsilon_1 - \epsilon^{(0)})(1 - \exp[(z + L/2) / a_1]), & z < -L/2, \\ (\epsilon_2 - \epsilon^{(0)})(1 - \exp[-(z - L/2) / a_2]), & z > L/2. \end{cases} \quad (18)$$

In general, the parameters $a_{1,2}$ should be comparable with the diameters of dielectric atoms on both sides of the film. Numerically, this somewhat softens the asymmetry of the dielectric near the surface and lowers the potential barrier in Figs. 3 and 4. The final answer about the

presence of anomalies in the behaviour of the potential near the surface can be given by a detailed analysis of the experimental dependences of the STM tunnelling current on the probe-surface distance. It is possible that the variation of the potential affects the rate of adsorption on the free plate of the film, which is a sensitive point in the design of sensors.

In a recent work [12], it was reported on the study by the Kelvin method (contact potential difference) of ytterbium nanofilms at Si (111) substrates. The probe fixed changes in the average surface potential $e\Delta\phi$ (or local work function of electrons) depending on the number of Si atoms deposited on the free Yb face. Silicon was deposited in portions up to approximately 1 ML.

In our calculation scheme, the value $e\Delta\phi$ corresponds to the change in the effective potential on the image plane $v_{\text{eff}}(z = z_0)$, $z_0 < -L/2$ (see Table II in [28]). The value ε_1 in the experiment [12] can be estimated using the Clausius–Mossotti relation, using the polarizability of the Si atom ($10.17a_0^3$) and detailed information about the islands. Then, formula (5) will look like

$$\tilde{\varepsilon} = \sum_j \varepsilon_j \alpha_j + \varepsilon_2/2, \quad (19)$$

where j is the number of Si islands on the left face. The transition to vacuum means $\varepsilon_j = 1$, $\sum_j \alpha_j = 1/2$ that will lead to expression (6).

On the one hand, the use of such a concept as the dielectric constant for dielectric nanoislands is doubtful, but, on the other hand, the use of formula (19) leads to its value being greater than that according to formula (18) for $\varepsilon_1 = 1$. If we also use Fig. 4 (metal in this case is not important, but it is important that the contact is passive), it turns out that the work function: the total energy (15) and (16) should decrease with the appearance of adsorbent islands.

In Ref. [12], the value $e\Delta\phi$ for Yb films with a thickness of 7.8 and 16 ML, on the contrary, increases by approximately 0.02 eV with an increase in the Si coverage.

The reasons for the opposite change in $e\Delta\phi$ and W have already been discussed by us earlier [27, 28] (see, for example, formula (23) in [27]). There are additional reasons for the discrepancy between theory and experiment: (i) the film is not continuous and homogeneous, this is especially evident for a film with a thickness of 7.8 ML, (ii) the oscillations of the Fermi energy are consistent with the oscillations of the electron pressure on the walls, which leads to size oscillations of the film thickness itself and of the potential wings, one of which is used for measurements, (iii) when using a probe, edge effects have an influence. Here, one should also point to the work [29] and the book [30], where it was reported on the measurement by means of photoelectron

spectroscopy of nonmonotonic curves of the change in the work function with a decrease in the size of Ag, Al, Fe, Mg particles deposited on a quartz substrate.

5. CONCLUSIONS

This paper presents the results of the numerical solution of the many-electron problem: self-consistent profiles of the electron density, potentials, and electron work function for 7 ML thickness polycrystalline Al film deposited on a passive insulator SiO_2 (asymmetric metal–dielectric sandwich). An analysis based on the Gauss theorem points to the universality of using the constant $\tilde{\epsilon}$, weighted average over the surface area of the contacts with dielectrics. Comparison with the value of the electrostatic potential calculated by the Kohn–Sham method for the film covered homogeneous dielectric $\tilde{\epsilon}$ confirms the conclusions of classical electrodynamics.

The effective force acting on the film from the outside is due to the inhomogeneous distribution of electrons and should lead to its size deformation.

The flow of electrons from the side of the dielectric to the vacuum side due to the contact potential difference manifests itself in the appearance of a barrier above the vacuum level or positive values of the effective potential. The barrier height depends on the used local or non-local approximation of the exchange–correlation energy. Therefore, the answer about the presence of anomalies in the behaviour of the potential should be sought in the behaviour of the STM tunnelling current near the vacuum face of the film. The variation of the potential here affects the rate of adsorption on the free plate of the film, which is a sensitive point in the design of sensors.

The work function and lifetime of a positron in the surface states of a metal film is sensitive to the presence of a potential barrier and, if its presence is experimentally confirmed, this will require a critical revision of the measured values.

The author is grateful to W. V. Pogosov and A. V. Korotun for reading the manuscript.

REFERENCES

1. H. Kawano, *Prog. Surf. Sci.*, **97**, No. 1: 100583 (2022).
2. R. Otero, A. L. Vázquez de Parga, and J. M. Gallego, *Surf. Sci. Rep.*, **72**, No. 3: 105 (2017).
3. D. Yu. Fedyanin, D. I. Yakubovsky, R. V. Kirtaev, and V. S. Volkov, *Nano Lett.*, **16**, No. 1: 362 (2016).
4. A. K. Sarychev, A. Ivanov, A. N. Lagarkov, I. Ryzhikov, K. Afanasev, I. Bykov, G. Barbillon, N. Bakholdin, M. Mikhailov, A. Smyk, A. Shurygin, and

- A. Shalygin, *Phys. Rev. Appl.*, **17**, No. 4: 044029 (2022).
5. A. V. Korotun and V. V. Pogosov, *Phys. Solid State*, **63**, No. 1: 122 (2021).
6. R. Otero, A. L. Vázquez de Parga, and R. Miranda, *Phys. Rev. B*, **66**, No. 11: 115401 (2002).
7. J. J. Paggel, C. M. Wei, M. Y. Chou, D.-A. Luh, T. Miller, and T.-C. Chiang, *Phys. Rev. B*, **66**, No. 23: 233403 (2002).
8. Y. Liu, J. J. Paggel, M. H. Upton, T. Miller, and T.-C. Chiang, *Phys. Rev. B*, **78**, No. 23: 235437 (2008).
9. A. L. Vázquez de Parga, J. J. Hinarejos, F. Calleja, J. Camarero, R. Otero, and R. Miranda, *Surf. Sci.*, **603**, No. 10: 1389 (2009).
10. P.-W. Chen, Y.-H. Lu, T.-R. Chang, C.-B. Wang, L.-Y. Liang, C.-H. Lin, C.-M. Cheng, K.-D. Tsuei, H.-T. Jeng, and S.-J. Tang, *Phys. Rev. B*, **84**, No. 20: 205401 (2011).
11. R. Y. Liu, A. Huang, C. C. Huang, C.-Y. Lee, C.-H. Lin, C.-M. Cheng, K.-D. Tsuei, H.-T. Jeng, I. Matsuda, and S.-J. Tang, *Phys. Rev. B*, **92**, No. 11: 115415 (2015).
12. M. V. Kuzmin and M. A. Mitzev, *Fiz. Tverd. Tela*, **65**, No. 7: 1082 (2023) (in Russian).
13. N. E. Singh-Miller and N. Marzari, *Phys. Rev. B*, **80**, No. 25: 235407 (2009).
14. E. Ogando, N. Zabala, E. V. Chulkov, and M. J. Puska, *Phys. Rev. B*, **71**, No. 20: 205401 (2005).
15. L. Gao, J. Souto-Casares, J. R. Chelikowsky, and A. A. Demkov, *J. Chem. Phys.*, **147**, No. 20: 214301 (2017).
16. R. Tran, X.-G. Li, J. H. Montoya, D. Winston, K. A. Persson, and S. P. Ong, *Surf. Sci.*, **687**, No. 1: 48 (2019).
17. P. A. Schultz, *Phys. Rev. B*, **103**, No. 19: 195426 (2021).
18. A. V. Babich and V. V. Pogosov, *Phys. Solid State*, **55**, No. 1: 196 (2013).
19. V. V. Pogosov, A. V. Babich, and P. V. Vakula, *Phys. Solid State*, **55**, No. 10: 2120 (2013).
20. A. V. Babich, *Ukrayins'kyi Fizychnyy Zhurnal*, **59**, No. 1: 38 (2014).
21. V. V. Pogosov and V. I. Reva, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **44**, No. 3: 297 (2022).
22. M. Volkov, S. A. Sato, A. Niedermayr, A. Rubio, L. Gallmann, and U. Keller, *Phys. Rev. B*, **107**, No. 18: 184304 (2023).
23. V. V. Batygin and I. N. Toptygin, *Collection of Problems on Electrodynamics and Special Theory of Relativity* (St. Petersburg–Moskva–Krasnodar: Lan': 2010) (in Russian).
24. Z. Wang and C. Guet, *IEEE Transactions on Emerging Topics in Computational Intelligence*, **6**, No. 3: 429 (2021).
25. W. R. Smythe, *Static and Dynamic Electricity* (CRC Press: 1989).
26. A. M. Teale, T. Helgaker, A. Savin, C. Adamo, B. Aradi, A. V. Arbuznikov, P. W. Ayers, E. J. Baerends, V. Barone, P. Calaminici, E. Cancès, E. A. Carter, P. K. Chattaraj, H. Chermette, I. Ciofini, T. D. Crawford, F. De Proft, J. F. Dobson, C. Draxl, T. Frauenheim, E. Fromager, P. Fuentealba, L. Gagliardi, G. Galli, J. Gao, P. Geerlings, N. Gidopoulos, P. M. W. Gill, P. Gori-Giorgi, A. Görling, T. Gould, S. Grimme, O. Gritsenko, H. Jørgen A. Jensen, E. R. Johnson, R. O. Jones, M. Kaupp, A. M. Köster, L. Kronik, A. I. Krylov, S. Kvaal, A. Laestadius, M. Levy, M. Lewin, S. Liu, P.-F. Loos, N. T. Maitra, F. Neese, J. P. Perdew, K. Pernal, P. Pernot, P. Piecuch,

- E. Rebolini, L. Reining, P. Romaniello, A. Ruzsinszky, D. R. Salahub, M. Scheffler, P. Schwerdtfeger, V. N. Staroverov, J. Sun, E. Tellgren, D. J. Tozer, S. B. Trickey, C. A. Ullrich, A. Vela, G. Vignale, T. A. Wesolowski, X. Xu, and W. Yang, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **24**: 28700 (2022).
27. A. V. Babich and V. V. Pogosov, *Surf. Sci.*, **603**, No. 16: 2393 (2009).
28. A. Kiejna and V. V. Pogosov, *Phys. Rev. B*, **62**, No. 15: 10445 (2000).
29. R. Garron, *Ann. Phys.*, **13**, No. 10: 595 (1965).
30. S. A. Nepiiko, *Fizicheskie Svoystva Melkikh Metallicheskich Chastits* [Physical Properties of Small Metal Particles] (Kiev: Naukova Dumka: 1985) (in Russian).

PACS numbers: 61.66.Dk, 65.40.De, 81.20.Ev, 81.20.Wk, 81.40.Cd, 81.40.Vw, 81.70.Pg

Sintered Al–Si–Ni Alloy: Structure and Properties. I. Powder Obtaining

G. A. Bagliuk, T. O. Monastyrskaya*, V. V. Kaverinsky, V. P. Bevz*,
V. K. Nosenko*, I. M. Kirian*, D. L. Pakula*, V. V. Kyrylchuk*,
A. M. Lakhnik*, and O. D. Rud*

*I. M. Frantsevych Institute for Problems in Materials Science, N.A.S. of Ukraine,
3 Omeljan Pritsak Str.,
UA-03142 Kyiv, Ukraine*

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

The work is aimed at the development of a new sintered aluminium alloy with a low temperature coefficient of linear expansion that opens fundamentally new opportunities for solving the modern needs of domestic machine-building and instrument-making enterprises in light materials with special physical properties. Phase composition, structure and properties of cast aluminium alloys Al–Si–Ni with different contents of silicon and nickel, as well as powders obtained by grinding rapidly-quenched metal ribbons of these alloys in a high-energy ball mill are studied using various methods of structural analysis. The obtained values of the coefficient of linear expansion of the studied alloys in the cast state are significantly lower than those of pure aluminium, and they amount to $\cong (11–15) \cdot 10^{-6} \text{ K}^{-1}$. The method of obtaining a powder of a rapidly-crystallized alloy by manufacturing a rapidly-quenched metal ribbons using melt spinning followed by its dispersion in a high-energy ball mill is proposed for the fabrication of finely-dispersed powder and subsequent hot pressing.

Key words: sintered aluminium alloy, Al–Si–Ni, powder metallurgy, compaction, alloying, melt spinning, rapidly-quenched ribbons, coefficient of linear expansion.

Corresponding author: Oleksandr Dmytrovykh Rud
E-mail: rud@imp.kiev.ua

Citation: G. A. Bagliuk, T. O. Monastyrskaya, V. V. Kaverinsky, V. P. Bevz, V. K. Nosenko, I. M. Kirian, D. L. Pakula, V. V. Kyrylchuk, A. M. Lakhnik*, and O. D. Rud, Sintered Al–Si–Ni Alloy: Structure and Properties. I. Powder Obtaining, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, 45, No. 8: 951–961 (2023). DOI: [10.15407/mfint.45.08.0951](https://doi.org/10.15407/mfint.45.08.0951)

Роботу спрямовано на розробку нового спеченого алюмінійового стопу з низьким температурним коефіцієнтом лінійного розширення, що відкриває принципово нові можливості вирішення сучасних потреб вітчизняних підприємств машинобудування, приладобудування у легких матеріалах з особливими фізичними властивостями. З використанням різних методів структурної аналізи вивчено фазовий склад, структуру та властивості литих алюмінійових стопів Al–Si–Ni з різним вмістом Силіцію та Ніклю, а також порошків, одержаних розмелюванням у високоенергетичному кульовому млині швидкозагартованих металевих стрічок цих стопів. Одержані значення коефіцієнта лінійного розширення досліджених стопів у литому стані істотно нижчі, ніж у чистого алюмінію, і становлять $\cong (11\text{--}15) \cdot 10^{-6} \text{ K}^{-1}$. Запропоновано метод одержання порошку швидкозакристалізованого стопу шляхом виготовлення швидкозагартованої металевої стрічки за допомогою спінінгування розтопу з подальшим її диспергуванням у високоенергетичному кульовому млині для одержання дрібнодисперсного порошку та наступного гарячого пресування.

Ключові слова: спечений алюмінійовий стоп, Al–Si–Ni, порошкова металургія, компактування, легування, спінінгування, швидкозагартовані стрічки, коефіцієнт лінійного розширення.

(Received August 9, 2023; in final version, August 11, 2023)

1. INTRODUCTION

The field of device construction, in particular the creation of aerospace equipment, requires lightweight materials with specific physical properties [1, 2]. One such property is the coefficient of thermal expansion (CTE) consistent with other materials they are in contact with, such as steel, copper alloys, *etc.* In particular, this parameter is crucial for flying object orientation and navigation devices. The error in determining the coordinates of navigation sources due to the part's dimensions instability could be up to 20–50% of the total error of the device [3]. Thus, the light materials design with a low CTE for special instrumentation of the aerospace complex is one of the urgent problems of modern metallurgy and materials science.

The basis of many lightweight materials is aluminium, which is not surprising because of its undeniable advantages: low density (2700 kg/m^3), high corrosion resistance and elasticity. Furthermore, it is relatively inexpensive, not toxic, malleable, and technological in processing [4], especially compared with other light metals and alloys based on magnesium, beryllium, or lithium. However, one of aluminium's disadvantages is its high coefficient of linear thermal expansion, which is $23.4 \cdot 10^{-6} \text{ K}^{-1}$ in the temperature range of 20–100°C [5]. For example, for steels it is $\cong (11\text{--}15) \cdot 10^{-6} \text{ K}^{-1}$ [6] and $16.8 \cdot 10^{-6} \text{ K}^{-1}$ [7] for copper, respectively. Thus, it is crucial to reduce CTE for aluminium-based instrument-making materials. It could be achieved mainly

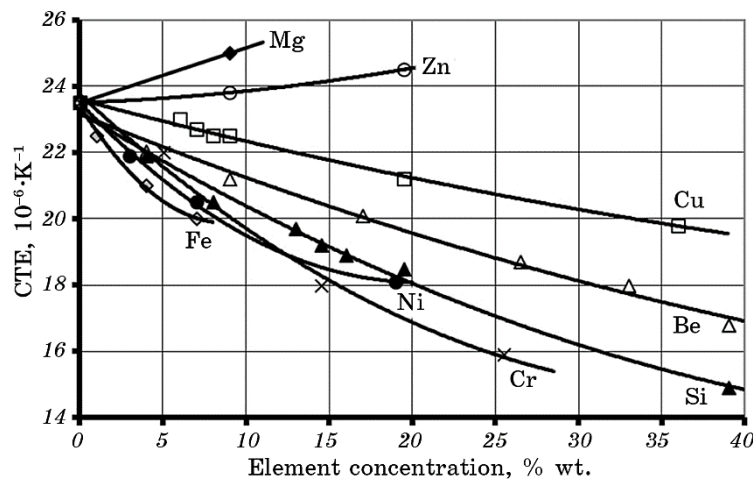


Fig. 1. Influence of alloying elements on CTE of aluminium alloys [4].

through special alloying.

In Figure 1, plots based on data from Ref. [4] are given and demonstrate the influence of the main alloying components used for aluminium on the materials' CTE.

It could be seen from the plots, Cr, Si, Be, and Cu reduce the CTE of aluminium, but Zn and Mg increase it. The primary attention should be given to Si. It is not only a popular doping element for aluminium alloys and could be used in a significant amount; moreover, it has a density even lower than Al, which means that its additive does not make the alloy any heavier. However, increasing its content by more than 30–35% is strongly not recommended because of the markedly reduced mechanical properties. Thereby, an additional alloying with other elements is needed. Such elements could be Cr, Ni, and Fe. Among them, Cr has a more significant influence in its high amounts. Fe is usually considered a not beneficial impurity, and the properties will be lower than when Ni is used. Ni has an appropriate impact on CTE in relatively low amounts. Thus, the final choice has fallen to the Al-Si-Ni system. The alloying components' contents are 25–35% of Si and 5–7% of Ni.

The main technological challenge during such material manufacture is to produce a homogenous product with appropriate structure and properties. In this case, it is strictly not recommended to use casting products as it usually could be done for ordinary Al-Si alloys (silumin). The main reason is its wide range of solidification temperatures. From the phase diagram shown in Fig. 2, it can be seen that for the alloy with 30% Si liquidus temperature is about 850°C, but the solidus temperature is 557°C. The phases present at this temperature interval are Si and intermetallic compounds, which are brittle and tend to grow

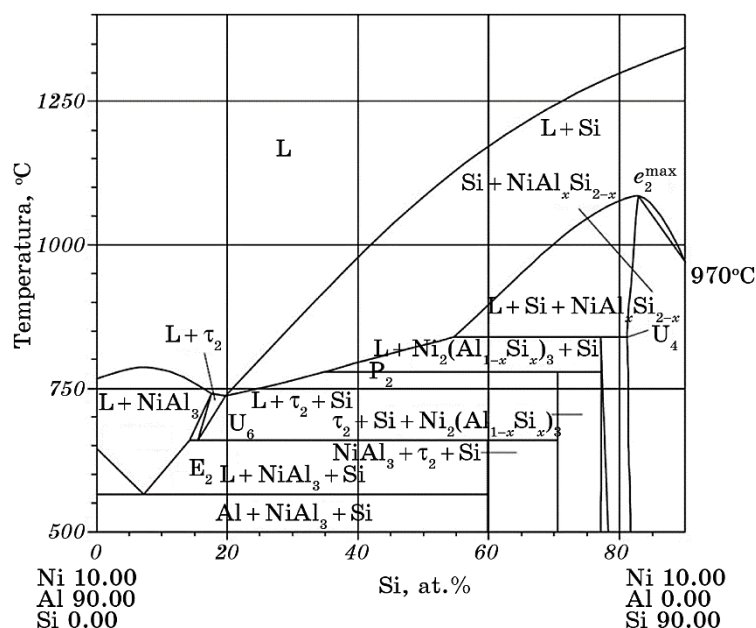


Fig. 2. A polythermal section of the Al–Si–Ni phase diagram for a Ni content of 10% [8].

being placed in a liquid-phase solution. Furthermore, such alloy is likely to liquate because of the density distinction between phases.

Isothermal sections of the corresponding ternary diagram could be found in works [9, 10] for temperatures 550, 750, and 850°C. It can be seen from those diagrams that at a temperature of 550°C, the range of compositions corresponding to the considered alloy corresponds to the zone of three-phase equilibrium (Al)–Si–NiAl₃. There is no liquid phase in the equilibrium state for the conditions. At the temperature of 750°C, the liquid phase is present at this region of the phase diagram. The more quantity of the liquid phase, the less silicon contains in the system. The other equilibrium phases at this temperature are Si, and the ternary intermetallic compound is marked as τ_3 . At a temperature of 850°C, the composition range corresponding to the alloy belongs to the liquid phase zone on the state diagram. This one means that the material will completely melt at this temperature. However, the oxide frame inherent to the aluminium powder-made materials will probably allow keeping the form of the product even during liquid phase presence.

For the mentioned reasons, the high limit of Si content for cast Al–Si alloys is about 20–23% [11]. Therefore, powder metallurgy is the only appropriate method that could be applied for such a material production. Thus, the first primary task to appear is a production of a pre-

alloyed powder of the given composition for the usage of elemental components powders mixture does not seem to be a good idea because of the lower sinterability, porosity, and rough structure of the material obtained in such a way. Taking into account the problems mentioned above in a cast product of the desired composition manufacture, the production of the pre-alloyed powder turns into a challenge that needs a complex study for its solution.

The principal purpose of the part of the study presented here is the development of the fabrication technique of the Al–Si–Ni pre-alloyed powder, which contains $\cong 25\text{--}30\%$ Ni and $5\text{--}7\%$ Ni useful for subsequent sintered material manufacture.

2. RESEARCH MATERIAL AND METHODOLOGY

The experimental alloys were obtained in the shape of rapidly quenched ribbons. The ribbon thickness was in the range of $30\text{--}50\text{ }\mu\text{m}$. The strips were obtained by spinning them on a rotating copper disk. The entire process control was provided in terms of the melt temperature, the pressure value in the crucible with the melt, and the barrel rotation speed. The initial materials were melted in the quartz crucibles. The strips were produced in a sealed chamber under a protective helium atmosphere. The linear disk surface speed was of 50 m/s , and the melt temperature was of 1080°C .

The chemical compositions and the strips' cross-sections dimensions are presented in Table 1.

The alloy powder was produced by the mechanical grinding of the original ribbons in a Fritsch Pulverisette P-6 planetary ball mill in a stainless steel bowl. The total duration of grinding was of 30 min . The number of steel balls with a diameter of 20 mm was of 12 , and the mass

TABLE 1. Chemical composition of the alloys and the ribbon cross-section dimensions.

Material form	Chemical composition, % wt.				Ribbon cross-sections dimensions	
	Al	Si	Ni	Fe	Width d , mm	Thickness t , μm
Alloy 1		23.61	4.73	0.05		
Alloy 2		27.73	4.68	0.05		—
Alloy 3		19.48	6.13	0.05		
Ribbon 1	base	26.5	6.95	0.05	9	30–40
Alloy 4		25.45	5.94	0.05		
Alloy 5		25.58	5.88	0.05		—
Ribbon 2		25.58	5.88	0.05	12	30–40

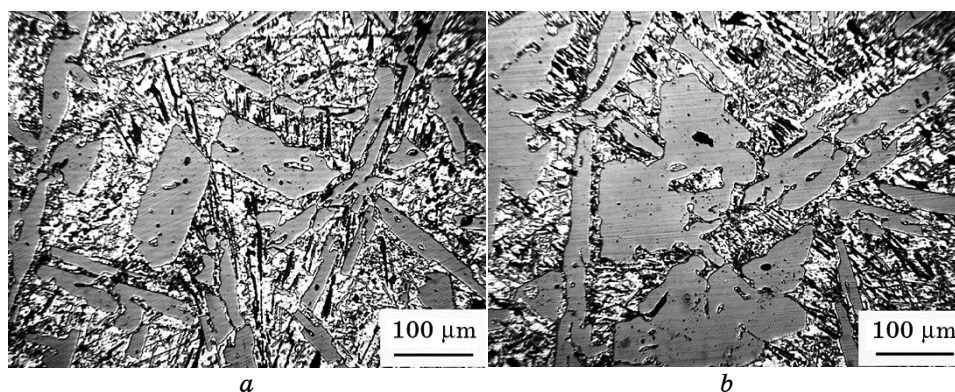


Fig. 3. Microstructure of the initial cast alloy: ingot top (a), ingot bottom (b).

of the powder was of ≈ 37 g. The milling speed and ball-to-powder mass ratio $m_b:m_p$ were 200 rpm and 10:1, respectively. The specified synthesis conditions were applied to all the samples.

Dilatometric measurements were carried out using a dilatometer with an inductive transducer. The error of CTE estimation on the final experimental curves was of $\pm 0.3 \cdot 10^{-6} \text{ K}^{-1}$. Calorimetric analysis was performed on a DSC 404 F1 Pegasus® instrument (NETZSCH) in dynamic mode at a heating rate of 20 K/s in the temperature range from 20 to 700°C. The phase composition study of the alloys was carried out on a DRON-4 diffractometer using radiation $\text{CuK}\alpha$. Metallographic

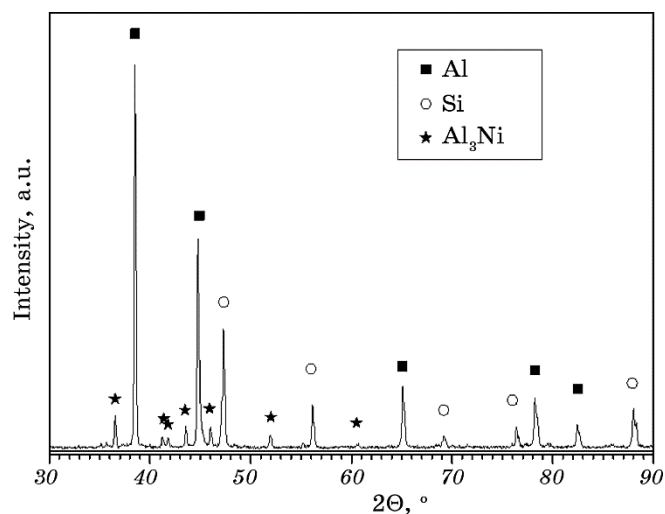


Fig. 4. X-ray pattern of the initial alloy obtained by crystallization with a cooling rate of 10^2 K/s .

studies were carried out on a NEOPHOT-2 optical microscope. A solution of 0.5 ml of HF in water was used to identify structural features.

3. RESEARCH RESULTS AND DISCUSSION

The typical microstructure of the initial alloys (used for subsequent quick-quenched ribbons obtaining) is presented in Fig. 3. The overall look of the structure given corresponds to a hypereutectic Al–Si alloy (so-called ‘silumin’). Large-size fragile primary silicon crystals, which are peculiar to it, are up to 300 μm in size. The matrix is a ternary eutectic structure containing the α -solid solution of Si in Al (close to pure aluminium), Si, and intermetallic Al_3Ni particles. Primary silicon crystals have the form of equiaxed polyhedra with different numbers of faces. The observed structure causes low elasticity and a limited deformation processing possibility [11].

The structural difference between various parts of the ingot (Fig. 3) is clear evidence of the mentioned above volumetric liquation to which such alloys tend.

The phase composition of the initial alloys was also confirmed through x-ray diffraction (Fig. 4). The phase composition seems to be equilibrium. Non-equilibrium intermetallic compounds and silicides are not found. There are reasons to believe that such phase composition will also be in the sintered products after the solid phase sintering.

Metallographic studies obtained by the spinning method ribbons showed the presence of two zones with different etch abilities (Fig. 5, *a*): 1) a homogeneous structure on the contact side adjacent to the barrel (with 15–20 μm thickness), 2) a columnar structure with features

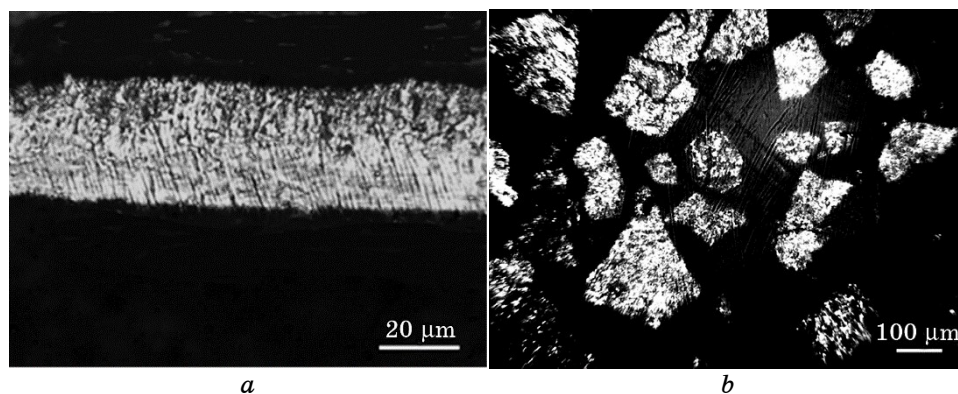


Fig. 5. The cross-sectional structure of the rapidly-quenched ribbon (*a*) and the powder particle shape produced by ball milling of the strips within 30 minutes (*b*).

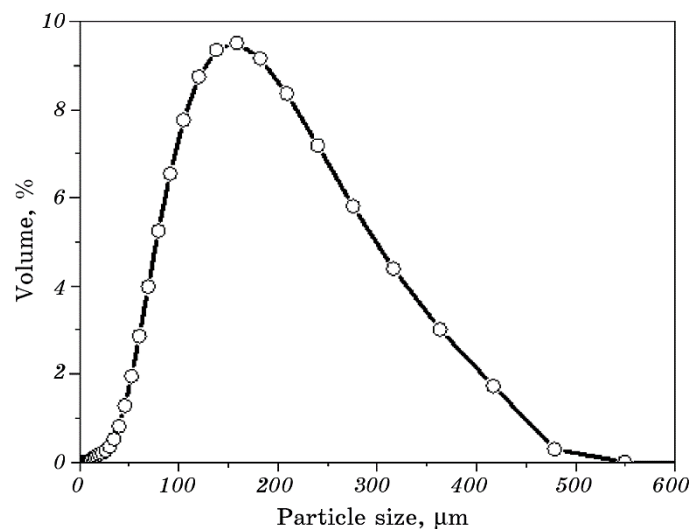


Fig. 6. The powder particles size distribution curve.

of fibrousness on the free side of the ribbon.

Since the ribbons of the alloy are obtained at high crystallization rates (10^5 – 10^6 K/s), their structure differs significantly from the equilibrium one. Primary silicon crystals in the ribbon structure cannot be detected under the optical microscope magnification.

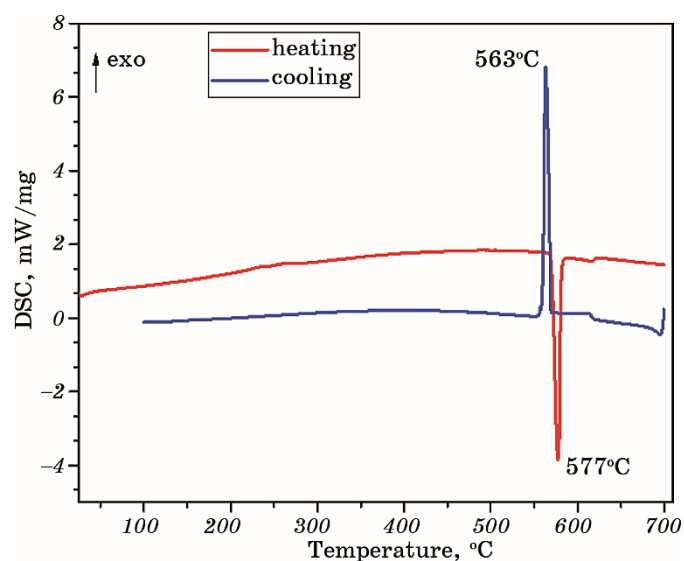


Fig. 7. Typical DSC heating-cooling curves of the alloy powder.

The alloy powder was manufactured by grinding the quick-hardened metal ribbons in a high-energy ball mill. The powder was produced by grinding the original rapidly-quenched metal ribbons into 300–400 μm particles.

Figure 5, *b* presents optical microscope photos of the obtained powder particles. It is seen that the particles have an irregular shape with a wide range of sizes. The powder particles' average size was of $\approx 200 \mu\text{m}$ with observed variation from 4 to 380 μm . The size distribution curve of alloy powder particles is shown in Fig. 6.

Using the differential scanning calorimetry (DSC) method, it is shown that no phase transformations observed in the alloy powders in the temperature range up to the solidus temperature (Fig. 7). The observed solidus temperature is of $\approx 545\text{--}549^\circ\text{C}$, which is approximately of 10°C lower than the melting temperature of the ($\alpha\text{-Al} + \text{Al}_3\text{Ni} + \text{Si}$) ternary eutectic in the Al–Si–Ni system [12]. Such solidus temperature lowering compared with the equilibrium phase diagram is in high accordance with the investigation and results from [3]. They explained the phenomenon by non-equilibrium intermetallics appearance during a rapid crystallization.

The alloys' CTE calculations were carried out by the dynamometric method for the initial (cast) state.

Figure 8 shows the experimental data of CTE measurement, and the calculation results are presented in Table 2. The obtained CTE values are quite close to steel ones, which are of $\approx (11\text{--}15) \cdot 10^{-6} \text{ K}^{-1}$.

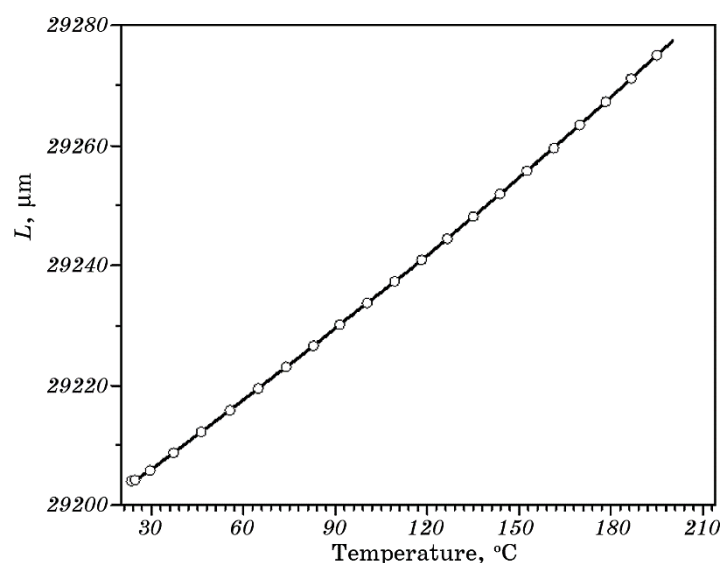


Fig. 8. The dynamometric curve of the studied alloy.

TABLE 2. The temperature dependence of the CTE.

Alloy	CTE, $10^6 \cdot \text{K}^{-1}$	
	100°C	200°C
Al (99.99)	23.43	24.92
Al–Si–Ni (cast alloy No. 3)	13.2	14.2

4. CONCLUSIONS

A technique was developed for pre-alloyed Al–Si–Ni powders manufacture. The proposed method consists of mechanical grinding of the rapidly-quenched (10^5 – 10^6 K/s) from the liquid state ribbons in a high-energy planetary ball mill for 30 minutes with a rotation frequency of 200 rpm and the mass of the balls to the mass of the powder ratio 10:1.

Using different methods of structural analysis, the phase composition and structure of the original cast aluminium alloy with ≈ 24 –28% of Si and ≈ 5 –7% of Ni and powders obtained by grinding in a high-energy ball mill of rapidly-quenched metal ribbons of such an alloy were studied.

The rapidly-quenched ribbons have two structural zones: a 15–20 μm homogeneous structure on the contact side adjacent to the barrel and a columnar structure with signs of fibrousness on the free side of the strip. No phase transformations were observed in the alloy powders in the temperature range up to the solidus temperature. It was found the solidus temperature declined compared with the equilibrium phase diagram to ≈ 545 – 549°C , which is $\approx 10^\circ\text{C}$ lower. This shows that the structure obtained after the rapidly cooling solidification differs significantly from the equilibrium one.

It was established that the powders of these alloys have an irregular shape with a wide range of sizes from 4 to 500 μm , and the structure of the powders is optimal for further usage in powder metallurgy production.

REFERENCES

1. O. E. Osintsev, *Metal Sci. Heat Treatment*, **40**: 172 (1998).
2. *Aluminium Alloys: New Trends in Fabrication and Applications* (Ed. Zaki Ahmad) (Intechopen: 2012).
3. V. V. Vasenyev, *Razrabotka Kompozitsionnogo Materiala na Osnove Sistemy Al–Si–Ni s Nizkim Znacheniem TKLR i Tekhnologii Polucheniya Polufabrikatov dlya Izdeliy Raketno-Kosmicheskoy Tekhniki* [Development of a Composite Material Based on the Al–Si–Ni System with a Low CTE Value and Technology for Producing Rocket and Space Technology Products] (Thesis of Disser. for Cand. Techn. Sci.) (Moskva: MAI: 2017) (in Russian).

4. Elwin L. Rooy, *Introduction to Aluminum and Aluminum Alloys* (ASM International: 1990).
5. O. E. Osintsev and S. L. Nikitin, *High-Strength Corrosion-Resistant Cast Aluminum Alloys of the Al–Mg System with a High Silicon Content* (MATI: 2008).
6. *Temperature Coefficient of Linear Expansion of Steel* (Online Resource) <http://thermalinfo.ru/svoystva-materialov/metally-i-splavy/temperaturnyj-koeffitsient-linejnogo-rasshireniya-stali>
7. G. V. Samsonov, *Handbook of the Physicochemical Properties of the Elements* (New York: Springer: 1968).
8. T. Bedo, B. Varga, D. Cristea, A. Nitoi, A. Gatto, E. Bassoli, G. Bulai, I.-L. Velicu, I. Ghiuta, S. Munteanu, M. A. Pop, C. Gabor, M. Cosnita, L. Parv, and D. Munteanu, *Metals*, **9**, Iss. 5: 483 (2019).
9. X. M. Pan, Z. P. Jin, and J. Zhao, *Metallurgical Mater. Trans. A*, **36**: 1757 (2005).
10. W. Xiong, Y. Du, R.-X. Hu, J. Wang, W.-W. Zhang, P. Nash, and X.-G. Lu, *Int. J. Mater. Research*, No. 6: 598 (2008).
11. N. A. Belov, S. V. Savchenko, and A. V. Khavan, *Fazovyy Sostav i Struktura Siluminov* [Phase Composition and Structure of Silumins] (MISiS: 2008) (in Russian).
12. V. S. Zolotarevsky, N. A. Belov, and M. V. Glazoff, *Casting Aluminum Alloys* (Amsterdam: Elsevier: 2007).

PACS numbers: 06.60.Vz, 68.35.Fx, 68.37.Hk, 68.55.J-, 81.15.Pq, 81.20.Vj, 82.45.Qr

Morphology of Barrier Coatings and Formation of an Interphase Boundary by Brazing of Dissimilar Alloys

S. V. Maksymova, P. V. Kovalchuk, and V. V. Voronov

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

As established by the conducted studies of brazing dissimilar joints of Kovar with titanium alloy, applying a standard procedure of barrier nickel coating deposition on a titanium alloy by electrolytic method does not ensure its integrity during vacuum heating in the brazing mode. The structure, chemical heterogeneity of brazed joints and surface morphology of the nickel coating are studied by applying the chemical method of producing a barrier nickel coating. Proceeding from the derived investigation results, a 4-stage technology of electrolytic application for the barrier nickel coating is proposed. This coating preserves its integrity during vacuum brazing of the following dissimilar metals: BT1-0 titanium alloy with 29NK precision alloy. A detailed study of the Kovar + BT1-0 brazed joints with the application of electron microscopy and x-ray microspectral analysis confirm the formation of dense brazed seams with full penetration fillet regions with a eutectic rod-like structure, when using silver brazing filler metal.

Key words: structure, barrier coating, vacuum brazing, Kovar, titanium alloy.

Проведено дослідження з лютування різнорідних з'єднань ковару з титановим стопом. Встановлено, що застосування стандартної методики нанесення бар'єрного нікелевого покриття електролітичним шляхом на титановий стоп не забезпечує його цілісність під час нагріву за режимом високотемпературного лютування у вакуумі. Досліджено морфологію поверхні нікелевого покриття, структуру та хемічну неоднорідність паяних з'єднань із застосуванням хемічного методу одержання бар'єрного нікеле-

Corresponding author: Svitlana Vasylivna Maksymova
E-mail: maksymova@paton.kiev.ua

Citation: S. V. Maksymova, P. V. Kovalchuk, and V. V. Voronov, Morphology of Barrier Coatings and Formation of an Interphase Boundary by Brazing of Dissimilar Alloys, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, 45, No. 8: 963–974 (2023).
DOI: [10.15407/mfint.45.08.0963](https://doi.org/10.15407/mfint.45.08.0963)

вого покриття. На основі одержаних результатів досліджень запропоновано 4-стадійний технологічний процес електролітичного нанесення бар'єрного нікелевого покриття, яке зберігає свою цілісність під час високотемпературного вакуумного лютування різномірних металів: титанового стопу BT1-0 з прецизійним стопом ковар (29НК). Детальне дослідження лютованих з'єднань ковар (29НК) + BT1-0 із застосуванням електронної мікроскопії та мікрорентгеноспектральної аналізи підтвердило формування щільного лютованого шва з утворенням повних плавних гальтєльних ділянок з евтектичною стрижнеподібною структурою із застосуванням срібної люті.

Ключові слова: структура, бар'єрне покриття, вакуумне високотемпературне лютування, ковар, титановий стоп.

(Received April 27, 2023; in final version, May 28, 2023)

1. INTRODUCTION

Brazed components from dissimilar metals are widely applied in the fabrication of various-purpose structures in nuclear, petrochemical, cryogenic, aerospace, shipbuilding and other industries. They include joints of titanium alloys with copper and nickel alloys, corrosion-resistant steel, and Kovar-type precision alloys. When producing this type of joints, the main objective is reducing the finished structure weight by preserving the special properties of its individual elements [1–5].

It should be noted that producing dissimilar joints of titanium alloys with Kovar is extremely poorly covered in the literature. However, the general approaches to producing dissimilar joints of this type are similar to those for titanium joints with corrosion-resistant steel.

Ensuring a reliable joint of bimetal titanium-steel (Kovar) structures is limited by two aspects: first, a considerable difference in the physical properties, such as the coefficient of thermal expansion, density and heat conductivity, which may lead to microstructural heterogeneity in the interphase region and high residual stresses [6–8]; and second, formation of intermetallic compounds at direct contact of titanium with other metals and alloys, which is due to the presence of a concentration gradient on the interface active running of the diffusion processes and seam metal saturation with base metal elements. Such structural features may lower the service properties of the combined dissimilar joints [9–11].

In order to avoid the formation of intermetallic phases, which may appear at the contact of molten brazing filler metal with titanium and Kovar (copper, corrosion-resistant steel, nickel, *etc.*), barrier coatings are used, which should prevent direct contact and their active interaction. Applying such coatings in combination with optimal temperature–time parameters of the brazing process promotes the improved

performance of the produced brazed joints.

Metal, which is compatible with the brazing filler metal and forms strong bonds with the main structural material, is used for such barrier coatings. Coatings are produced using different methods: electrochemical, chemical, plasma deposition, or by vapour phase deposition on a cold substrate at electron beam heating, *etc.* [12–17]. Different elements, ensuring the required level of protection, are used as coatings. Barrier nickel coatings became widely applied at brazing. Their disadvantages include possible delamination at furnace treatment, which is attributable to hydrogenation during electrolysis with subsequent evolution of gaseous hydrogen, which impairs the physical-mechanical properties of the cathodic deposit, promotes the increase of internal stresses, leading to brittleness, the appearance of cracks, and delamination in some regions [18].

The purpose of the work is to study the structure of barrier nickel coatings on the BT1-0 titanium alloy and their behaviour, when heated according to the brazing thermal cycle, and to create a bearing technology that ensures integrity by brazing dissimilar materials and prevents chemical interaction of the molten brazing filler metal with the titanium substrate.

2. EXPERIMENTAL PROCEDURE

BT1-0 titanium alloy, Kovar precision alloy (29NK), and BAg8 brazing filler metal were used to perform the experiments (Table 1).

The barrier nickel coating was applied on BT1-0 titanium alloy using chemical and electrolytic methods.

For chemical deposition of nickel on BT1-0 titanium alloy, the following solution was used (g/l): nickel chloride—12–15, sodium hypophosphite—15–25, sodium citric acid—30–50, ammonium chloride—30–40, aqueous ammonia 25%—70–100, $pH = 8–9$. The time, during which the nickel layer was deposited, varied from 1 to 1.5 h. The solution was heated to the temperature of 80–90°C, and the temperature was monitored during the entire deposition process.

Electrolytic deposition of the barrier nickel coating was performed,

TABLE 1. Chemical composition of experimental materials.

Material/Grade	Chemical elements, wt. %					
	Fe	Ni	Co	Ti	Cu	Ag
BT1-0	up to 0.15	–	–	99.58–99.9	–	–
Kovar	51.14–54.52	8.5–29.5	17–18	up to 0.1	up to 0.2	–
BAg8	up to 0.1	–	–	–	27.29–28.47	1.5–72.5

using the following electrolyte (g/l): nickel sulfuric acid (NiSO_4)—250–300; nickel chloride (NiCl_2)—50–60; boric acid (H_3BO_3); $\tau = 25\text{--}30$ s. The schematic of the electrolytic method of barrier coating deposition is given in Fig. 1.

Further, the samples with the deposited nickel layer were heated in a

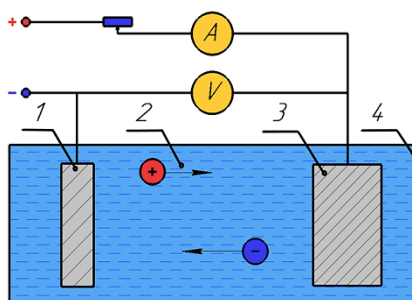


Fig. 1. Schematic of electrolytic method of barrier coating deposition: 1—anode; 2—electrolyte; 3—cathode; 4—container.

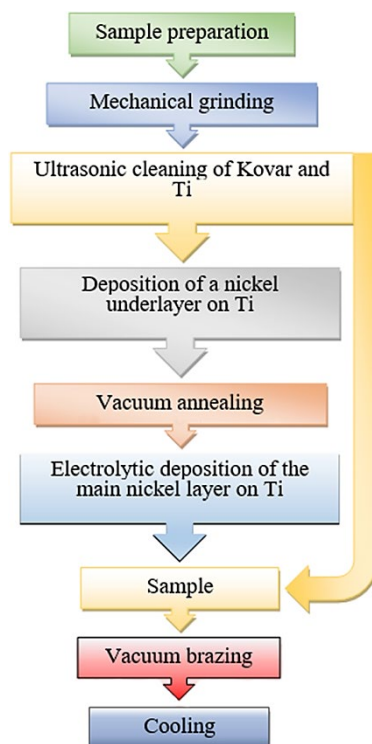


Fig. 2. Experimental procedure of brazing.

vacuum of $5 \cdot 10^{-5}$ mm Hg up to the temperature of 800°C with 3 min soaking and were brazed with the application of silver brazing filler metal (BAg8). Experimental procedure of brazing is shown in Fig. 2.

The produced samples with coating and samples of brazed dissimilar joints were used to prepare microsections by the standard procedure. They were studied (without chemical etching) by applying a scanning electron microscope Tescan Mira 3 LMU, fitted with energy-dispersive spectrometer Oxford Instruments X-max 80 mm² with INCA software package.

3. RESULTS AND DISCUSSION

During the investigation of titanium alloy samples with a nickel coating, which was produced by chemical method, it was established that despite the coating appearance (without any visible defects), it does not preserve its integrity at subsequent high-temperature heating in vacuum (Fig. 3, *a, b*).

It is related to the presence in the coating composition of a considerable amount of phosphorous, which precipitates from the electrolyte. During heating by the thermal mode of brazing, phosphorus interacts with the titanium substrate to form a brittle layer, which leads to the cracking of the coating with its further delamination (Fig. 3, *b*). The increase of phosphorus concentration in the coating along the seam–titanium alloy interface is confirmed by the results of x-ray microspectral studies, which were derived at electron beam scanning of dissimilar Kovar–titanium alloy joints (Fig. 4, *a, b, c, d*).

Local x-ray microspectral analysis revealed that, after brazing, the

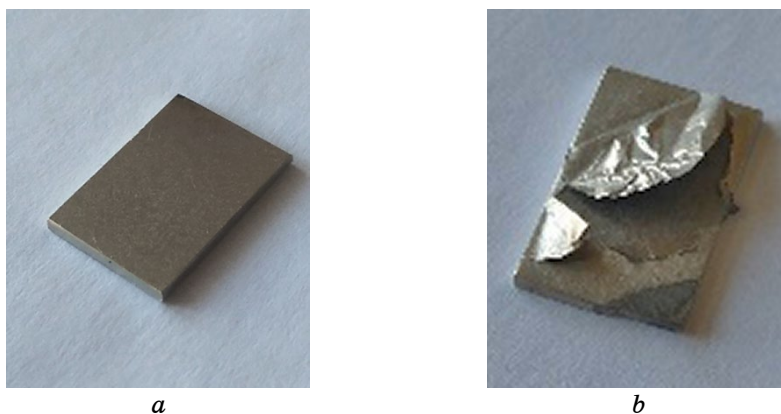


Fig. 3. Sample of BT1-0 alloy coated by a layer of nickel by the chemical method: before (*a*) and after heating (*b*) in vacuum at the temperature of 800°C , 3 min.

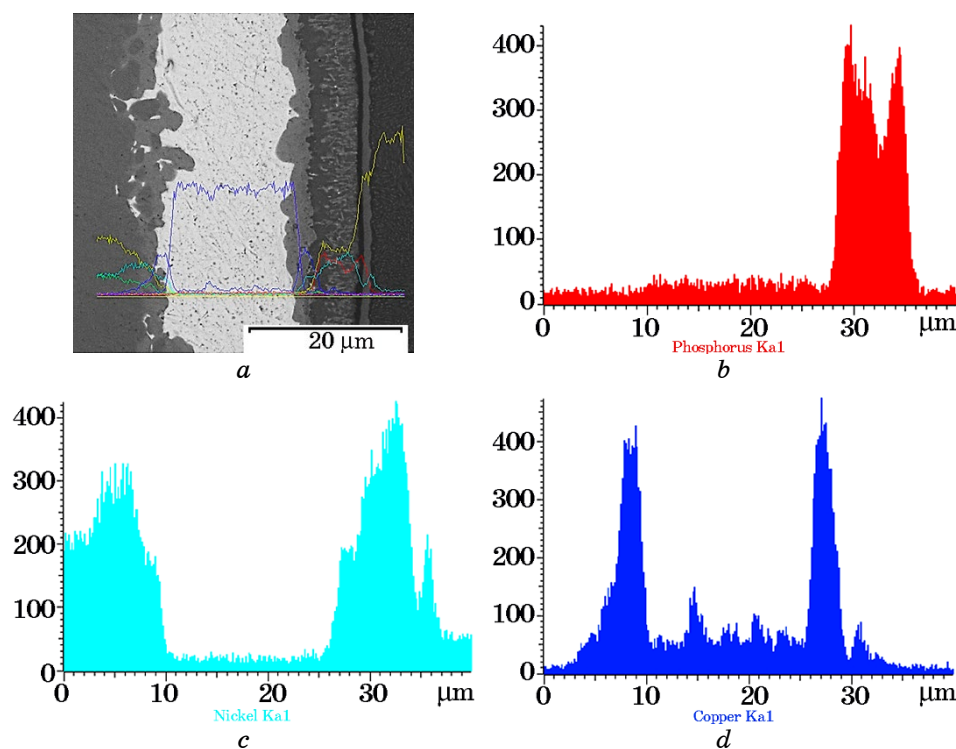


Fig. 4. Electronic image (*a*) and qualitative distribution of the following elements: phosphorus (*b*); nickel (*c*); copper (*d*); at electron beam scanning of Kovar–titanium alloy brazed joint.

zone of the nickel coating (produced chemically) contains up to 18.34 wt. % phosphorus (Fig. 5, *a*, Table 2).

A silver-based solid solution with inclusions of copper-based solid solution in the central zone and a copper-based solid solution in the peripheral regions are predominantly crystallized in the brazed seam.

The structure of the fillet region differs from the one described above. It is characterized by a classical rod-like eutectic structure formed by two solid solutions: silver-based and copper-based (Fig. 5, *b*). A classical electrolytic method of coating deposition was used to eliminate the presence of phosphorus and improve the quality of barrier nickel coating [12].

The main advantages of this method are simplicity, relatively low cost, stability and controllability of the process, and the possibility of simultaneous deposition on the entire product surface. The scheme of this process is given in Fig. 1.

Based on the available published data, nickel plating is usually performed using electrolytes, in which nickel is present mainly in the

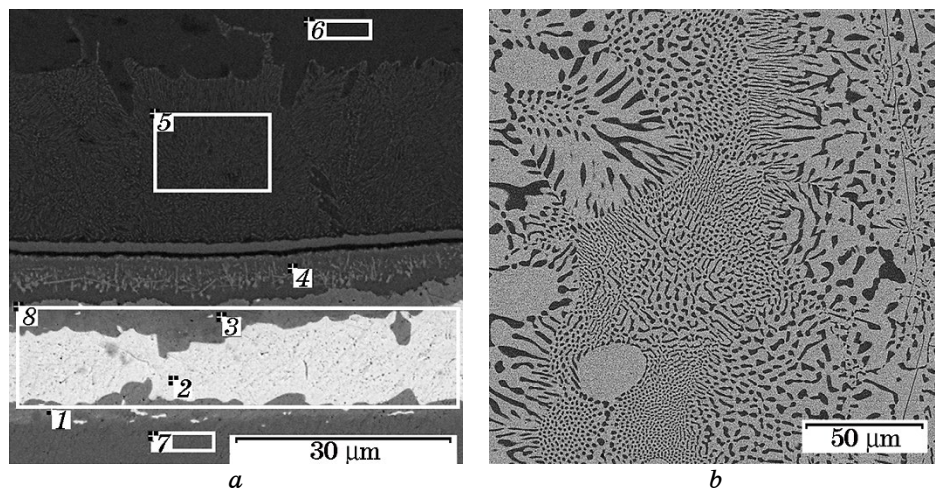


Fig. 5. The studied regions (*a*) and the microstructure of the fillet (*b*) of Kovar–titanium alloy brazed joint with chemically produced barrier coating.

TABLE 2. Chemical composition of individual phases in Kovar–titanium alloy brazed joint.

No. of spectrum	Chemical elements, wt. %							
	Al	P	Ti	Fe	Co	Ni	Cu	Ag
1	0.00	0.00	0.25	2.09	0.74	7.61	86.24	3.07
2	0.00	0.00	0.48	0.24	0.35	0.34	8.40	90.19
3	0.00	0.20	2.79	2.31	0.65	29.20	64.37	0.48
4	0.00	18.34	25.63	0.64	0.26	50.08	5.04	0.00
5	0.25	0.19	92.29	0.24	0.00	7.03	0.00	0.00
6	0.37	0.00	99.39	0.00	0.00	0.24	0.00	0.00
7	0.00	0.00	0.39	52.95	18.28	28.38	0.00	0.00
8	0.10	0.00	0.58	0.76	0.22	4.37	37.28	56.69

form of two-valent cations Ni^{2+} [12, 13].

Depending on the nickel salt used, the electrolytes are divided into three main groups: sulphate, sulfamate and fluoroborate. In addition to nickel salts, various organic and inorganic additives are introduced into the composition of electrolytes, which promote an increase of the solutions' electrical conductivity and anode solubility, prevent slurry formation, allow obtaining shiny deposits on the base metal surface, increase the hardness, reduce porosity and eliminate the process of pitting formation in the coatings [12, 13].

It should be noted that the proposed in literature etching and deposition of underlayers, using a mixture of nitric and hydrofluoric acids in any concentration, leads to deterioration of the coating properties and its adhesion to the substrate, causing delamination during heating. This is related to the formation of titanium hydrate on the surface, which decomposes at heating in a vacuum with hydrogen evolution, which is exactly what results in coating delamination. As nickel precipitation on the cathode occurs with a considerable electrode polarisation and the overvoltage of hydrogen evolution on nickel is low, the amount of coating metal decreases at nickel plating. In order to increase it, the solution pH is maintained in the range of 4.0–4.5. Under such conditions, there is no formation of nickel hydroxides, which influence the coating's mechanical properties. In order to stabilize the solution pH , buffer additives are introduced into the electrolyte composition (usually boric acid H_3BO_3) [14].

During the performance of experiments on spreading of BAg8 brazing filler metal over the barrier nickel coating (on titanium alloy samples), it was found that the application of a standard procedure of electrolytic deposition of the barrier coating does not ensure its integrity during heating in vacuum (vacuum of $5 \cdot 10^{-5}$ mm Hg, 800°C, 3 min). In some areas, it peels off with the formation of convex regions, which is clearly shown in Fig. 6, *a, b*.

Detailed microstructural studies showed that when producing a nickel coating on the titanium plate by electrolytic method (without deposition of a nickel interlayer), crystallization of a dispersed crystalline structure takes place, consisting of particles of a faceted shape. Its density is very low in some regions (Fig. 7, *a, b*).

The formation of isolated defects in the form of pores of different geometry and dimensions is observed in individual regions of the pro-

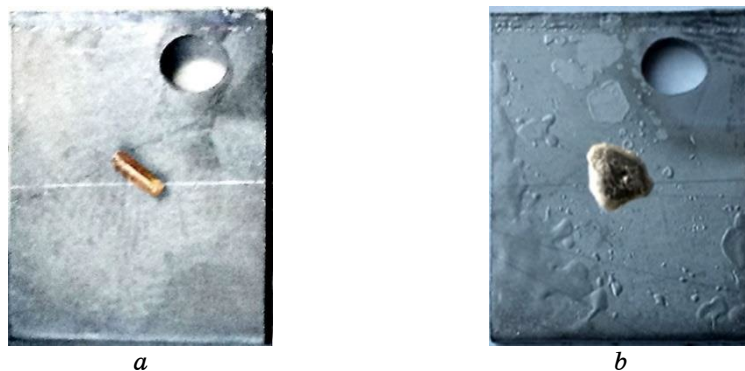


Fig. 6. Samples of BT1-0 alloy with barrier nickel coating and BAg8 brazing filler metal: before (*a*) and after heating (*b*) in vacuum.

duced coating surface. It should be noted that the presence of porosity in the coating at the brazing of dissimilar materials has an adverse effect on the brazed joint quality.

Proceeding from the obtained investigation results, a 4-stage tech-

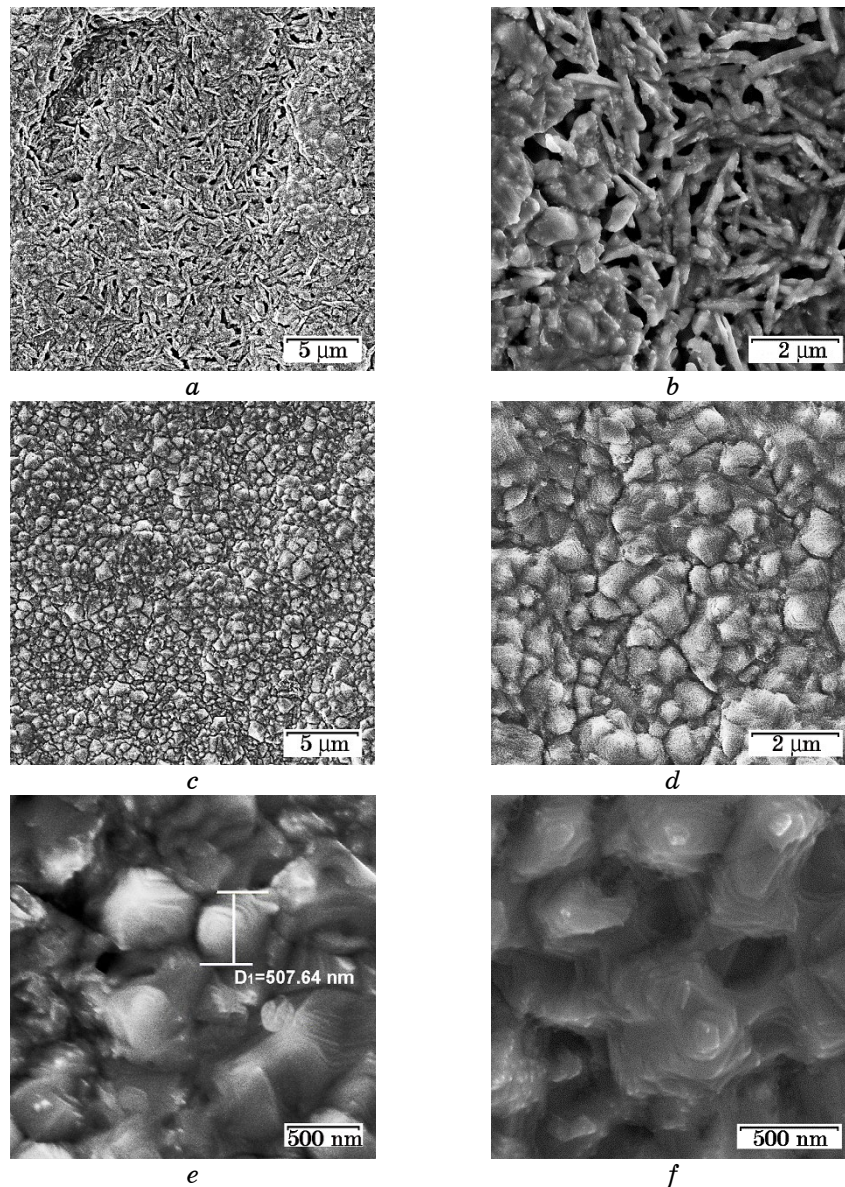


Fig. 7. The surface of the nickel coating of a low density (*a, b*) produced without underlayer (heat treatment) and with underlayer and heat treatment (*c, d, e, f*).

nological process of deposition of a barrier nickel coating on the titanium alloy was proposed and verified, which ensures its density and integrity at further vacuum heating [19]. This technology includes the following stages: mechanical grinding; chemical deposition of a nickel underlayer (solution composition (g/l): 200–220 of NiCl_2 ; 140–150 of HCl ; ammonium fluoride 20–40, $T = 35\text{--}40^\circ\text{C}$, $\tau = 3\text{--}25$ s); annealing in the following mode: $T = 500^\circ\text{C}$, $\tau = 2.5$ h under a vacuum not worse than $5 \cdot 10^{-5}$ mm Hg.

At the electrolytic deposition of the main nickel layer, the nickel particles are formed on the already existing underlayer, their crystallization and growth occurring in different directions and, thus, they cover the entire surface of the underlayer and form the main dense coating (Fig. 7, *c, d, e, f*). The dispersed structure of the coating consists of particles of faceted morphology of various sizes from 507 nm to 1 μm (Fig. 7, *c, d*). Results of local x-ray microspectral analysis revealed the presence of titanium in the amount not exceeding 7.8 wt.%.

During the performance of experiments to produce dissimilar joints of Kovar + BT1-0 with the application of BAg8 brazing filler metal in keeping with the thermal mode of brazing, it was found that at the application of the proposed procedure of nickel coating deposition, it preserved its integrity during brazing, and delamination was absent (Fig. 8, *a, b*). The input (Fig. 8, *a*) and output fillets (Fig. 8, *b*) are clearly visible on the brazed samples.

A detailed study of Kovar + BT1-0 brazed joints with the application of electron microscopy and x-ray microspectral analysis confirmed the sound formation of the coating (Fig. 9, *a*) and dense brazed seams with full fillet regions (Fig. 9, *b*).

During brazing studies, it was established that the proposed procedure of barrier nickel coating deposition on a titanium alloy allows producing sound brazed joints and preventing chemical interaction of molten brazing filler metal with BT1-0 titanium alloy.

4. CONCLUSION

As determined, applying the standard procedure of chemical and electrolytic deposition of barrier nickel coating on the titanium alloy does not ensure its integrity at further heating by the mode of the technology of brazing Kovar–titanium alloy dissimilar joints (in vacuum).

The results of local x-ray microspectral analysis confirmed that at the application of the chemical method of producing the nickel coating, a nickel layer is deposited, which contains phosphorus (up to 18 wt.%).

Proceeding from the performed research, a 4-stage technology of electrolytic deposition of a barrier nickel coating on BT1-0 titanium alloy was proposed. It includes producing a nickel interlayer and its heat treatment (before deposition of the main layer) to ensure the in-

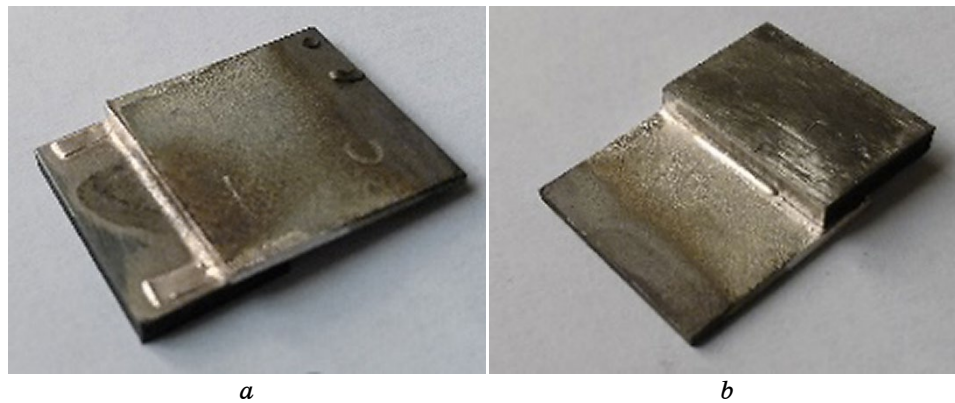


Fig. 8. Appearance of brazed samples with input (*a*) and output fillets (*b*) in joints of Kovar (29NK)–titanium alloy (BT1-0).

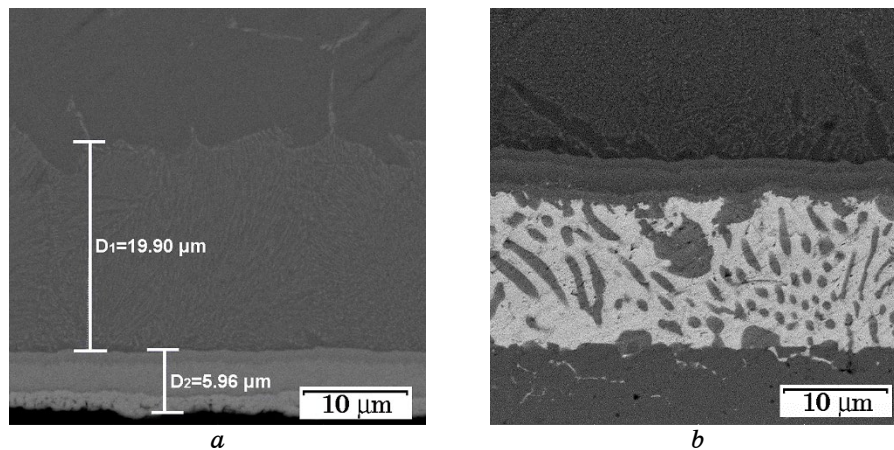


Fig. 9. Nickel coating on a titanium plate (*a*) and seam microstructure (*b*) in Kovar + BT1-0 brazed joint.

tegrity under vacuum heating by the mode of brazing Kovar–titanium alloy dissimilar joints and to prevent the interaction of molten brazing filler metal with BT1-0 titanium alloy.

It was proved empirically, using electron microscopy, that, at vacuum brazing of Kovar + BT1-0 dissimilar joints, the proposed barrier nickel coating promotes the formation of tight sound brazed seams.

REFERENCES

1. N. K. Adomako, J. O. Kim, S. Hwan, L. Kyung-ho Noh, and J. H. Kim, *Mater.*

- Sci. Eng. A*, **732**, No. 8: 378 (2018).
2. T. Song, X. Jiang, Z. Shao, D. Mo, D. Zhu, M. Zhu, C. H. Young, and Z. Luo, *J. Iron, Steel Res. Int.*, **24**, No. 10: 1023 (2017).
3. D. Mo, T. Song, Y. Fang, X. Jiang, C. Q. Luo, M. D. Simpson, and Z. Luo, *Adv. Mater. Sci. Eng.*, **2018**: 1 (2022).
4. G. V. Ermolaev, V. V. Kvasnitsky, V. F. Kvasnitsky, S. V. Maksymova, V. F. Khorunov, and V. V. Chigarov, *Payannya Metaliv* [Brazing Materials] (Mykolaiv: NUK: 2015) (in Ukrainian).
5. Y. Fang, X. Jiang, D. Mo, T. Song, Z. Shao, D. Zhu, M. Zhu, and Z. Luo, *Adv. Mater. Sci. Eng.*, **2018**: 1 (2018).
6. J. Song, A. Kostka, M. Veehmayer, and D. Raabe, *Mater. Sci. Eng. A*, **528**, No. 6: 2641 (2011).
7. N. N. Kumar, G. D. J. Ram, S. S. Bhattacharya, H. C. Dey, and S. K. Albert, *Trans. Indian Inst. Met.*, **68**, No. 2: 289. (2015).
8. G. J. Qiao, H. J. Wang, J. Q. Gao, and Z. H. Jin, *Mater. Sci. Forum*, **486–487**: 481 (2005).
9. V. Sh. Avagyan, *Bulletin of the Donbas State Machine-Building Academy*, **2**, No. 19: 21 (2010) (in Ukrainian).
10. S. H. Baghjari, M. Gholambargani, and S. A. A. Akbari Mousavi, *Lasers Manuf. Mater. Process.*, **6**: 14 (2019).
11. V. V. Andreeva and V. I. Kazarin, *Novyye Konstruktsionnyye Khimicheski Stoykie Materialy* [New Structural Chemical-Resistant Materials] (Moskva: Goskhimizdat: 1961) (in Russian).
12. M. A. Dasoyan, I. Ya. Palmskaya, and E. V. Sakharova, *Tekhnologiya Ehlektrokhimicheskikh Pokrytiy* [Technology of Electrochemical Coatings] (Leningrad: Mashinostroyeniye: 1989) (in Russian).
13. F. F. Azhugin, M. A. Belenky, and I. E. Gall, *Gal'vanotekhnika: Spravochnik* [Electroplating: Reference Book] (Eds. A. M. Ginberg, A. F. Ivanov, and L. L. Kravchenko) (Moskva: Metallurgiya: 1987) (in Russian).
14. G. Ya. Yakimenko and V. M. Artemenko, *Tekhnichna Ehlektrokhimiya. Ch. III. Metody Galvanichnogo Vyrobnystva: Pidruchnyk* [Technical Electrochemistry. Part III. Galvanic Manufacturing Methods: Textbook] (Eds. B. I. Bayrachny) (Kharkiv: NTU KhPI: 2006) (in Ukrainian).
15. L. V. Shishkina, S. M. Karabanov, and O. G. Lokshtanov, *Electrolytic Coatings of Contact Systems Using Barrier Layers Based on Copper–Nickel, Cobalt–Tungsten and Nickel–Molybdenum Alloys*.
16. K. Yu. Yakovchuk, A. V. Mikitchik, Yu. E. Rudoy, and A. O. Akhtyrsky, *Electrometallurgy Today*, **4**: 36 (2016) (in Russian).
17. V. M. Chertov, *Barrier Coatings on Stainless Steel*.
18. A. Spiridonov, A. L. Gusev, and Yu. N. Shalimov, *Hydrogenation of Nickel Coatings Produced with Direct and Pulsed Current*.
19. S. V. Maksymova, V. V. Voronov, P. V. Kovalchuk, and D. V. Lozbin, *Sposib Nanesennya Nikelevoho Pokryttya na Tytan i Yoho Splavy* [Method for Applying Nickel Coating on Titanium and its Alloys]: Patent of Ukraine No. 118895, C25D 3/12 (Publ. 25-03-2019, Bull. No. 6) (2019) (in Ukrainian).

PACS numbers: 61.72.Ff, 68.55.Nq, 81.05.Bx, 81.20.Ev, 81.65.Kn, 81.70.Jb, 81.70.Pg

Influence of Refractory Elements on Phase–Structural Stability of Heat-Resistant Corrosion-Resistant Alloys for Gas Turbine Blades

Y. H. Kvasnytska, I. A. Shalevska, A. I. Balitskii*, L. M. Ivaskevich*,
I. I. Maksuta, and K. H. Kvasnytska

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

**Karpenko Physico-Mechanical Institute of the N.A.S. of Ukraine,
5 Naukova Str.,
UA-79060 Lviv, Ukraine*

One of the ways to improve the performance of gas-turbine engine blades is improvement the alloying complexes of heat-resistant nickel alloys used for casting. The influences of refractory metals on the macro- and microstructure and the properties of alloys of this type are analysed. It is proposed to introduce rhenium and tantalum into a heat-resistant corrosion-resistant nickel alloy for the production of working blades of gas-turbine engines. The paper presents the results of the study of the influence of chemical composition on the phase–structural components of heat-resistant alloy. Phase-transition temperatures for a new heat-resistant corrosion-resistant nickel alloy containing rhenium and tantalum have been established: liquidus temperature is of $\cong 1370^{\circ}\text{C}$, solidus temperature is of 1320°C . Studies of the microstructure of the obtained samples in the cast state, after heating and cooling in calorimetric studies, make it possible to confirm that the phase–structural state corresponds to the alloy of this type, it consists of γ -solid solution including γ' -phase and carbides. Rhenium is mainly part of the γ -solid solution, and tantalum strengthens the cell boundaries. When analysing the structures of the studied samples after heating in a calorimeter to 1250°C ,

Corresponding author: Yuliya Heorhiyivna Kvasnyts'ka
E-mail: jul.kvasnitskaja@gmail.com

Citation: Y. H. Kvasnytska, I. A. Shalevska, A. I. Balitskii, L. M. Ivaskevich, I. I. Maksuta, and K. H. Kvasnytska, Influence of Refractory Elements on Phase–Structural Stability of Heat-Resistant Corrosion-Resistant Alloys for Gas Turbine Blades, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **45**, No. 8: 975–992 (2023).
DOI:[10.15407/mfint.45.08.0975](https://doi.org/10.15407/mfint.45.08.0975)

topologically close-packed phases in the alloy containing rhenium and tantalum are not formed. Comparative studies have shown that the introduction of rhenium and tantalum to alloy improves its thermophysical properties, namely, liquidus, solidus and complete-dissolution temperatures, by about 50°C higher than for the standard heat-resistant nickel alloy CM88Y.

Key words: heat-resistant alloy, phase–structural stability, liquidus, solidus, turbine blade, gas-turbine engine.

Одним із шляхів поліпшення експлуатаційних характеристик лопаток газотурбінних двигунів є вдосконалення легувальних комплексів жароміцних ніклевих стопів, що використовуються для їх лиття. Проаналізовано вплив тяжкотопких металів на макро- і мікроструктуру та властивості стопів такого типу. Запропоновано введення Ренію та Танталу у жароміцний корозійностійкий ніклевий стоп для одержання робочих лопаток газотурбінних двигунів. У роботі представлено результати дослідження впливу хемічного складу на фазово-структурні складові жароміцного стопу. Встановлено температури фазових переходів для нового жароміцного корозійностійкого нікелевого стопу, що додатково містить Реній і Тантал. Дослідження мікроструктури одержаних зразків у литому стані, після нагріву й охолодження (калориметричні дослідження) дають можливість підтвердити, що фазово-структурний стан відповідає вимогам до стопу розглянутого типу, тобто складається з γ -твердого розчину з включенням γ' -фази та карбідами. Під час аналізу структур досліджених зразків після нагріву в калориметрі до 1250°C топологічно щільно паковані фази у стопі, що містить Реній і Тантал, не утворювалися. Проведені порівняльні дослідження показали, що введення у стоп тяжкотопких металів сприяє підвищенню його теплофізичних властивостей, а саме, температур ліквідус, солідус та повного розчинення γ' -фази, приблизно на 50°C вище, ніж для стандартного жароміцного нікелевого стопу CM88Y.

Ключові слова: жароміцний корозійностійкий ніклевий стоп, фазово-структурна стабільність, ліквідус, солідус, лопатка турбіни, газотурбінний двигун.

(Received February 15, 2022; in final version, March 16, 2023).

1. INTRODUCTION

It is known that heat-resistant nickel alloys are used for the production of turbine blades for gas turbine engines. The urgency of developing new heat-resistant corrosion-resistant alloys is due to the need to increase the service life of the turbine blades, increase the gas temperature before entering the turbine and save fuel. Simultaneously with the increase in operating temperature in the turbines, it is necessary to ensure the reliability of the blades, reduce the cost of repairing the engine and the production of spare parts. In accordance with the requirements of the design documentation for modern power and marine gas turbine engines, it is necessary to ensure their reliable operation at

the gas inlet temperature at the turbine inlet 1150–1200°C, which will increase power compared to previously developed engines. To increase heat resistance and reduce high-temperature corrosion of the blades, chromium is injected from 12 to 20% of the mass in the alloys. The increased chromium content promotes the formation of carbide phases in the alloy, which reduce the ductility of the cast metal [1–7].

Heat-resistant alloys based on nickel, which are alloyed with rhenium, tantalum, and ruthenium, are created. The use of these elements for alloying modern alloys allows to reduce the concentration of chromium and to increase the strength without reducing the level of corrosion resistance of the blades.

Scientific and practical developments in recent years of world centres engaged in materials science of heat-resistant nickel alloys for gas turbines, aircraft engines have considered materials for blades with low chromium content [8–10]. In this case, the most promising heat-resistant alloys based on nickel (superalloys) for gas turbine blades are alloys doped with rhenium [11–13]. The authors of proceedings [12–14] showed that rhenium is more effective than Ta, W, Mo and others alloying elements and has a high solubility in the γ -phase while the distribution coefficient of the alloying elements between the γ' - and γ -phases is $K/K_s = 0.1$.

The predominant dissolution of rhenium in the austenitic matrix of the alloy reduces the rate of diffusion processes that control the softening of the metal under conditions of high-temperature creep, thereby inhibiting the rate of coagulation and dissolution of the γ' -phase. This helps to maintain long-term strength by increasing the high-temperature stability of the solid solution. It is empirically proved that increasing the concentration of alloying elements with large atomic radii has a more significant effect on the change in the lattice parameter of the γ -phase than the γ' -phase, and since rhenium and tantalum have an atomic radius larger than nickel (ratio for rhenium—1.063), they have a positive effect on the mismatch between the periods of the crystal lattices of the γ - and γ' -phases—the so-called misfit $\Delta a_{\gamma-\gamma'} = (a_{\gamma} - a_{\gamma'})/a_{\gamma}$. This is a determining factor in the long-term strength of poly- and single crystals of heat-resistant alloys at high temperatures. Rhenium has a low diffusion coefficient in nickel and therefore it inhibits the coagulation processes of the strengthening γ' -phase, thereby, increasing its thermal stability. In this case, Re partially displaces tantalum and aluminium from the solid solution, which are mainly in the γ' -phase, as a result of which it effectively strengthens it [15, 16].

The positive effect of rhenium on the heat resistance of heat-resistant nickel alloys is due to the increase in solidus temperature, its increased solubility in solid nickel solution and decrease in the diffusion coefficients of alloying elements.

In recent years, tantalum has been actively used for alloying heat-

resistant alloys, which leads to a significant increase in the strength characteristics of the alloy [17–19]. It belongs to the γ' -phase-forming elements and therefore significantly increases the heat resistance and heat resistance of alloys, as well as the dissolution temperature of the γ' -phase. Tantalum-doped alloys are also used for the manufacture of blades of stationary power gas turbines (GTU), for example, of type ZMI-3U, TsNK-21, TsNK-7, TsNK-8. In them, the gas temperature at the inlet to the turbine is from 750°C to 950°C, which is much lower than in aviation gas turbine engines.

Studies in recent years have shown that the joint introduction of tantalum and rhenium in the alloy provides a sharp decrease in the diffusion mobility of elements in the alloy, especially at high temperatures, significantly strengthens the solid solution and stabilizes the γ' -phase, in particular slows down the formation of large γ' -phase particles, due to coagulation and increases the dissolution temperature of small [19–21]. This also leads to an increase in heat resistance and thermal stability of heat-resistant nickel alloys [17]. However, it was found that the replacement of vanadium with tantalum in another alloy (ZhS32) also increases its heat resistance by about three times, compared with alloys ZhS-6U and ZhS-26U.

The high content of refractory metals in alloys of this type increases the risk of formation in them of fragile intermetallic topologically densely packed (MS) phases and, above all, σ -phases $(\text{Cr}, \text{Mo})_x(\text{Ni}, \text{Co})_y$, where x and y can change in ranging from 1 to 7 [2, 9, 12, 17]. The crystal structure of the σ -phase belongs to the tetragonal with a complex unit cell containing 30 atoms. Since the crystal lattices of the σ -phase and Me_{23}C_6 carbide are coherent, the σ -phase often originates on the secretions of Me_{23}C_6 carbide. This type of phase is formed in the form of plates and therefore dramatically reduces the resistance to destruction of alloys at high temperatures, adversely affecting ductility and durability.

The most important role in ensuring the long-term strength of heat-resistant alloys, their manufacturability during casting and heat treatment belongs to the temperatures of phase transformations. Temperatures of complete dissolution of the γ' -phase in γ -solid solution $T_{\text{c.d.}}$ (T_{solvus}), temperature solidus T_S and liquidus T_L are not only characteristics of thermal stability, but also determine, in the first approximation, the maximum temperature performance of the heat-resistant alloy [22–24].

Phase transition temperatures also determine some technological properties. In particular, the temperature interval of crystallization $\Delta T_{\text{cr}} = T_L - T_S$, which characterizes the tendency of alloys to form a directional columnar structure of castings during directional crystallization and bulk microporosity. The solvus and solidus temperatures determine the conditions for the formation of a homogeneous struc-

ture of γ' -phase particles in the matrix of a homogeneous γ -solid solution during heat treatment. The value of the 'heat treatment window', which is expressed by the temperature difference $T_S - T_{c.d.}$, should be large enough to carry out high-temperature homogenization without the risk of melting [25, 26].

Over the last decade, PTIMA of the N.A.S. of Ukraine has been studying the effect of refractory metals such as rhenium, tantalum, ruthenium on the structure and properties of heat-resistant corrosion-resistant alloys for gas turbine blades and created a new composition of heat-resistant corrosion-resistant alloy containing additional rhenium and tantalum. The purpose of this work is to study the temperatures of phase transformations, the study of phase-structural components of the experimental heat-resistant corrosion-resistant alloy for the blades of the first and second stage turbines of gas turbine engines for energy purposes. One of the ways to improve the performance of gas turbine engine blades is improvement the alloying complexes of heat-resistant nickel alloys used for casting. The influences of refractory metals on the macro- and microstructure and the properties of alloys of this type are analysed. It is proposed to introduce rhenium and tantalum into a heat-resistant corrosion-resistant nickel alloy for the production of working blades of gas turbine engines.

The paper presents the results of the study of the influence of chemical composition on the phase-structural components of heat-resistant alloy. Phase transition temperatures for a new heat-resistant corrosion-resistant nickel alloy containing rhenium and tantalum have been established: liquidus temperature of $\cong 1370^\circ\text{C}$, solidus temperature of $\cong 1320^\circ\text{C}$. Studies of the microstructure of the obtained samples in the cast state, after heating and cooling in calorimetric studies make it possible to confirm that the phase-structural state corresponds to the alloy of this type, it consists of γ -solid solution including γ' -phase and carbides. Rhenium is mainly part of the γ -solid solution, and tantalum strengthens the cell boundaries. When analysing the structures of the studied samples after heating in a calorimeter to 1250°C , topologically close-packed (TCP) phases in the alloy containing rhenium and tantalum were not formed.

Comparative studies have shown that the introduction of rhenium and tantalum alloy improves its thermophysical properties, namely liquidus, solidus and complete dissolution temperatures, by about 50°C higher than for the standard heat-resistant nickel alloy CM88Y.

2. EXPERIMENTAL/THEORETICAL DETAILS

Five samples of experimental alloy and known industrial alloy CM88Y [5, 27–29] were investigated. The chemical composition of the samples of experimental alloys is shown in Table 1.

TABLE 1. Chemical composition of nickel-based heat-resistant alloys.

	Heat-resistant alloy analog, weight %	Experimental heat-resistant alloys, weight %				
	CM88Y	1	2	3	4	5
C	0.07	0.05	0.05	0.05	0.04	0.05
Cr	15.8	12.75	12.75	12.75	12.30	12.75
Co	11.7	7.15	7.15	7.15	7.15	7.15
Mo	1.96	1.15	1.15	1.15	1.15	1.15
W	5.30	6.30	6.30	6.30	6.30	6.30
Al	3.00	3.25	3.25	3.25	3.25	3.25
Ti	4.60	2.20	3.60	2.05	2.05	2.05
Nb	0.15	0.30	0.30	0.30	0.30	0.30
Hf	0.3	≤ 0.1	≤ 0.1	≤ 0.1	≤ 0.1	≤ 0.1
Ta	–	2.75	2.75	3.30	2.75	3.30
Re	–	4.00	4.00	4.00	4.00	4.00
B	0.09	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01

To obtain prototypes of the heat-resistant alloys, which were pre-melted from pure materials, that were melted by vacuum-induction remelting on a foundry unit UPPF-2 by known technology (pressure in the furnace of 1.2–2.5 Pa, pouring temperature in the mould of 1560–1580°C, mould temperature of 800°C).

Determination of the number of main components of alloys and impurities was performed by the chemical method according to standard methods, microdoping additives were controlled by chemical-spectral method with a relative error of $\pm 0.001\%$. To study the structure, phase and local chemical composition of the alloy used a scanning electron microscope ‘Jeol JSM6490LV’ (Japan) with an additional node for micro-x-ray analysis ‘Oxford Jnea Drycool’.

Temperatures of phase transformations, T_S , T_L , $T_{c.d.}$ (complete dissolution of the γ' -phase), were determined by differential scanning calorimetric (DSC). The studies were performed on a high-precision synchronous thermal analyser Netzsh STA449C (Germany) under heating and cooling at a rate of 20°C/min samples of alloys with a size of 2.8×2.8×2.8 mm³. The accuracy of temperature measurement is of $\pm 1.5^\circ\text{C}$.

3. RESULTS AND DISCUSSION

3.1. Study of the Microstructure of Alloy Samples in the Cast State

The structure, phase composition of CM88Y alloys and alloy doped with rhenium and tantalum and their chemical composition depending on the

content of refractory elements are shown in Figs. 1, 2. It is seen that the alloys have a dendritic–cellular structure consisting of γ -solid solution strengthening γ' -phase and carbides. The structure of CM88Y contains carbides $Me(\text{Cr, Fe, W, Mo})_{23}\text{C}_6$ and carbides $Me\text{C}$ based on Ti and Nb.

When studying the structure of the experimental alloy, it is seen that eutectic carbide formations of different sizes and shapes are located at the boundaries of dendritic cells and in the axial space. Refractory chemical elements of the alloy (W, Re) are located in the axes of the dendrites, and Ta, Al, Nb, Ti—enrich the cell boundaries. Rhenium is absent at the boundaries of the dendritic cell. It is mainly part of the γ -phase, and tantalum is mainly doped with the γ' -phase (Fig. 3).

3.2. Determination of Temperature Conditions of Phase Transitions in Heat-Resistant Alloy

For five samples of the experimental alloy and the known industrial alloy CM88Y were determined the main temperatures of phase transformations: temperatures of solidus, liquidus, solvus (complete dissolution) ($T_{\text{c.d.}}$ of γ' -phases). The shift of the level of values of critical points (T_S , T_L) in the direction of increase, from temperature 1271°C,

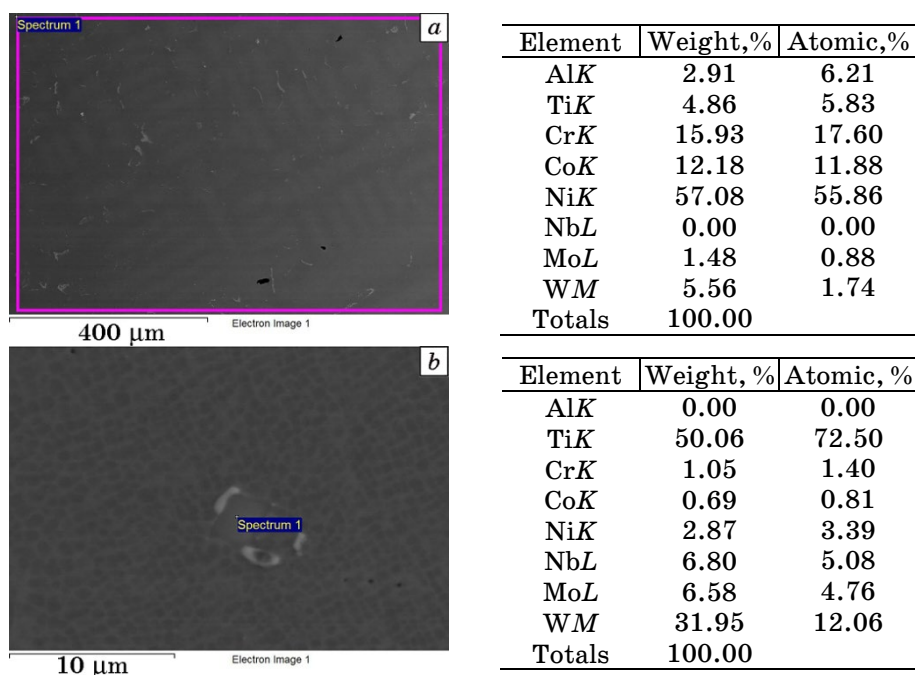


Fig. 1. Microstructures and chemical composition of heat-resistant alloy CM88Y phase: microstructure (a); carbide $Me\text{C}$ (b).

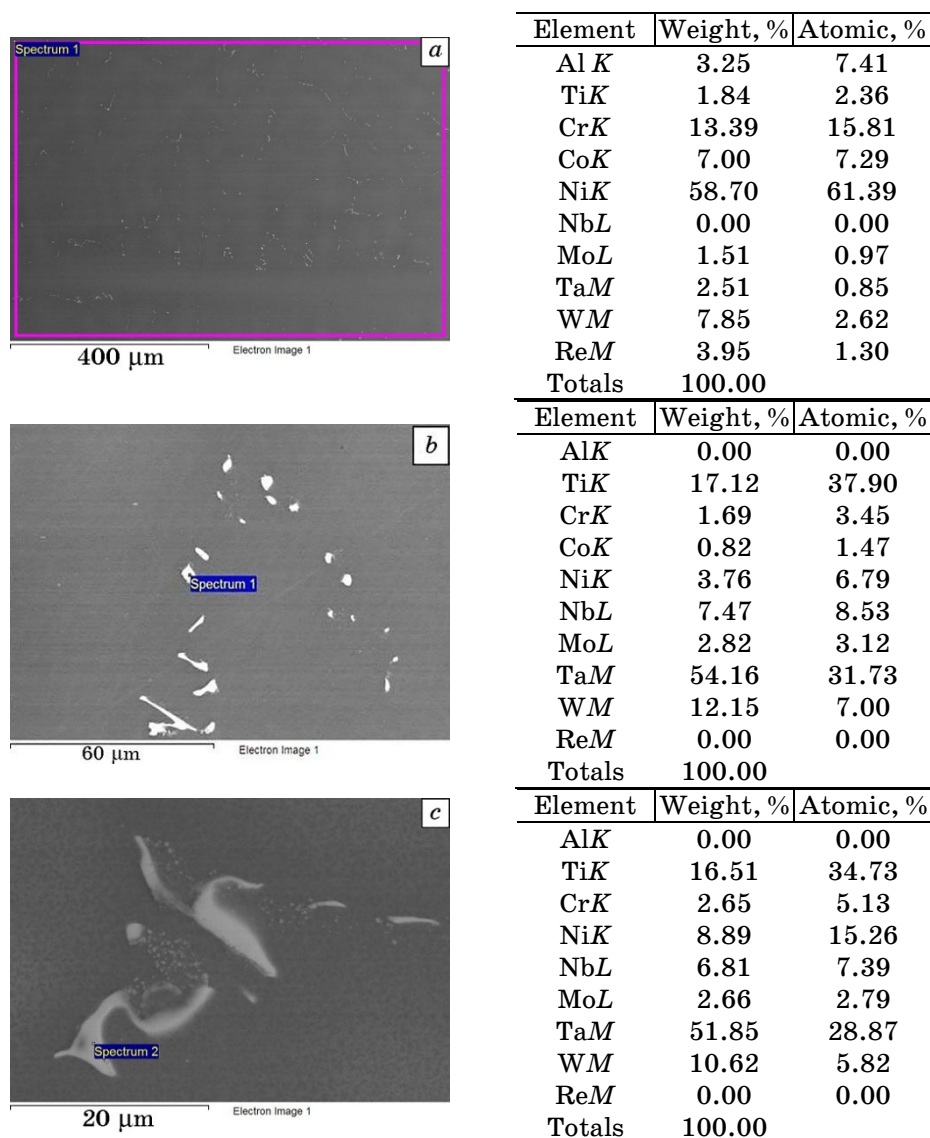


Fig. 2. Microstructures and chemical composition of experimental heat-resistant alloy phase: microstructure and Ti-based carbides (*a*), carbide *MeC* (*b*, *c*).

1332°C to 1326°C, 1385°C, respectively, at introduction of rhenium and tantalum (Table 2) is established.

This is a confirmation of the fact of the positive effect of these elements on the temperature threshold of dissolution of the reinforcing γ' -phase of $\text{Ni}_3(\text{Al}, \text{Ti})$ and determines the increase in the temperature lev-

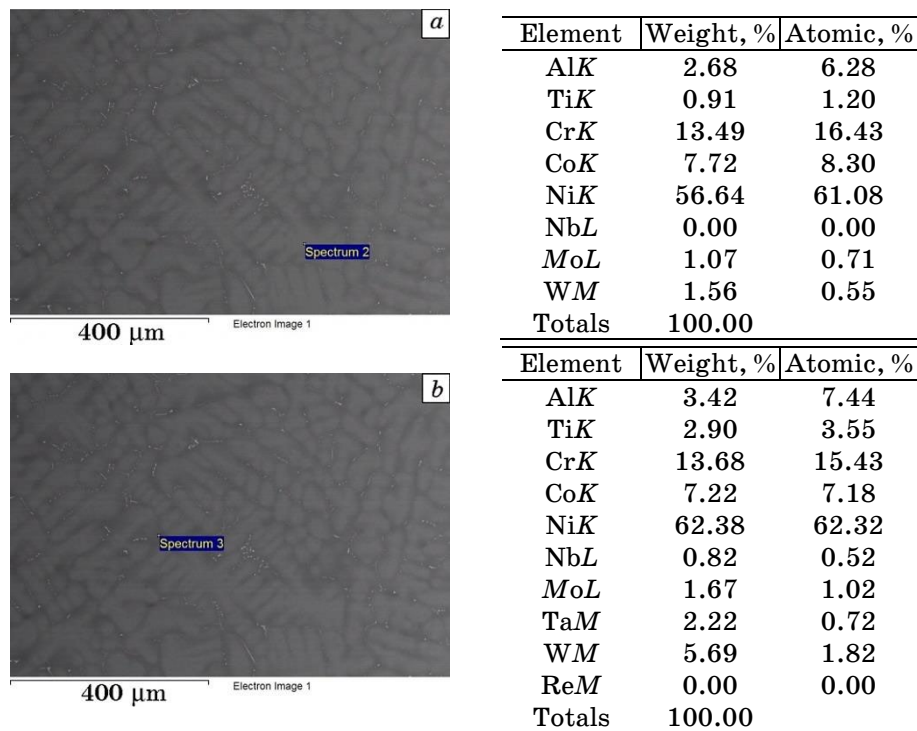


Fig. 3. Microstructure and chemical composition of the experimental alloy (sample 5) in the axes of the dendrite (*a*) and at the cell border (*b*).

el of the alloy containing rhenium and tantalum [17]. In comparison with temperatures for CM88Y, the data obtained for it are 50°C higher.

Figures 4–6 show the DSC curves and their derivatives during heating and cooling of an industrial alloy and two samples of alloys containing rhenium and tantalum (No. 1, No. 5). DSC curves show exothermic and endothermic peaks of reactions in samples during heating and cooling. At all dependences there is a peak in the temperature range from 570°C to 610°C, which is due to the processes of close ordering of chromium atoms in solid solution. As Cr in the alloy decreases, this peak shifts toward a higher temperature.

TABLE 2. Phase-transition temperatures of nickel-based heat-resistant alloys.

Temperature of phase transitions	Experimental heat-resistant alloy					CM88Y
	1	2	3	4	5	
$T_S, ^\circ\text{C}$	1313	1313	1326	1326	1331	1271
$T_L, ^\circ\text{C}$	1372	1372	1376	1376	1387	1332
$T_{\text{solvus}}, ^\circ\text{C}$	1158	1162	1174	1174	1172	1180

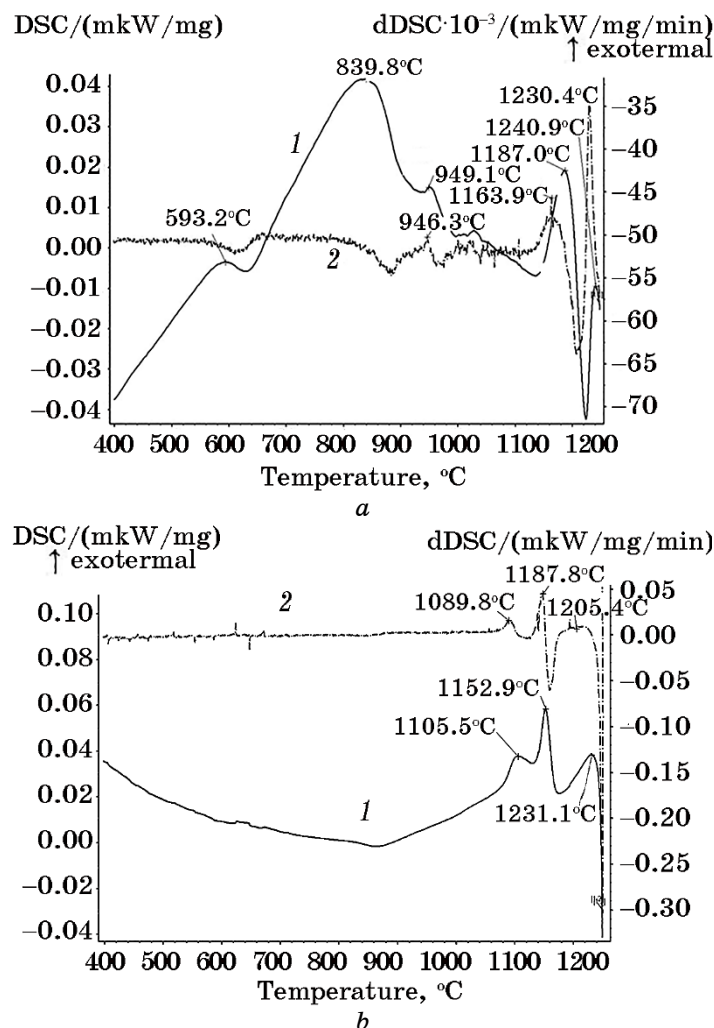


Fig. 4. Differential scanning calorimetry (DSC)—curves (1) and derivatives of them (2) alloy CM88Y: heating (a), cooling (b).

The intense peak on the DSC curve at 840°C (on a sample CM88Y) and on experimental samples—at 876°C (sample 1) and at 806°C (sample 5) during heating corresponds to the initial processes of dissolution of the γ' -phase in solid solution, and in the range up to 1100°C there is dissolution of γ' -particles having bimodal size distribution and coagulation process γ' -particles.

The study of thermal effects when heating the alloy CM88Y and alloys No. 1, No. 5 showed that the intense dissolution of the γ' -phase is carried out at $T = 1140^\circ\text{C}$ and complete dissolution of the γ' -phase in

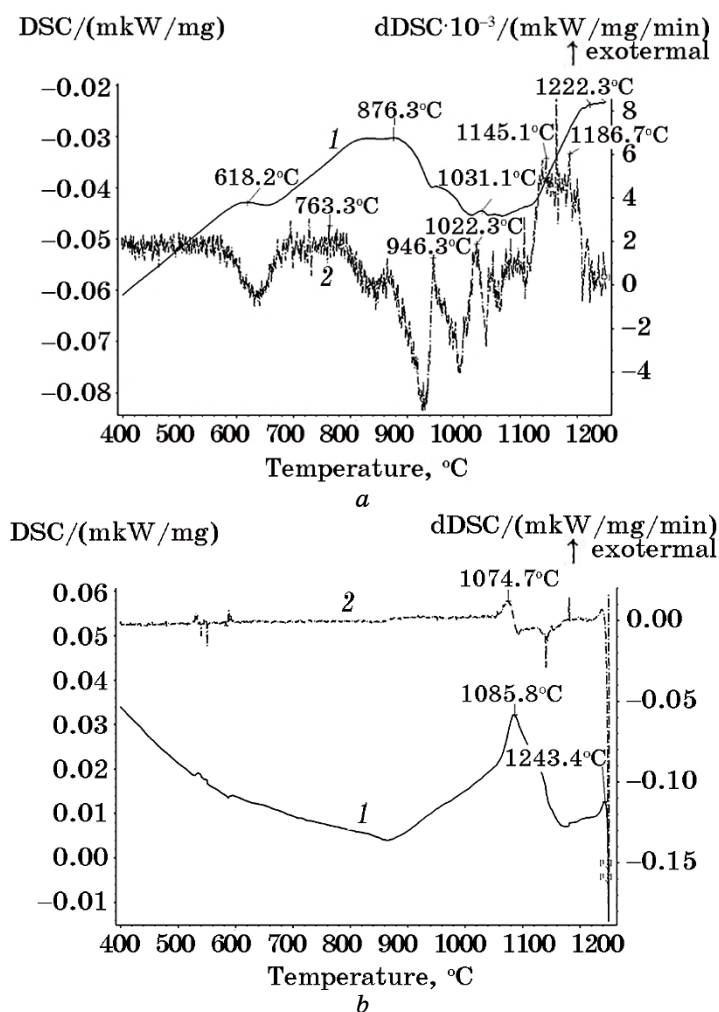


Fig. 5. Differential scanning calorimetry (DSC)—curves (1) and derivatives of them (2) experimental heat-resistant alloy (sample 1): heating (a), cooling (b).

solid solution occurs at $T = 1190^{\circ}\text{C}$, 1220°C and 1240°C , respectively. The maximum dissolution rate of the γ' -phase in solid solution for alloys CM88Y and No. 1, No. 5 corresponds to temperatures of 1165°C , 1165°C , 1164°C , respectively.

In the process of cooling the alloy samples from a temperature of 1250°C , an exothermic reaction is observed on the DSC curves, which indicates the beginning of the decay of the γ -solid solution with the formation of γ' -phase particles. The maximum of intense heat release during the decay of the γ -phase corresponds to alloys and temperatures of 1106°C , 1086°C , 1107°C , respectively. Also on the DSC curves,

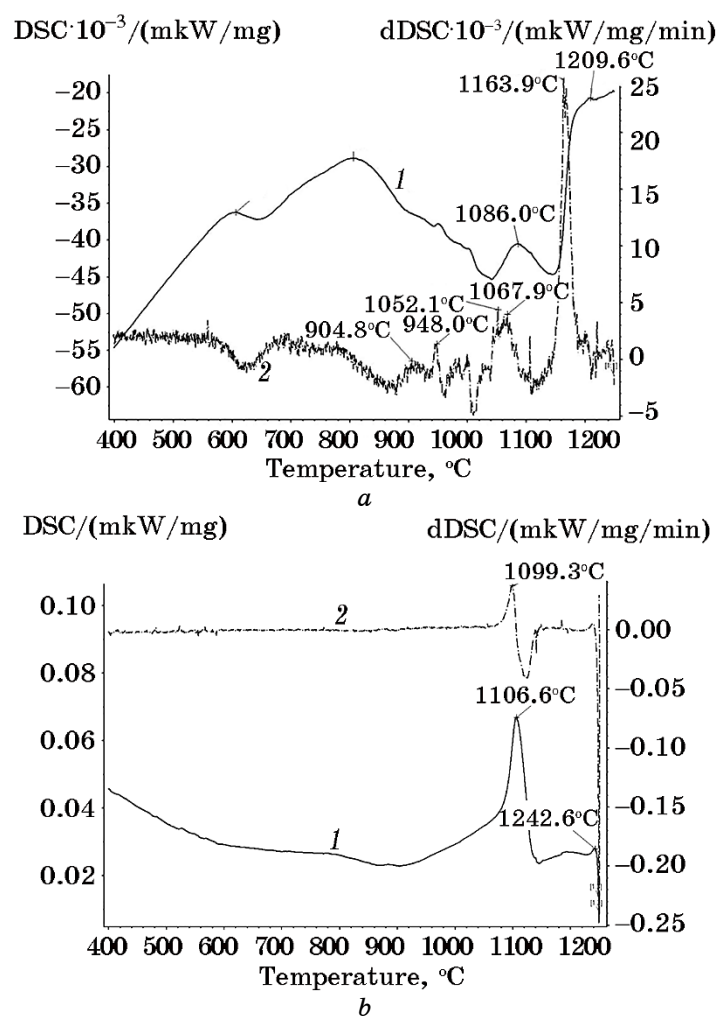


Fig. 6. Differential scanning calorimetry (DSC)—curves (1) and derivatives of them (2) experimental heat-resistant alloy (sample 5): heating (a), cooling (b).

there are small peaks that are associated with the release of carbides MeC and $Me_{23}C_6$. The temperature of the phase transitions in the alloys was determined from DSC curves and their derivatives—differential curves (dDSC) (Table 3).

3.3. Microstructure and Chemical Composition of the Phases of the Studied Samples of Heat-Resistant Alloys in the Annealed State

After heating to a temperature of 1250°C, the structure of the alloys

TABLE 3. Temperature of phase transitions of nickel-based heat-resistant alloys.

	Phase transformation temperature, °C	heat-resistant alloys		
		CM88Y	experimental	
			No. 1	No. 5
Heating	Strengthening atoms Cr on γ -phase	593	618	606
	Dissolution of $Me_{23}C_6$ carbides in an alloys	950	950	950
	preheated to 950°C	1040	1031	1086
	The beginning of intense dissolution γ' -phase	1140	1140	1150
	Maximum dissolution rate γ' -phase	1165	1165	1164
	Complete dissolution of the γ' -phase	1190	1224	1236
	Melting of nonequilibrium eutectic ($\gamma + \gamma'$)	1231	1243	1243
Cooling	Formation of $Me_{23}C_6$ carbides	1153	1180	1180
	The beginning of the formation of the γ' -phase	1140	1160	1150
	The maximum amount of γ' -phase formed during the decay of γ -solid solution	1106	1008	1106
	Carbide formation interval $Me_{23}C_6$	1050–900	1060–900	1060–900

has not changed. For the CM88Y alloy, it consists of a matrix ($\gamma + \gamma'$) component with carbides MeC based on Ti, Nb and carbides of the $Me(Cr, Fe, W, Mo)_{23}C_6$ (Fig. 7).

In samples of other alloys, carbides based on Ta are formed, and Re is not part of carbides (Figs. 8, 9).

In the analysis of the structures of the investigated samples after heating in the calorimeter to 1250°C, TCP-phases in the alloy containing rhenium and tantalum were not formed.

Doping of alloys with tantalum and rhenium, as well as reduction of chromium in them significantly increase the thermal stability of the γ' -phase. At the same time, $T_{c.d.}$ for γ' -phase increases by $\cong 50^\circ\text{C}$ to the value of 1220°C. In addition, the dissolution temperature of the nonequilibrium ($\gamma + \gamma'$) eutectic (T_{eut}) increases to 1245°C, due to the low partition coefficient ($K_{Re\gamma/\gamma'} = 0.1$) for Re in the γ -solid solution, and Ta— γ' -phase. As a result, the coagulation of the reinforcing particles of the γ' -phase proceeds slowly, respectively, and less intense is the weakening of the alloy.

In the structure of CM88Y there are carbides $Me_{23}C_6$ based on Cr, W and MeC based on Ti.

It can be seen in Figs. 7–9 that the alloys have a dendritic-cellular structure consisting of a γ -solid solution, a strengthening γ' -phase and carbides.

Thus, from the photo of the structure of alloys doped with rhenium and tantalum, it can be seen that carbide formations of different sizes

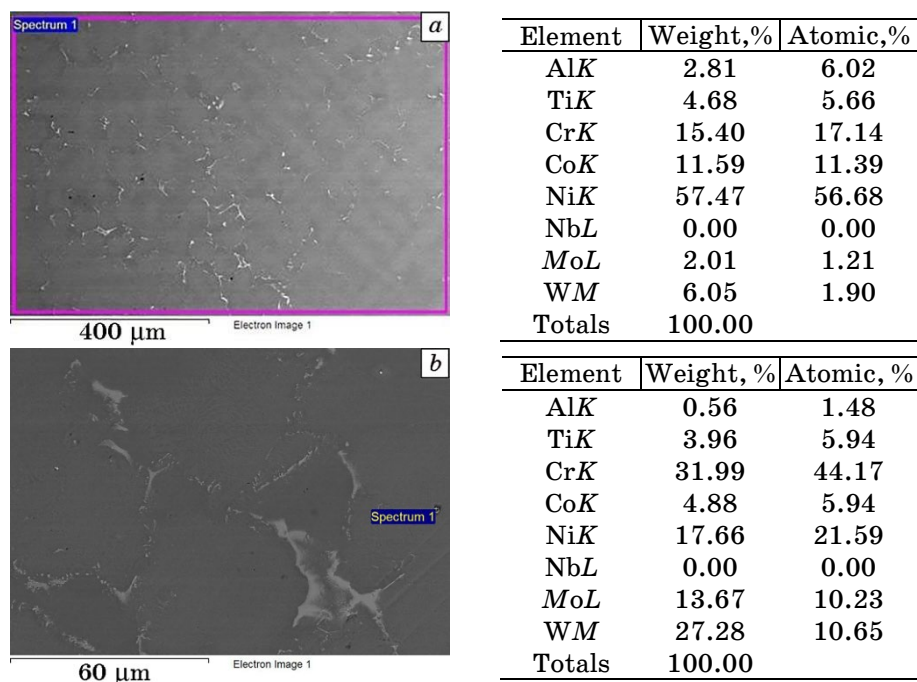


Fig. 7. Microstructure and chemical composition of heat-resistant alloy CM88Y phases after heating to temperature 1250°C: ($\gamma + \gamma'$)-phase + carbides (a), carbide $Me_{23}C_6$ (b).

and shapes are located at the boundaries of dendritic cells and in the axial space. Carbides are formed on the basis of a strong carbide-forming element—tantalum.

Refractory chemical elements of the alloy (W, Re) are located in the axes of the dendrites, and Ta, Al, Nb, Ti—enrich the cell boundaries. Rhenium is absent at the boundaries of the dendritic cell. It is mainly part of the γ -phase.

As a result of analysis of experimental data and literature sources [29–31] on temperatures and kinetics of phase transformations, the following mode of heat treatment of the experimental alloy was chosen: homogenization 1220°C, holding 4 hours, cooling with argon at a rate of 60–80°C/min; 1050°C, 6 hours, cooling in vacuum at a residual pressure of 0.133–0.00133 Pa; 870°C, 20 hours, cooling to room temperature in a dynamic vacuum for at least 80 minutes.

4. CONCLUSION

As a result of the conducted research, the temperatures of phase trans-

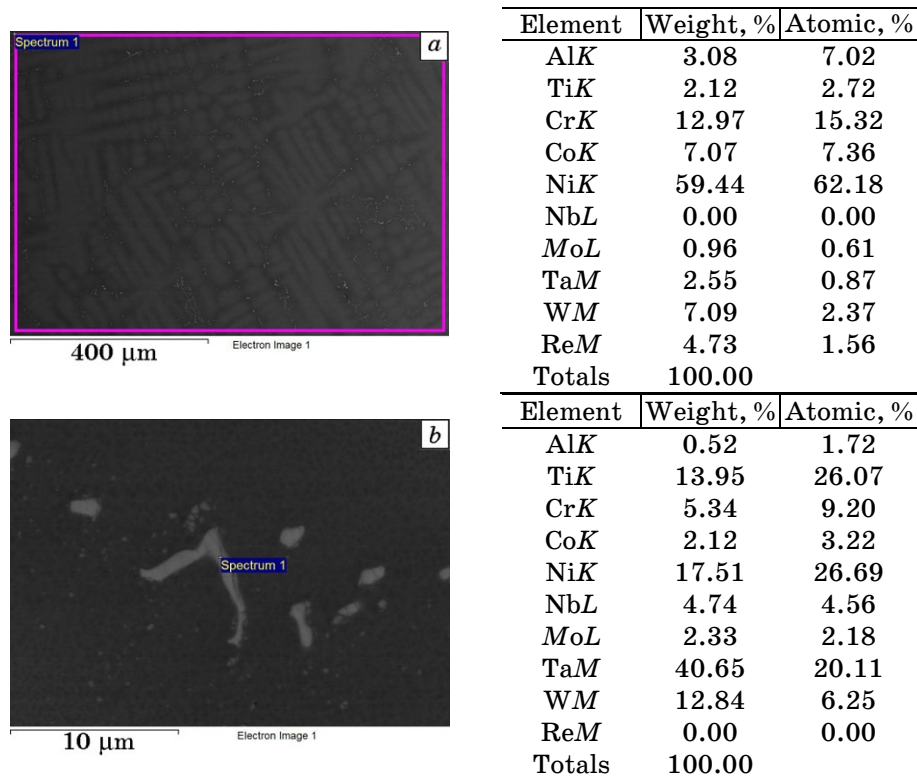


Fig. 8. Microstructure and chemical composition of experimental heat-resistant alloy phases (sample 1) after heating to temperature 1250°C: ($\gamma + \gamma'$)-phase + carbides (a), carbide $Me_{23}C_6$ (b).

formations were established: solidus, liquidus, beginning ($T_{b,\gamma'}$) and complete dissolution ($T_{c,d,\gamma'}$) of the γ' -phase in γ -solid solution, melting of nonequilibrium ($\gamma + \gamma'$) eutectic (T_{eut}) and dissolution of carbides. In the analysis of the structures of the studied samples after heating and cooling to 1250°C, the TCP phase was not observed.

Doping of alloys with rhenium and tantalum (the proposed alloy), as well as the reduction of chromium in them significantly increase the thermal stability of the γ' -phase: $T_{c,d,\gamma'}$ increases by $\cong 50^\circ\text{C}$ to 1220°C. At the same time, the melting temperature of the nonequilibrium ($\gamma + \gamma'$) eutectic (T_{eut}) increases to 1245°C.

Rhenium is mainly doping the γ -solid solution, and tantalum the γ' -phase. As a result, the coagulation of the reinforcing particles of the γ' -phase proceeds slowly, respectively, and the alloy is softened less intensively.

For a new heat-resistant Nickel alloy doped with Ta and Re, the homogenization temperature is of $\cong 1220^\circ\text{C}$, and the heat-treatment in-

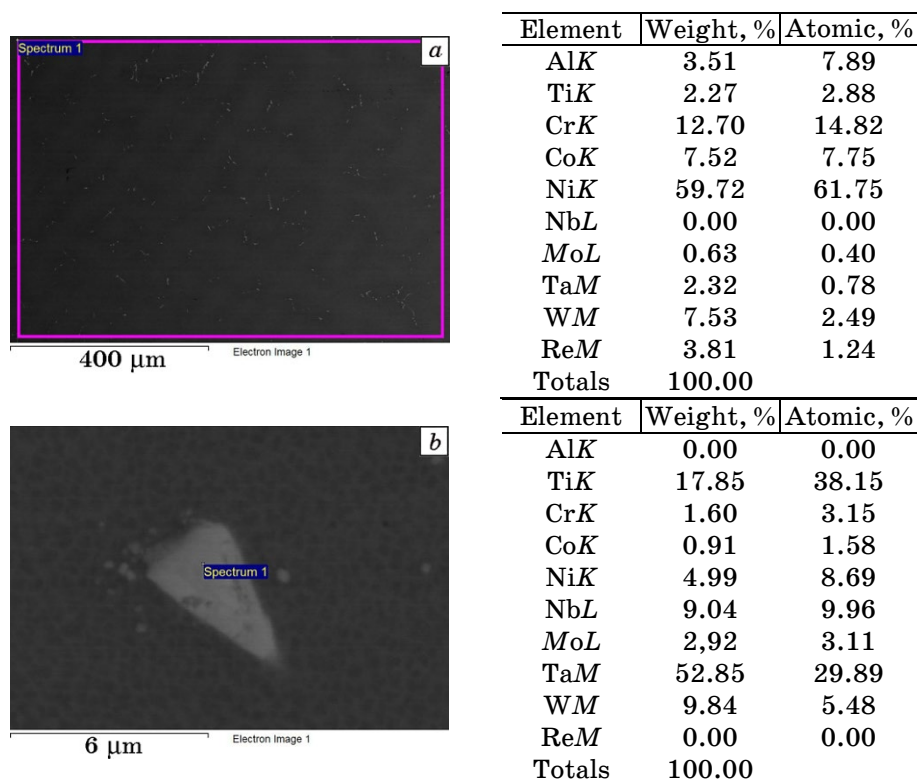


Fig. 9. Microstructure and chemical composition of experimental heat-resistant alloy phases (sample 5) after heating to temperature 1250°C: (γ + γ')-phase + carbides (a); carbide MeC (b).

terval ($\Delta T = T_{\text{eut}\gamma'} - T_{\text{c.d.}\gamma'}$) is of $\cong 15^\circ\text{C}$, respectively.

REFERENCES

1. B. Paton, A. Khalatov, D. Kostenko, B. Bileka, O. Pismenyi, A. Bocula, V. Parafiinyk and V. Koniakhin, *Visn.Nats.Acad. Nauk Ukr.*, **4**, No. 4: 3 (2008) (in Ukrainian).
2. Ch. T. Sims and W. C. Hagel, *Supersplavy* [Superalloys] (Moskva: Metallurgiya: 2004) (Russian translation).
3. A. I. Balitskii, Y. H. Kvasnitska, L. M. Ivaskevich, and H. P. Mialnitsa, *Arch. Mater. Sci. Eng.*, **91**, Iss. 1: 5 (2018).
4. K. Harris and J. B. Wahl, *Mater. Sci. Techn.*, **25**, Iss. 2: 147 (2009).
5. A. I. Balyts'kyi, Y. H. Kvasnyts'ka, L. M. Ivas'kevich, and H. P. Myal'nitsa, *Mater. Sci.*, **54**: 230 (2018).
6. J. B. Wahl and K. Harris, *Proc. of Symp. 'Superalloys 2016' (Sept.11–15, 2016)* (Seven Springs, Pensilvania: TMS: 2016), p.25.

7. A. A. Khalatov, K. A. Yushchenko, B. V. Isakov, Yu. Ya. Dashevskiy, and A. P. Shevtsov, *Visn. Nats. Acad. Nauk Ukr.*, **12**: 40 (2013) (in Ukrainian).
8. V. P. Kuznetsov, V. P. Lesnikov, I. P. Konakova, N. A. Popov, Y. G. Kvasnitskaya, *Met. Sci. Heat Treatm.*, **57**, Nos. 7–8: 503 (2015).
9. E. I. Tsvirko, P. D. Zhemanyuk, V. V. Klochikhin, V. V. Naumik, and V. V. Lunev, *Met. Sci. Heat Treatm.*, **43**: 382 (2001).
10. V. Tavrinn and E. Kolesnik, *Sist. Ozb. Vis. Tech.*, No. 1(61): 67 (2020) (in Ukrainian).
11. G. I. Morozova, O. B. Timofeeva, and N. V. Petrushin, *Met. Sci. Heat Treatm.*, **51**: 62 (2009).
12. H. Hino, Y. Yoshioka, and K. Nagata, *Proc. of Conf. 'High Temperature Materials for Power Engineering'* (1998) (Liege–Jülich: Forschungszentrum GmbH: 1998), p. 1129.
13. X. Wu, S. K. Makineni, C. H. Liebscher, G. Dehm, and J. R. Mianroodi, *Nat. Commun.*, **11**: 389 (2020).
14. E. N. Kablov and N. V. Petrushin, *Proc. of 11Int.Symp. 'Superalloys 2008' (Sept.14–18, 2008)* (Champion, Pensilvania: TMS: 2008), p. 901.
15. V. N. Toloraia, N. H. Orekhov, and E. N. Chuvarova, *Lit. Proizv.*, **6**, No. 6: 16 (2012) (in Russian).
16. J. Lapin, M. Gebura, T. Pelachova, and M. Nazmy, *Kovove Mater.*, **46**: 313 (2008).
17. A. V. Narivskii, I. I. Maksuta, Y. H. Kvasnitskaya, and E. V. Michnyan, *Electrometall. Today*, **4**: 37 (2017).
18. V. E. Ol'shanetskii, A. A. Glotka, and V. V. Klochikhin, *Funct. Mater.*, **28**, No. 2: 359 (2021).
19. V. P. Kuznetsov, V. P. Lesnykov, I. P. Konakova, and N. A. Popov, *Met. Sci. Heat Treatm.*, **52**: 449 (2011).
20. A. Sato, H. Harada, and C. Yen, *Proc. of 11Int. Symp. 'Superalloys 2008' (Sept. 14–18, 2008)* (Champion, Pensilvania: TMS: 2008), p. 131.
21. M. M. Cueto-Rodriguez, E. O. Avila-Davila, V. M. Lopez-Hirata, M. L. Saucedo-Mucoz, L. M. Palacios-Pineda, L. G. Trapaga-Martinez, and J. M. Alvarado-Orozco, *Adv. Mater. Sci. Eng.*, **2018**: 16 (2018).
22. A. Glotka and V. Olshanetskii, *Acta Metallurgica Slovaca*, **27**, No. 2: 68 (2021).
23. S. T. Kishkin, *Sozdanie, Issledovanie i Primenenie Zharoprochnykh Splavov: Izbrannye Trudy (k 100-Letiyu so Dnia Rozhdeniya)* [Creation, Research and Application of Heat-Resistant Alloys: Selected Works (to the 100th Anniversary of Birth)] (Moskva: Nauka: 2006) (in Russian).
24. V. Kvasnytskyi, V. Korzhyk, V. Kvasnytskyi, H. Mialnitsa, Chunlin Dong, T. Pryadko, M. Matviienko, and Y. Buturlia, *East-Eur. J. Enterp. Technol.*, **6**, No. 12: 6 (2020).
25. V. P. Kuznetsov, V. P. Lesnikov, M. S. Khadyev, I. P. Konakova, and N. A. Popov, *Met. Sci. Heat Treatm. Ment.*, **54**, Nos. 1–2: 90 (2012).
26. D. Ma, M. Meyer Ter Vehn, P. Busse, and P. R. Sahm, *Proc. of Symp. 'Advanced Materials and Processes'. J. Phys. IV France*, **3**: 339 (1993).
27. E. V. Monastyrskaia, H. I. Morozova, and Yu. B. Vlasov, *Met. Sci. Heat. Treat.*, **48**: 368 (2006).
28. Yu. H. Kvasnytska, O. V. Kliass, V. A. Kreshchenko, H. P. Mialnitsa, and O. Yo. Shynskiy, *Zharomitsnyy Koroziynostiyykyy Splav na Nikeleviy Osnovi dlya Lopatok Hazoturbinnnykh Dvyhuniv* [Heat-Resistant Corrosion-Resistant

- Nickel-Based Alloy for Gas Turbine Engine Blades]: Patent 110529 UA. MPK C22C 19/05, 19/03, 19/00 (Bul., 1) (2016) (in Ukrainian).
29. Y. H. Kvasnytska, L. M. Ivaskevych, O. I. Balytskyi, I. I. Maksyuta, and H. P. Myalnitsa, *Mater. Sci.*, **56**: 432 (2020).
 30. E. N. Kablov, *Lityye Lopatki Hazoturbinykh Dvigateley (Splavy, Tekhnologii, Pokrytiya)* [Cast Blades of Gas Turbine Engines (Alloys, Technology, Coatings)] (Moskva: MISiS: 2001) (in Russian).
 31. O. I. Balitskii, Yu. H. Kvasnytska, L. M. Ivaskevych, H. P. Mialnitsa, and K. H. Kvasnytska, *Mater. Sci.*, **57**: 475 (2022).

PACS numbers: 06.60.Vz, 46.55.+d, 68.37.Hk, 81.15.-z, 81.20.Wk, 81.40.Pq, 81.65.Lp

Механічне оброблення титанових стопів твердостопним різальним інструментом з вакуумно-дуговими нітридними покриттями на основі вольфраму

I. V. Serdiuk*, V. O. Stolbovyy*, V. Bushlya**, R. V. Kryvoschapka*,
R  mi L  mar**, R  men Walter**

* *Національний науковий центр «Харківський фізико-технічний інститут»
НАН України,
вул. Академічна, 1,
61108 Харків, Україна*

** *Лундський університет, факультет машинобудування,
вул. Оле Ремера, 1,
22100 Лунд, Швеція*

Пошук відповідних покриттів для різальних інструментів має важливе значення для підвищення зносостійкості інструменту та таким чином одержання ліпшої шерсткості поверхні оброблених заготовок і підвищення продуктивності. Вимоги до покриття полягають не тільки в його механічних і міцнісних властивостях, а й у його реагуванні на навантаження під час механічного оброблення та на певний вплив зношування. Для розширення уявлень про явища та механізми зношування вакуумно-дугових покриттів на основі вольфраму на різальному інструменті з карбиду Вольфраму під час механічного оброблення титанового стопу Ti–6Al–

Corresponding author: Iryna Vitaliivna Serdiuk
E-mail: iraserduk@kipt.kharkov.ua

* *National Science Center «Kharkiv Institute of Physics and Technology», N.A.S. of Ukraine,
1 Akademichna Str., UA-61108 Kharkiv, Ukraine*

** *Department of Mechanical Engineering Sciences, Lund University,
1 Ole R  mers v  g., 22100 Lund, Sweden*

Citation: I. V. Serdiuk, V. O. Stolbovyy, V. Bushlya, R. V. Kryvoschapka, R  mi L  maire, and Romain Walter, Machining of Titanium Alloys with a Cemented Carbide Cutting Tools with Tungsten-Based Vacuum-Arc Nitride Coatings, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, 45, No. 8: 993–1014 (2023). DOI: [10.15407/mfint.45.08.993](https://doi.org/10.15407/mfint.45.08.993)

4V були одержані, досліджені та пройшли випробування на токарному верстаті SMT 500 Swedturn з використанням 8% -масляноводяної емульсії за тиску у 10 бар вакуумно-дугові покриття W-N, W-Zr-N, W-Nb-N, W-Cr-N, W-Mo-N, W-TiSi-N, W-TiAlYCr-N. Було встановлено декілька основних механізмів зношування та їхній вплив на геометрію вакуумно-дугових покриттів, а також чинники, що впливають на підвищення експлуатаційних властивостей інструменту.

Ключові слова: вакуумно-дугові покриття, різальний інструмент на основі карбіду Вольфраму, механізми зношування, оброблення титанових стопів, зносостійкість.

Finding the right coatings for cutting tools is essential in order to increase the tool wear resistance and, thus, to get better surface roughness for the machined workpieces, and to improve productivity. A coating requirements are not only its mechanical and strength properties, but also its response to a given load and a given wear exposure. To expand ideas about the phenomena and mechanisms of wear of tungsten-based vacuum-arc coatings on the cemented carbides-based cutting tools during mechanical processing of titanium alloy Ti-6Al-4V, vacuum-arc W-N, W-Zr-N, W-Nb-N, W-Cr-N, W-Mo-N, W-TiSi-N, W-TiAlYCr-N coatings are obtained, investigated and tested on the CNC turning machine SMT 500 Swedturn with use of 8%-oil-water emulsion under pressure of 10 bars. Several main wear mechanisms and their influence on the geometry of vacuum-arc coatings are established, and factors influencing on the improvement of the operational properties of the tool are investigated.

Key words: vacuum-arc coatings, cemented carbides-based cutting tools, wear mechanisms, machining of titanium alloys, wear resistance.

Отримано 8 серпня 2023 р.; остаточн. варіант — 20 серпня 2023 р.

1. ВСТУП

Створення й удосконалення нових матеріалів і стопів, що використовуються у складних або екстремальних умовах, ставлять нові завдання для розробки зносостійких, термостабільних, довговічних інструментів для їхнього механічного оброблення. Одним з прикладів таких тяжкооброблюваних матеріалів є титан і його стопи. Завдяки своїм хемічним і фізичним властивостям вони використовуються не тільки у якості технічних компонентів аерокосмічної техніки (диски та лопатки компресора, деталі повітрозбірника, корпусні та кріпильні деталі тощо) [1, 2], але й для виготовлення імплантів і протезів у медицині [3–6]. Крім того, титан і його стопи знайшли широке застосування у металургії, війсьній і хемічній промисловостях, судноплавстві, у електро- та радіотехніці [7, 8]. Основними перевагами титану та його стопів є невелика густина ($\cong 4,5 \text{ г/см}^3$), висока корозійна стійкість (вища, ніж у мідних стопів, у морській

воді та інших агресивних середовищах); вони не схильні до ламкості та зберігають механічні властивості навіть за дуже низьких температур [9, 10]. Деякі стопи титану мають хороші жароміцні властивості. Висока корозійна стійкість титану та його стопів, особливо до біологічних рідин, якими є кров і лімфа, зумовили високі біоінертні властивості та біосумісність цих матеріалів. Під час знаходження в організмі людини на поверхні титану протягом мілісекунд формується інертна оксидна плівка (на основі TiO_2) завтовшки у 10–100 Å, яка служить бар'єром для подальшої взаємодії з тканиною та чинить опір механічній, хемічній та електрохемічній деградації [11]. Тому титан і його стопи використовуються для виготовлення імплантів, надкісткових фіксаторів, дзеркал, ранорозширювачів, цвяхів для остеосинтези, а також інструментів для різних областей хірургічної медицини [12–14].

Всі ці переваги зумовлюють широке застосування титану та його стопів, але одним з його головних недоліків є погана механічна оброблюваність, зокрема різанням [15], що сповільнює впровадження титану та його стопів у інші сфери життєдіяльності.

Складність механічного оброблення титану та його стопів пов'язана зі схильністю до контактного схоплювання через їхню хемічну/кристалічну спорідненість з більшістю матеріалів для інструменту за високих температур. Це посилюється низькою теплопровідністю титану, що призводить до дуже високих температур у зоні різання та дуже великих градієнтів температури всередині інструменту. Коли ці характеристики поєднуються з високою твердістю та міцністю інструменту за високої температури, продуктивність механічного оброблення титану дуже знижується.

На даний час у вирішенні проблеми оброблюваності титану та його стопів можна виділити два основні підходи в залежності від методів механічного оброблення — абразивні методи та різання. Так, проблему незадовільної оброблюваності титану абразивними методами під час виготовлення сферичних головок ендопротезів кульшового суглоба вирішують застосуванням спеціальних інструментів на основі абразивних композитів, що містять в якості активного компонента синтетичні діаманти [16]. Застосування спеціальної полірувальної пасти уможливило одержати шерсткість обробленої поверхні на рівні 0,04 мкм і забезпечити відсутність шаржування діамантами.

Що стосується складності механічного оброблення титану та його стопів різанням, то ця задача переважно вирішується завдяки удосконаленню різального інструменту шляхом нанесення захисних покриттів, що забезпечують зменшення контактного схоплювання між заготовкою з титану й інструментом. Різноманітність наявних вакуумно-дугових покриттів для різального інструменту дає великі можливості для досліджень [17–21]. Розвиток захисних

покриттів на різальному інструменті від однокомпонентних до багаточастинкових покриттів і покриттів на основі високоентропійних сплавів приводить до підвищення їхніх фізико-механічних властивостей, зносо- та термостійкості, що, в свою чергу, збільшує надійність і ресурс роботи інструменту. Таким чином, розробка та дослідження нових захисних вакуумно-дугових покриттів для різального інструменту залишається досі актуальним і перспективним завданням.

2. МАТЕРІАЛИ ТА МЕТОДИКИ ОДЕРЖАННЯ І ДОСЛІДЖЕННЯ ВАКУУМНО-ДУГОВИХ ПОКРИТТІВ

Широко відомі та добре вивчені вакуумно-дугові нітридні покриття на основі металів IV–VI груп таблиці Менделєєва Ti, Zr, Cr, Mo, Nb та інші мають високі фізико-механічні характеристики у різних умовах застосування [22, 23]. Але одним із слабких місць однокомпонентних покриттів є неможливість використання під час різання сплавів, що важко обробляються (наприклад, титанових або нікелевих). Складність застосування таких покриттів полягає в обмежених теплофізичних можливостях, а також у створенні в процесі оброблення сплавів сполук покриття з матеріалом, що обробляється. У той же час використання Вольфраму в якості добавки в такі покриття дало б змогу істотно збільшити зносостійкість інструменту, підвищити термостійкість і понизити рівень взаємодії покриття з оброблюваним матеріалом через низьку хімічну активність. Але однією із складностей застосування вольфраму є висока температура топлення ($\approx 3420^\circ\text{C}$ [24]).

В даний час у літературі зустрічається мало відомостей (експериментальних даних) про вплив добавки Вольфраму у вакуумно-дугові покриття. Тому вивчення цього питання є актуальним і йому присвячено дану статтю.

Вакуумно-дугові нітридні покриття на основі окремих металів Me_1-Me_2-N ($Me_1 = W$, $Me_2 = Zr, Cr, Mo, Nb$), а також багатокомпонентні покриття на основі сплавів $Me_1-Me_{\text{сплав}}-N$ ($Me_1 = W$, $Me_{\text{сплав}} = TiSi, TiAlYCr$) були нанесені в модифікованій установці "БУЛАТ-6", схему якої представлено на рис. 1.

В якості випарників використовувалися катоди з чистих металів вакуумної топки — вольфрам (ВЧ без присадок), цирконій (Е100), хром (Х99Н1), молибден (МЧВП), ніобій (Н61), а також двокомпонентний сплав TiSi та чотирикомпонентний сплав TiAlYCr. Катоди з чистих металів виготовлялися із прутків діаметром у 60 мм.

В якості підкладинок використовували поліровані зразки з неіржавійної сталі 12Х18Н9Т різних розмірів для визначення фізико-механічних і трибологічних властивостей покриттів (рис. 2, а) та зразки різального інструменту з карбіду Вольфраму у кобальтовій

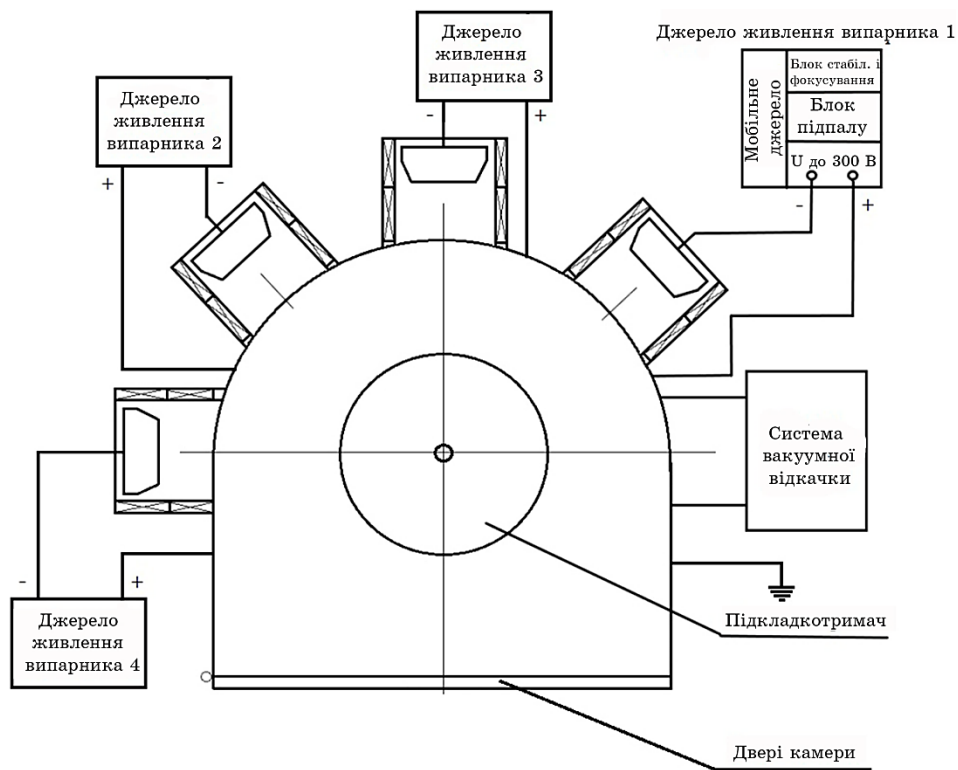


Рис. 1. Схематичне зображення вакуумно-дугової установки (вид зверху).

Fig. 1. Schematic image of a vacuum-arc installation (top view).

матриці WC–Co із добавками TiC/TaC/NbC для підвищення зносостійкості та збільшення гарячої твердості (рис. 2, б).

Зразки попередньо промивали лужним розчином в ультразвуковій ванні, а потім нефрасом C2-80/120. Зразки розташовували по колу на металевому підкладинко-тримачі у вигляді диска діаметром у 280 мм, що знаходився на одному горизонтальному рівні з випарниками. Самі випарники розташовано під кутом 90° один до одного.

Перед нанесенням вакуумно-дугового покриття вакуумну камеру зі зразками відкачували до тиску $P = 1,3 \cdot 10^{-3}$ Па, після чого проводили йонну очистку й активацію поверхні зразків бомбардуванням йонами металів за постійної напруги на підкладинці –1100 В. Процес очищення та нагрівання зразків тривав 10–15 хвилин, після чого наносився підшар чистого металу або стопу для поліпшення адгезійних властивостей покриття.

Нанесення нітридних вакуумно-дугових покриттів на зразки виконувалося протягом 1 години за тиску азоту у вакуумній камері у

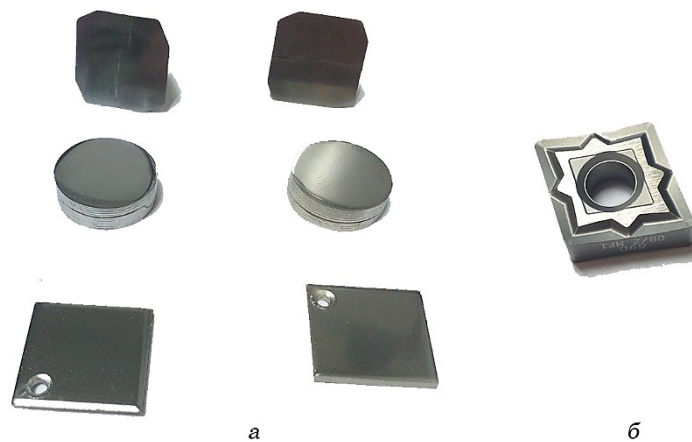


Рис. 2. Фотографії зразків з неіржавійної криці (*а*) та різального інструменту (*б*).

Fig. 2. Photographs of stainless steel samples (*a*) and the cutting tool (*b*).

0,73 Па, постійної негативної напруги на підкладинці -150 В і постійного обертання підкладинко-тримача зі швидкістю у 12 об/хв. Струм дуги вольфрамового випарника з магнетним утриманням катодної плями без фокусування плазмового потоку складав 200 А, який забезпечувався зовнішнім мобільним потужним джерелом живлення випарника. Для ефективного використання матеріалу катоди та збільшення вмісту Вольфраму у вакуумно-дуговому покритті було застосовано конструктивне рішення виключення котушки випарника, що фокусує плазмовий потік. Це уможливило зменшити віддаль між випарником (вольфрам) і зразками до 360 мм. Струм дуги інших випарників з фокусуванням плазмового потоку магнетним полем $H_{\phi} = 5$ мТл становив 80–110 А. Віддаль від випарників (Zr, Cr, Mo, Nb, TiSi, TiAlYCr) до осі повороту підкладинко-тримача складала 600 мм. Для усунення впливу й уникнення утворення оксидних сполук з Вольфрамом на поверхні вакуумно-дугового покриття, що виникають в атмосферних умовах після вилучення зразків з вакуумного середовища, протягом останніх 5 хвилин процесу нанесення вакуумно-дугового покриття було здійснено утворення нітридного покриття на основі іншого металу Me_2 (Zr, Cr, Mo, Nb) або стопу $Me_{\text{стоп}}$ ($Me_{\text{стоп}} = \text{TiSi, TiAlYCr}$). Орієнтовна товщина останнього захисного шару складає від 210 нм до 420 нм в залежності від матеріалу, що осаджується.

Дослідження фізико-механічних характеристик покриттів на зразках з неіржавійної криці проводили методом індентування з використанням мікротвердоміра ПМТ-3.

Випробування різального інструменту з вакуумно-дуговими пок-

риттями проводили на токарному верстаті з числовим програмним управлінням (ЧПУ; CNC turning machine) SMT 500 Swedturn з використанням 8%-масляноводяної емульсії в якості охолоджувача за тиску у 10 бар. В якості заготовки, що оброблювалася, використовували титановий стоп Ti-6Al-4V (Ti64), який є одним з найбільш поширених титанових стопів у різних галузях: від аерокосмічної техніки (корпусні та кріпильні деталі, диски та лопатки компресора та ін.) до біоінженерії (імпланти та протези).

Параметри різання значною мірою впливатимуть на температурні умови та тиск на поверхні інструменту. Зазвичай, чим вище швидкість різання v_c або довжина різання l , тим більше навантаження на поверхню інструменту та покриття і тим вище температура та тиск [25]. Такі умови можуть вплинути на швидкість зношування інструменту та його інтенсивність. Для того, щоб мати змогу порівнювати знос різального інструменту з різними вакуумно-дуговими покриттями випробування на токарному станку з комп'ютерним керуванням (CNC turning machine) проводили з фіксованими параметрами оброблення заготовки (рис. 3, а–б): швидкість різання $v_c = 120$ м/хв.; навантаження (подача) $f = 0,15$ мм/об; глибина різання $a_p = 0,8$ мм; довжина оброблення $l = 40$ м.

Інші параметри оброблення, що відносяться до процесу точіння, були розраховані з використанням діаметра заготовки: діаметр $d = 80,8$ мм; осьове зміщення $z = 23,2$ мм; швидкість обертання $\omega = 473$ об/хв.; тривалість механічного оброблення $t = 20$ с.

Через обмежену довжину заготовки, що унеможливило провести всі випробування на одному діаметрі, було виконано багаторазові

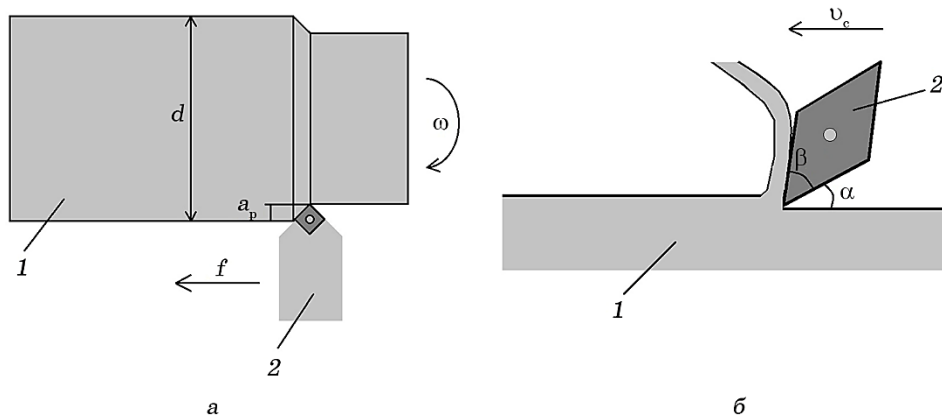


Рис. 3. Параметри механічного оброблення заготовки з титану: 1 — заготовка з титану; 2 — різальний інструмент.

Fig. 3. Parameters of mechanical processing of a titanium workpiece: 1—titanium workpiece, 2—cutting tool.

проходи. Через це випробування останніх різальних інструментів з вакуумно-дуговими покриттями були проведені на діаметрі у 79,2 мм зі швидкістю обертання у 482 об/хв. для утримання інших параметрів оброблення на фіксованому рівні.

Дослідження механізмів зношування та стану вакуумно-дугових покриттів на різальному інструменті після випробування на токарному верстаті проводили за допомогою оптичної та сканувальної електронної мікроскопії.

Різальні кромки інструментів з вакуумно-дуговими покриттями, що пройшли випробування, були сфотографовані за допомогою оптичного мікроскопу Olympus SZX7, який був обладнаний камерою та програмним забезпеченням для створення точних зображень інструменту. Фотознімки різальних кромок були зроблені під різними кутами: безпосередньо зверху та збоку (зі сторони заготовки), що уможлиблює побачити та виміряти довжину зносу сторони rake (що загрибає) та флангового боку. Деякі фотографії було зроблено під кутом у 45° для більш об'ємного й інформативного вигляду.

Для подальшого дослідження характеристик і створення поперечного перерізу покриття були зроблені зразки. Для цього різальний інструмент з вакуумно-дуговими покриттями проходив декілька стадій підготовки, що включали в себе розрізання навпіл інструменту (близько до різальної кромки), шліфування залишкового надлишку матеріалу, вирізання потрібної ділянки інструменту з його половинки та лиття в пластичну смолу, полірування поверхні зразків для досліджень.

Електронно-мікроскопічні дослідження одержаних зразків проводилися за допомогою сканувального електронного мікроскопа Tescan Mira3 з роздільною здатністю близько 1 нм.

Для проведення XEDS (X-Ray Energy Dispersive Spectroscopy) аналізу використовувався енергодисперсійний спектрометр Oxford X-MaxN 80 (124 eV, 80 мм²) з програмним забезпеченням AztecLive в якості приставки до електронного мікроскопа.

3. РЕЗУЛЬТАТИ ТА ЇХ ОБГОВОРЕННЯ

Фізико-механічні властивості одержаних вакуумно-дугових покриттів представлено в табл. 1. Мікротвердість H досліджуваних покриттів лежить у діапазоні від 23,6 ГПа (для вакуумно-дугового покриття W–TiSi–N) до 34,1 ГПа (для вакуумно-дугового покриття W–Zr–N). Такі параметри, як хемічний склад покриття, технологічні параметри одержання вакуумно-дугового покриття, склад основи інструменту та заготовки, тип і параметри механічного оброблення заготовки, у поєднанні роблять поведінку зношування покриттів важко передбачуваною, і переважне явище зношування від інструменту до інструменту змінюється.

ТАБЛИЦЯ 1. Фізико-механічні властивості вакуумно-дугових покриттів різного хемічного складу.**TABLE 1.** Physical and mechanical properties of vacuum-arc coatings of different chemical composition.

№	№ зразка	Склад покриття	H , ГПа	Товщина покриття, мкм
1	1283	W-N	$32,1 \pm 0,6$	1,9
2	1288	W-Zr-N	$34,1 \pm 0,7$	5
3	1289	W-TiSi-N	$23,6 \pm 0,5$	4,2
4	1292	W-TiAlYCr-N	$28,1 \pm 0,6$	4,8
5	1293	W-Nb-N	$32,3 \pm 0,7$	2,6
6	1294	W-Cr-N	$30,2 \pm 0,6$	3,8
7	1295	W-Mo-N	$31,5 \pm 0,7$	4,7

Розміри штифтів у режимі S: ^c $d = 4,9$ мм, $l = 14,9$ мм, $m = 2,203$ г; ^d $d = 5,2$ мм, $l = 15,0$ мм, $m = 2,632$ г.

Pins' dimensions in mode S: ^c $d = 4.9$ mm, $l = 14.9$ mm, $m = 2.203$ g; ^d $d = 5.2$ mm, $l = 15.0$ mm, $m = 2.632$ g.

Відповідно до [26], розрізняють п'ять основних механізмів деградації, які можуть пояснити відмінності в поведінці та інші спостережувані явища зношування:

абразивне зношування — механічне зношування, котре загалом викликане твердими частинками в матеріалі заготовки; воно дуже схоже на шліфування, та здатність інструменту чинити йому опір сильно залежить від твердості матеріалу інструменту;

дифузійне зношування — хемічний механізм зношування, який послаблює інструмент шляхом обміну певними елементами із заготовкою або стружкою; цей механізм значно залежить від температури та спорідненості між матеріалами інструменту та заготовки;

окиснення, — хемічні реакції, що послаблюють інструмент, — спостерігається лише у зонах, де повітря має змогу дістатися поверхні інструменту, і посилюється за рахунок високої температури;

втомне зношування — механічне явище, що переважно зустрічається під час переривчастого різання та коли сила навантаження на різальний інструмент є дуже великою; викликається повторюваними циклами термічних і механічних навантажень;

адгезійне зношування — механічне послаблення інструменту, що переважно зустрічається за низької температури; враховуючи напругу та високий тиск між деталю та інструментом, частина матеріалу деталю може зварюватися з інструментом, а це невелике скупчення речовини потім поступово відсікається потоком стружки та видаляється через відшарування матеріалу; велика спорідненість між матеріалами заготовки й інструменту може сприяти такому

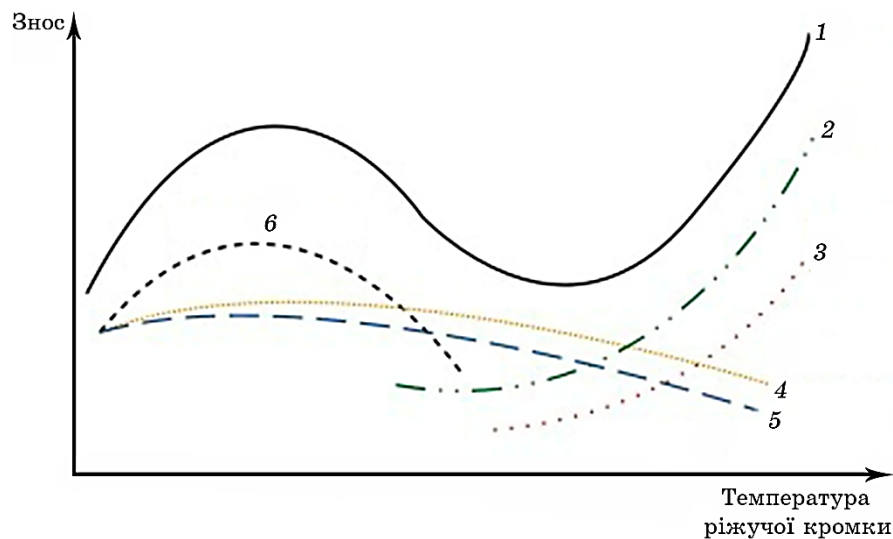


Рис. 4. Діаграма залежності механізмів зношування від температури різальної кромки [27]: 1 — загальний знос, 2 — дифузійний знос, 3 — хімічний знос, 4 — ерозійний знос, 5 — адгезійний знос, 6 — абразивний знос.

Fig. 4. Wear-temperature relationship diagram adapted from [27]: 1—total wear, 2—diffusion wear, 3—chemical wear, 4—erosive wear, 5—adhesive wear, 6—abrasive wear.

механізму.

Вплив деяких з цих механізмів на зношування інструменту з вакуумно-дуговими покриттями буде переважальним за різних температурних умов (рис. 4).

Механічні випробування різального інструменту з вакуумно-дуговими покриттями, зазначеними у табл. 1, за оброблення титанового ступу Ti-6Al-4V (Ti64) виявили наступні типи зносу, що можуть бути розділені в залежності від масштабу.

З огляду на розміщення інструменту на токарному верстаті ділянка пошкодження завжди розташована на різальній кромці; вона включає сторони бокової грані та вістря передньої грані [26], як видно на рис. 5, а. У цих зонах температура та навантаження найвищі; тому відбувається переважальне зношування. Деградація може призвести до змін у геометрії інструменту, вплинути на потік стружки та погіршити шерсткість заготовки з титанового ступу.

Явища макроскопічного зношування.

1) *Кратерне зношування*; цей тип зносу відбувається виключно на передній грані інструменту, де спостерігається потік стружки. Він залишає значний проміжок між наконечником інструменту та недоторканим покриттям, і в більшості випадків він також може

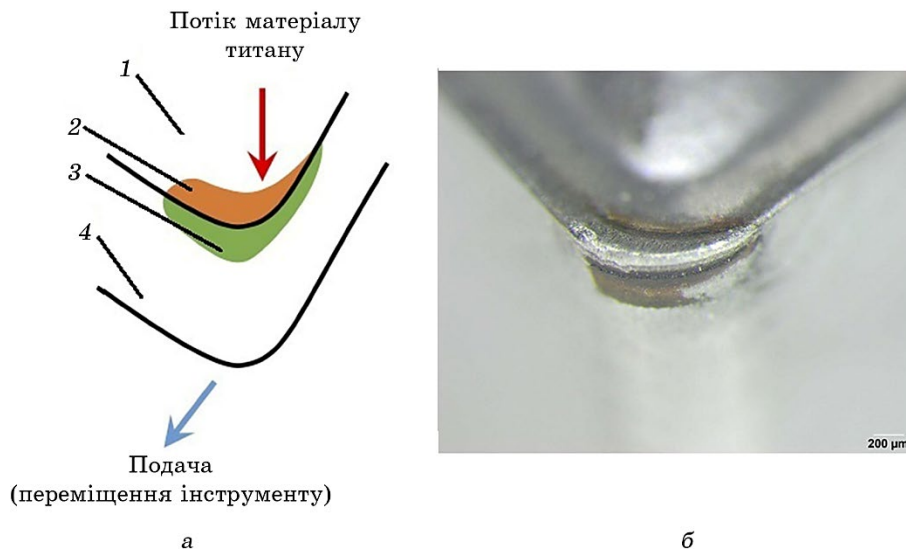


Рис. 5. Зона переважального зношування інструменту: схематичне зображення (а): 1 — передня грань, 2 — зона зношування передньої грані; 3 — зона зношування бічної грані; 4 — бічна грань; фото інструменту з W–Cr–N покриттям (кут обзору — 45°) (б).

Fig. 5. Preferential wearing areas: schematic image (a): 1—rake face, 2—rake wear, 3—flank wear, 4—flank face; tool with W–Cr–N coating (45° observation) (б).

досягати підкладинки з карбіду Вольфраму (рис. 6). Задіяні механізми зношування є абразивними та дифузійними; високі температури сприяють дифузійному зношуванню, тоді як тверді частинки, що рухаються потоком стружки, шліфують покриття. Загальна прогресія зношування може бути сумішшю між цими двома механізмами зношування.

Коли з'являється кратерне зношування, площа контакту між інструментом і деталлю збільшується в розмірах і, таким чином, сприяє більшому навантаженню; кут клину β (рис. 3) також зменшується, що впливає на міцність і теплопередачу різальної кромки, а також на утворення стружки.

Залежно від того, який матеріал піддається впливу потоку стружки, будь то покриття чи підкладинка інструменту, кратерне зношування буде відбуватися по-різному.

2) *Зношування бічної грані* — зношування флангової сторони різальної кромки інструменту. Бічний знос з'являється на боковій поверхні інструменту, залишаючи прогалини в покритті (рис. 7). Це в основному відбувається за рахунок абразивного зношування через потік матеріалу заготовки з цього боку. Занадто велика шви-

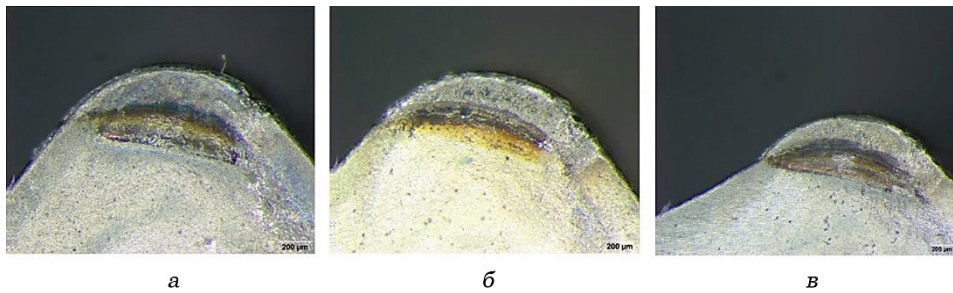


Рис. 6. Знімки кратерного зношування інструменту з вакуумно-дуговими покриттями W-N (а), W-Zr-N (б), W-Nb-N (в).

Fig. 6. Rake wear of cutting tools with vacuum-arc coatings W-N (a), W-Zr-N (б), W-Nb-N (в).

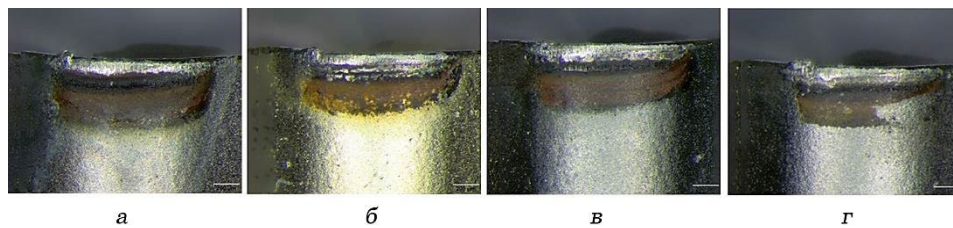


Рис. 7. Знімки зносу бічної грані інструменту з вакуумно-дуговими покриттями W-N (а), W-Zr-N (б), W-Nb-N (в), W-Cr-N (г).

Fig. 7. Flank wear of cutting tools with vacuum-arc coatings W-N (a), W-Zr-N (б), W-Nb-N (в), W-Cr-N (г).

дкість різання або недостатня зносостійкість сприяють такому виду зношування.

Зміна геометрії поверхні флангової сторони різальної кромки інструменту впливає на кут зазору α (рис. 3). Його зменшення приводить до збільшення сил зсуву та нормальних сил; отже, ці умови підвищують температуру у зоні різання через тертя. Зношування триває, доки кут зазору не досягне значення $\alpha = 0^\circ$; у цей момент можуть виникнути серйозні пошкодження інструменту на тримачі інструменту або на заготовці через вигинання їх або погіршення текстури поверхні.

3) *Нарощена кромка*; матеріал заготовки налипає на різальну кромку та зварюється на холодно з інструментом (переважно виникає за повільної швидкості різання, оскільки інші явища перешкоджають їхньому накопиченню за більш високих швидкостей).

Завдяки плину матеріалу, як по передній, так і по бічній поверхнях інструменту (стружки та заготовки відповідно), деяка кількість титанового стопу може прилипнути до різальної кромки інструмен-

ту й утворити невеликі ділянки, які називаються нарощеними кромками. Титановий стоп, що обробляється, може приварюватися на інструменті через високий тиск і спорідненість між матеріалами заготовки та вакуумно-дугового покриття.

Є два основні небажані наслідки такого зношування. По-перше, погіршується геометрія інструменту та скорочується термін служби інструменту; по-друге, така агрегація речовини може погіршити текстуру поверхні заготовки [26]. Однак створення нарощеної кромки мало також інший вплив. У деяких випадках вона захищала поверхню інструменту, особливо передню грань від кратерного зношування [25].

Під час дослідження різальних інструментів з вакуумно-дуговими покриттями, зазначеними в табл. 1, не спостерігалася наявність таких нарощених кромок. Це може бути пов'язано з обраною швидкістю різання, а також з хемічним складом вакуумно-дугових покриттів, що впливає на хемічну спорідненість.

Більшість попередніх типів зносу спостерігалися під мікроскопом, не розрізаючи інструмент навпіл. Але тепер ми глибше зосередимося на зношуванні, яке відбувається в мікроскопічному масштабі, в межах товщини покриття. Для цього кожен інструмент пройшов підготовку зразків (процеси різання, шліфування та полірування) для ліпшої аналізи зносу в мікроскопічному масштабі. Загалом, ці типи зносу впливають на макроскопічний аспект зношування передньої та бічної поверхонь інструменту. Явища, що відбуваються в покриттях, є непередбачуваними, виявляються на невеликих ділянках, і прогресування зношування повністю відрізняється від одного інструменту до іншого.

Явища мікроскопічного зношування.

1) *Макротріщинуватість.* Такий вид зносу залишає гострі краї на вакуумно-дуговому покритті інструменту, оскільки він пов'язаний з відривом шматочків покриття або підкладинки великих розмірів (декілька мкм). Але частинки, що були видалені таким шляхом, спостерігалися рідко, оскільки вони швидко видаляються від близькості до інструменту. Це приводить до характерної ступінчастої форми (дуже різка зміна нахилу поверхні зношеної зони) та може бути викликане адгезійним або втомним зношуванням (рис. 8). Сходинок на покритті з'являлися або на передній поверхні, або на бічній стороні інструменту (рис. 9). Іноді спостерігався відрив ділянки вакуумно-дугового покриття, оскільки всередині нього поширювалася тріщина (рис. 10).

2) *Мікротріщинуватість.* Це явище тісно пов'язане з попереднім типом зносу, але діє у меншому масштабі. Дуже маленькі частинки покриття або підкладинки інструменту (розміром до мкм) відриваються та переносяться потоком матеріалу (потоком стружки по передній грані інструменту або матеріалом заготовки по бо-

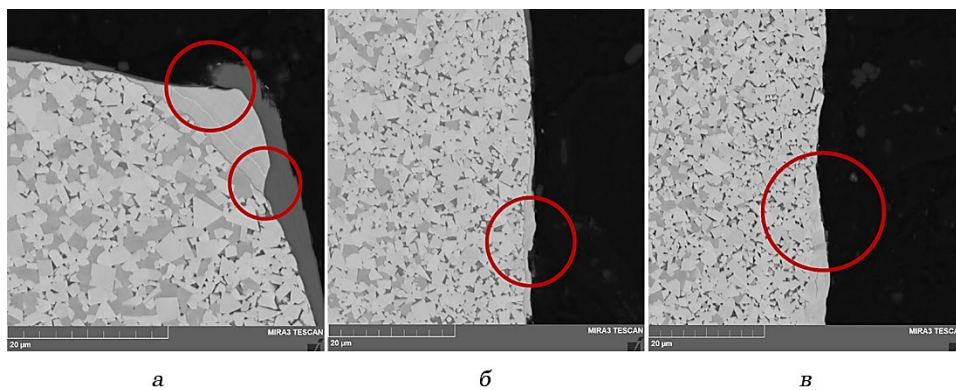


Рис. 8. Макротріщинуватість вакуумно-дугових покриттів W–Zr–N (а), W–TiSi–N (б), W–Cr–N (в) на різальному інструменті.

Fig. 8. Macrofracturing of vacuum-arc coatings W–Zr–N (a), W–TiSi–N (б), W–Cr–N (в) on the cemented-carbides' cutting tools.

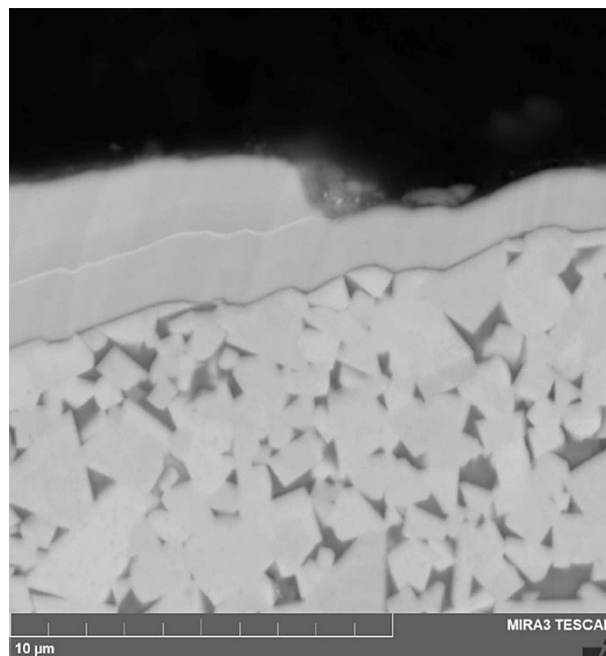


Рис. 9. Знімок ділянки інструменту з W–Zr–N-покриттям (сходинка ступінчастої форми).

Fig. 9. Cutting tool with W–Zr–N coating (of step shape).

ковій стороні) (рис. 11).

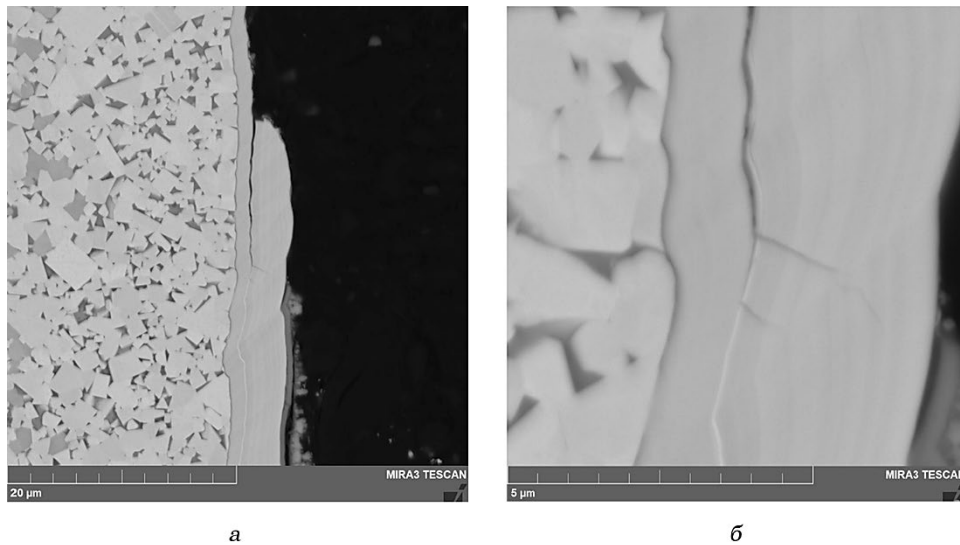


Рис. 10. Знімки інструменту з W–Zr–N-покриттям. Бічна поверхня — ділянка покриття, що відривається. Масштаб: 20 мкм (а), 5 мкм (б).

Fig. 10. Cutting tool with W–Zr–N coating. Flank side—piece of coating tearing apart. Scale: 20 μm (a), 5 μm (b).

Передня грань інструменту зазнає більш низької швидкості потоку матеріалу, що сприяє мікротріщинам покриття [28]. Через деякий час це приводить до суцільної плавної форми зношеної ділянки та може бути викликане адгезійним зношуванням.

3) *Плавне зношування* — це дійсно плавне та лінійне зношування інструменту (рис. 12). Він спостерігався на інструменті з вакуумно-дуговим W–Zr–N-покриттям, і його легко впізнати, оскільки він залишає пошкоджену різальну кромку інструменту та бокову поверхню з гладкими поверхнями. Товщина покриття поступово зменшується, доки не оголиться підкладка з карбіду Вольфраму. Поява цього зносу може бути викликана двома чинниками: комбінацією механічного зносу та дифузії або наявністю дуже дрібних мікротріщин.

4) *Дефекти*. В даному випадку мають на увазі краплі та горизонтальні тріщини. Краплі є особливістю вакуумно-дугового методу нанесення покриття (рис. 13, а, б). Вони впливають на гладкість поверхні покриття, мають тенденцію утворювати багато нерівностей, які можуть діяти як опорні точки для прилипання матеріалу заготовки та зриву покриття. Занадто великі краплі змінюють форму покриття та додають йому багато нерівностей. Але достатньо маленькі крапельки всередині покриття також послаблюють його структуру, оскільки вони стають точками концентрації напружень,

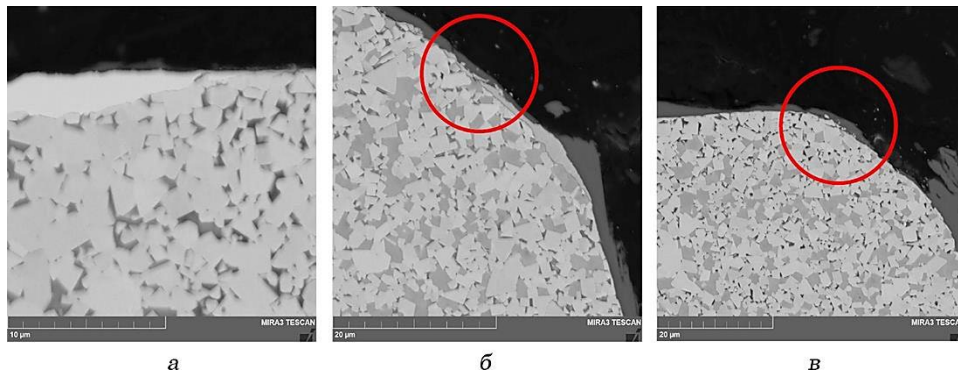


Рис. 11. Мікротріщинуватість вакуумно-дугових покриттів W-N (а), W-TiSi-N (б), W-Cr-N (в) на різальному інструменті.

Fig. 11. Microfracturing of vacuum-arc coatings W-N (a), W-TiSi-N (б), W-Cr-N (в) on the cemented-carbides' cutting tools.

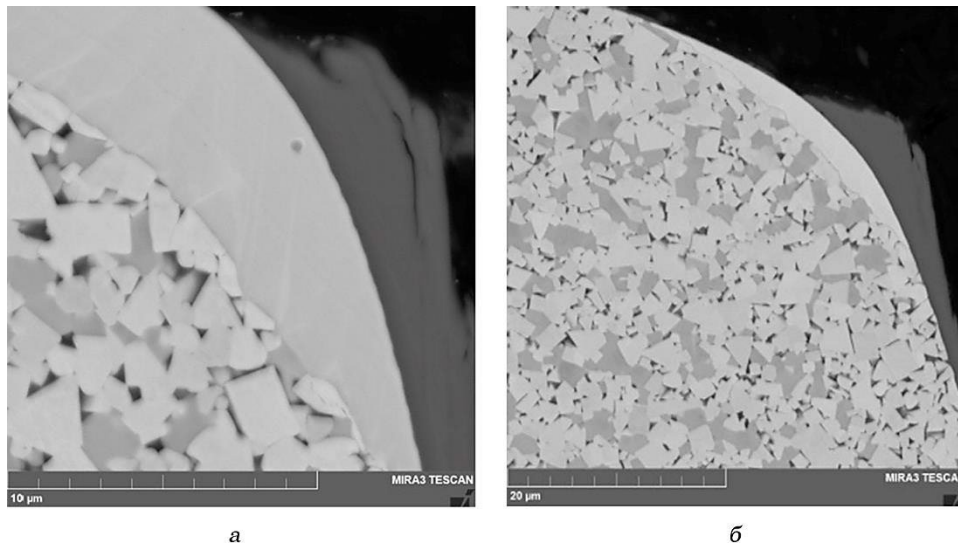


Рис. 12. Плавне зношування досліджуваних вакуумно-дугових W-Zr-N-покриттів на різальному інструменті.

Fig. 12. Smooth wear of investigated cutting tools with vacuum-arc coating W-Zr-N.

коли інструмент зазнає високих зусиль під час оброблення. Якщо напруження перевищує певне значення, тріщина може поширюватися всередині покриття (рис. 13, в). Чим менше дефектів, тим ліпше покриття.

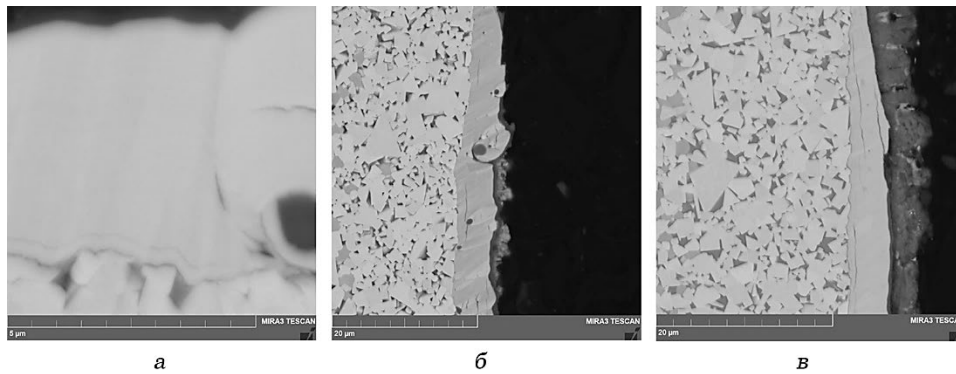


Рис. 13. Дефекти: краплі в вакуумно-дуговому покритті W-TiSi-N (а), W-TiAlCrY-N (б) та горизонтальні тріщини в вакуумно-дуговому покритті W-TiSi-N (в).

Fig. 13. Defects: droplets in vacuum-arc coatings W-TiSi-N (a), W-TiAlCrY-N (б) and horizontal cracks in vacuum-arc coatings W-TiSi-N (в).

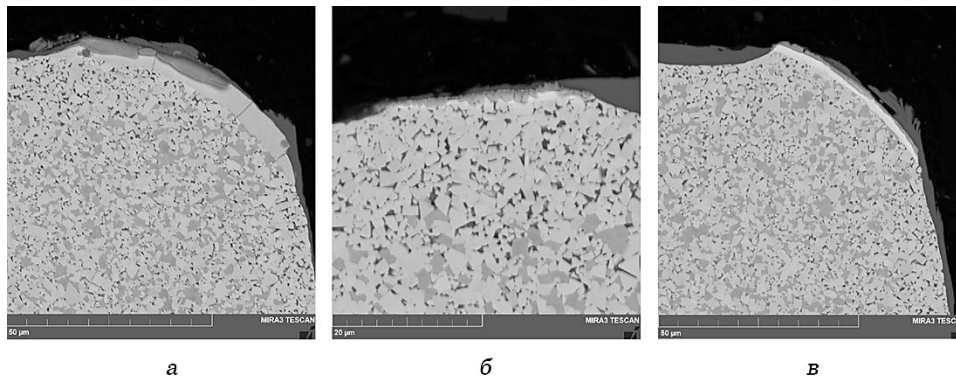


Рис. 14. Нові явища у вакуумно-дугових покриттях W-Mo-N (а), W-N (б, в) за оброблення титанового стопу Ti-6Al-4V.

Fig. 14. Unknown phenomena in vacuum-arc coatings W-Mo-N (a), W-N (б, в) during the machining of the titanium alloy Ti-6Al-4V.

5) *Нові явища.* Під час дослідження різального інструменту з вакуумно-дуговими покриттями зустрічалися цікаві явища, що відбувалися на поверхні покриття і які поки що складно пояснити (рис. 14). Виникнення цих явищ може бути пов'язано як з обраними параметрами різання, так і з іншими чинниками.

Узагальнені одержані результати дослідження різального інструменту з різними вакуумно-дуговими покриттями представлено в табл. 2 (з наступними поясненнями: 1 — макротріщинуватість, 2

ТАБЛИЦЯ 2. Випадки зносу для кожного вакуумно-дугового покриття на твердостопному різальному інструменті за оброблення титанового стопу Ti-6Al-4V.

TABLE 2. All encountered wear behaviours per vacuum-arc coatings on the cemented-carbide cutting tool during the machining of the titanium alloy Ti-6Al-4V.

Склад покриття	макротріщ.	мікротріщ.	адгез. знош.	дифуз. знош.	дефекти	перпенд. тріщ.	плавне знош.	нові явища	без покрит.
	1	2	3	4	5	6	7	8	9
W-N		×						×	
W-Zr-N	×				×		×	×	
W-TiSi-N	×	×			×				
W-TiAlYCr-N					×				×
W-Nb-N	×								
W-Cr-N	×	×							×
W-Mo-N	×				×	×		×	

— мікротріщинуватість, 3 — адгезійне зношування, 4 — дифузійне зношування, 5 — дефекти, 6 — перпендикулярні тріщини, 7 — плавне зношування, 8 — нові явища, 9 — повне стирання покриття до поверхні інструменту).

4. ВИСНОВКИ

Дослідження вакуумно-дугових W-N-, W-Zr-N-, W-Nb-N-, W-Cr-N-, W-Mo-N-, W-TiSi-N-, W-TiAlYCr-N-покриттів на різальному інструменті з карбіду Вольфраму за механічного оброблення титанового стопу Ti-6Al-4V на токарному верстаті SMT 500 Swedturn з використанням 8%-масляноводяної емульсії за тиску у 10 бар дали змогу розширити уявлення про явища та механізми зношування вакуумно-дугових покриттів на основі вольфраму. Слід зауважити, що одержані результати стосуються механічного оброблення титанового стопу Ti-6Al-4V за фіксованих параметрів оброблення заготовки, а саме, за швидкості різання у 120 м/хв., навантаження (подачі) у 0,15 мм/об., глибини різання у 0,8 мм,

довжини оброблення у 40 м, швидкості обертання у 473 об/хв., тривалості механічного оброблення у 20 с.

Одержані результати досліджень можна узагальнити у вигляді наступних висновків.

- 1) Переважальним явищем мікроскопічного зношування, яке зустрічалось під час випробовування, є макротріщинуватість, що пов'язана з відривом ділянок покриття розміром у декілька мкм і появою характерної ступінчастої форми поверхні вакуумно-дугового покриття на інструменті. Це явище спостерігалось на різальному інструменті з покриттями W-Zr-N, W-Nb-N, W-Cr-N, W-Mo-N, W-TiSi-N.
- 2) Мікротріщинуватість, яка відрізняється від попереднього явища мікроскопічного зношування розміром частинок покриття (до мкм), що відриваються та переносяться потоком матеріалу і приводять до плавної форми поверхні вакуумно-дугового покриття, спостерігалася на різальному інструменті з покриттями W-N, W-Cr-N, W-TiSi-N.
- 3) Плавне зношування спостерігалось тільки на інструменті з вакуумно-дуговим W-Zr-N-покриттям. Воно залишило пошкоджену різальну кромку інструменту та бокову поверхню з гладкими поверхнями; товщина покриття поступово зменшувалася до поверхні інструменту з карбіду Вольфраму.
- 4) Дослідження одержаних вакуумно-дугових покриттів показало, що наявність дефектів у покриттях, яка пов'язана з технологією нанесення покриттів, не є обов'язковою. Так, на різальному інструменті з вакуумно-дуговими покриттями W-Zr-N, W-TiSi-N, W-TiAlYCr-N зустрічалися каплі різного розміру. У вакуумно-дуговому W-Mo-N-покритті спостерігалися горизонтальні тріщини, поява яких скоріш за все пов'язана з наявністю всередині покриття дефектів у вигляді дуже маленьких крапельок, які стали точками концентрації напружень за високих навантажень інструменту під час механічного оброблення титанового стопу. В той же час на різальному інструменті з вакуумно-дуговими покриттями W-N, W-Nb-N, W-Cr-N не спостерігалася наявність дефектів.
- 5) Цікавим результатом проведених досліджень стала відсутність адгезійного та дифузійного зношувань. На це вказує відсутність нарощених кромок, тобто ділянок різальної кромки інструменту з матеріалом заготовки (титановим стопом), що налипає.
- 6) Під час дослідження різальних інструментів з вакуумно-дуговими покриттями на основі вольфраму за оброблення титанового стопу Ti-6Al-4V було виявлено нові цікаві явища у W-Mo-N- та W-N-покриттях, які будуть досліджуватися далі.

Таким чином, на основі одержаних результатів серед досліджуваних вакуумно-дугових покриттів можна виділити наступні пок-

риття, які мали найменшу кількість з перелічених вище явищ, а саме:

- W–N-покриття — тріщинуватість та нові явища;
- W–TiAlYCr–N-покриття — дефекти та повне стирання покриття до поверхні інструменту;
- W–Nb–N-покриття — макротріщинуватість;
- W–Cr–N-покриття — макро- та мікротріщинуватість, повне стирання покриття до поверхні інструменту.

Одержання вакуумно-дугових покриттів і дослідження їхніх фізико-механічних властивостей було виконано за підтримки НАН України найважливіших проблем фізико-математичних і технічних наук (відомча тематика 6541230: № 0121U110102). Проведення на кафедрі інженерної механіки машинобудівного факультету Лундського університету випробувань різального інструменту з вакуумно-дуговими покриттями W–N, W–Zr–N, W–Nb–N, W–Cr–N, W–Mo–N, W–TiSi–N, W–TiAlYCr–N, що були одержані у відділі інтенсивних вакуумно-плазмових технологій Національного наукового центру «Харківський фізико-технічний інститут», стало можливим завдяки тісній співпраці науковців обох установ в рамках міжнародного співробітництва за програмою EURIZON Fellowship Programme 'Remote Research Grants'.

ЦИТОВАНА ЛІТЕРАТУРА

1. А. Г. Моляр, А. А. Коцюба, А. С. Бычков, О. Ю. Нечипоренко, *Конструкционные материалы в самолетостроении* (Київ: КВІЦ: 2015).
2. J. C. Williams and R. R. Boyer, *Metals*, **10**, No. 6: 705 (2020).
3. G. He and M. Hagiwara, *Mater. Sci. Eng. C*, **26**, No. 1: 14 (2006).
4. S. X. Liang, X. J. Feng, L. X. Yin, X. Y. Liu, M. Z. Ma, and R. P. Liu, *Mater. Sci. Eng. C*, **61**: 338 (2016).
5. R. Karre, M. K. Niranjana, and S. R. Dey, *Mater. Sci. Eng. C*, **50**: 52 (2015).
6. M. F. Ijaz, H. Y. Kim, H. Hosoda, and S. Miyazaki, *Mater. Sci. Eng. C*, **48**: 11 (2015).
7. I. Gurrappa, *Mater. Charact.*, **51**, Nos. 2–3: 131 (2003).
8. C. Veiga, J. P. Davim, and A. J. R. Loureiro, *Rev. Adv. Mater. Sci.*, **32**: 14 (2012).
9. J. C. Fanning, *J. Mater. Eng. Perform.*, **14**: 788 (2005).
10. M. Peters, J. Hemptnermacher, J. Kumpfert, and C. Leyens, *Titanium and Titanium Alloys: Fundamentals and Applications* (Eds. C. Leyens and M. Peters) (Wiley-VCH Verlag, GmbH & Co.: KGaA: 2003).
11. С. Л. Старикова, В. В. Стариков, *Вестник проблем биологии и медицины*, **2**, № 2 (108): 160 (2014).
12. H. Serhan, M. Slivka, T. Albert, and S. D. Kwak, *Spine J.*, **4**, No. 4: 379 (2004).
13. F. Guillemont, *Expert Rev. Med. Devic.*, **2**, No. 6: 741 (2005).
14. M. Niinomi, *J. Mech. Behav. Biomed. Mater.*, **1**, No. 1: 30 (2008).
15. В. К. Біланенко, *Sci. J. «ΛΟΓΟΣ. The Art of Scientific Mind»*, **2**: 90 (2019).
16. S. E. Sheikin, I. M. Pogrelyuk, and D. A. Sergach, *J. Superhard Mater.*, **37**, No. 5: 75 (2015).

17. A. S. Manokhin, S. A. Klymenko, V. O. Stolboviy, I. V. Kolodiy, M. Yu. Kopieikina, S. An. Klymenko, K. V. Kamchatna-Stepanova, and I. V. Serdyuk, *J. Superhard Mater.*, **44**, No. 5: 368 (2022).
18. I. B. Сердюк, В. О. Столбовий, А. В. Доломанов, В. М. Домнич, *Металлофіз. новітні технол.*, **44**, №. 4: 547 (2022).
19. H. O. Postelnyk, O. V. Sobol', V. A. Stolbovoy, I. V. Serdiuk, and O. Chocholaty, *Probl. Atom. Sci. Tech.*, **2**: 139 (2020).
20. V. F. Gorban', R. A. Shaginyan, N. A. Krapivka, S. A. Firstov, N. I. Danilenko, and I. V. Serdyuk, *Powder Metall. Met. Ceram.*, **54**, Nos. 11–12: 725 (2016).
21. O. V. Sobol', A. A. Andreev, R. P. Mygushchenko, V. M. Beresnev, A. A. Meylekhov, A. A. Postelnyk, S. A. Kravchenko, T. A. Tabaza, S. M. Al-Qawabah, U. F. Al-Qawabeha, V. A. Stolbovoy, I. V. Serdyuk, D. A. Kolesnikov, and M. G. Kovaleva, *Probl. Atom. Sci. Tech.*, **1**: 82 (2018).
22. А. А. Андреев, В. А. Столбовой, И. В. Сердюк, *East-Eur. J. Enterp. Tech.*, **2**, No. 5: 65 (2011).
23. O. V. Sobol', A. A. Postelnyk, A. A. Meylekhov, A. A. Andreev, V. A. Stolbovoy, and V. F. Gorban, *J. Nano-Electron. Phys.*, **9**, No. 3: 03003 (2017).
24. Н. С. Ахметов, *Общая и неорганическая химия* (Москва: Высшая школа: 2001).
25. M. S. I. Chowdhury, B. Bose, K. Yamamoto, L. S. Shuster, J. Paiva, G. S. Fox-Rabinovich, and S. C. Veldhuis, *Wear*, **446–447**: 203168 (2020).
26. *Modern Metal Cutting: A Practical Handbook* (Sandvik Coroman: 1994).
27. J.-E. Stahl, *Metal Cutting Theories and Models* (SECO TOOLS AB: 2012).
28. S. Koseki, K. Inoue, and H. Usuki, *Precision Eng.*, **44**: 41 (2016).

REFERENCES

1. A. G. Molyar, A. A. Kotsyuba, A. S. Bychkov, and O. Yu. Nechyporenko, *Konstruktsionnyye Materialy v Samolyotostroenii* [Structural Materials in Aircraft Construction] (Kiev: KVITs: 2015) (in Russian).
2. J. C. Williams and R. R. Boyer, *Metals*, **10**, No. 6: 705 (2020).
3. G. He and M. Hagiwara, *Mater. Sci. Eng. C*, **26**, No. 1: 14 (2006).
4. S. X. Liang, X. J. Feng, L. X. Yin, X. Y. Liu, M. Z. Ma, and R. P. Liu, *Mater. Sci. Eng. C*, **61**: 338 (2016).
5. R. Karre, M. K. Niranjana, and S. R. Dey, *Mater. Sci. Eng. C*, **50**: 52 (2015).
6. M. F. Ijaz, H. Y. Kim, H. Hosoda, and S. Miyazaki, *Mater. Sci. Eng. C*, **48**: 11 (2015).
7. I. Gurrappa, *Mater. Charact.*, **51**, Nos. 2–3: 131 (2003).
8. C. Veiga, J. P. Davim, and A. J. R. Loureiro, *Rev. Adv. Mater. Sci.*, **32**: 14 (2012).
9. J. C. Fanning, *J. Mater. Eng. Perform.*, **14**: 788 (2005).
10. M. Peters, J. Hemptenmacher, J. Kumpferr, and C. Leyens, *Titanium and Titanium Alloys: Fundamentals and Applications* (Eds. C. Leyens and M. Peters) (Wiley-VCH Verlag, GmbH & Co.: KGaA: 2003).
11. S. L. Starikova and V. V. Starikov, *Bulletin of Problems in Biology and Medicine*, **2**, No. 2 (108): 160 (2014) (in Russian).
12. H. Serhan, M. Slivka, T. Albert, and S. D. Kwak, *Spine J.*, **4**, No. 4: 379 (2004).

13. F. Guillemont, *Expert Rev. Med. Devic.*, **2**, No. 6: 741 (2005).
14. M. Niinomi, *J. Mech. Behav. Biomed. Mater.*, **1**, No. 1: 30 (2008).
15. V. K. Bilanenko, *Sci. J. «ΛΟΓΟΣ. The Art of Scientific Mind»*, **2**: 90 (2019) (in Ukrainian).
16. S. E. Sheikin, I. M. Pogrelyuk, and D. A. Sergach, *J. Superhard Mater.*, **37**, No. 5: 75 (2015).
17. A. S. Manokhin, S. A. Klymenko, V. O. Stolboviy, I. V. Kolodiy, M. Yu. Kopieikina, S. An. Klymenko, K. V. Kamchatna-Stepanova, and I. V. Serdyuk, *J. Superhard Mater.*, **44**, No. 5: 368 (2022).
18. I. V. Serdiuk, V. O. Stolboviy, A. V. Dolomanov, and V. M. Domnich, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **44**, No. 4: 547 (2022) (in Ukrainian).
19. H. O. Postelnyk, O. V. Sobol', V. A. Stolbovoy, I. V. Serdiuk, and O. Chocholaty, *Probl. Atom. Sci. Tech.*, **2**: 139 (2020).
20. V. F. Gorban', R. A. Shaginyan, N. A. Krapivka, S. A. Firstov, N. I. Danilenko, and I. V. Serdyuk, *Powder Metall. Met. Ceram.*, **54**, Nos. 11–12: 725 (2016).
21. O. V. Sobol', A. A. Andreev, R. P. Mygushchenko, V. M. Beresnev, A. A. Meylekhov, A. A. Postelnyk, S. A. Kravchenko, T. A. Tabaza, S. M. Al-Qawabah, U. F. Al-Qawabeha, V. A. Stolbovoy, I. V. Serdyuk, D. A. Kolesnikov, and M. G. Kovaleva, *Probl. Atom. Sci. Tech.*, **1**: 82 (2018).
22. A. A. Andreev, V. A. Stolbovoy, and I. V. Serdiuk, *East-Eur. J. Enterp. Tech.*, **2**, No. 5: 65 (2011) (in Russian).
23. O. V. Sobol', A. A. Postelnyk, A. A. Meylekhov, A. A. Andreev, V. A. Stolbovoy, and V. F. Gorban, *J. Nano- Electron. Phys.*, **9**, No. 3: 03003 (2017).
24. N. S. Akhmetov, *Obshchaya i Neorganicheskaya Khimiya* [General and Inorganic Chemistry] (Moskva: Vysshaya Shkola: 2001) (in Russian).
25. M. S. I. Chowdhury, B. Bose, K. Yamamoto, L. S. Shuster, J. Paiva, G. S. Fox-Rabinovich, and S. C. Veldhuis, *Wear*, **446–447**: 203168 (2020).
26. *Modern Metal Cutting: A Practical Handbook* (Sandvik Coroman: 1994).
27. J.-E. Stahl, *Metal Cutting Theories and Models* (SECO TOOLS AB: 2012).
28. S. Koseki, K. Inoue, and H. Usuki, *Precision Eng.*, **44**: 41 (2016).

PACS numbers: 46.50.+a, 62.20.fk, 62.20.fq, 62.20.mj, 62.20.mm, 62.20.mt, 81.40.Np

A Physically Based Criterion for Determining the Critical Brittleness Temperature from Charpy Impact Tests for PRV Steels and Welds

S. Kotrechko*, V. Revka**, and K. Soroka*

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

***Institute for Nuclear Research, N.A.S. of Ukraine
47, Nauky Ave.,
UA-03028 Kyiv, Ukraine*

Based on ideas about physical nature of brittle and ductile fractures of RPV steels, the criterion for determining the critical temperature of brittleness from the Charpy impact test data is proposed. As shown in the first approximation, the criterion of constancy of local plastic deformation at head of stress raiser can be used to specify the level of impact toughness KCV_{th} depending on the yield stress $\sigma_{0.2}$. As theoretically proved, the threshold level of impact toughness is not an unambiguous function of $\sigma_{0.2}$. An additional influence is exerted by factors, which characterize the ability of RPV metal to resist brittle fracture under stress concentration conditions, in particular, the brittle strength R_{MC} . An approximate analytical relationship is derived, which allows predicting the level of KCV_{th} considering the strength of the RPV metal. In the range of yield strength 400–690 MPa, this relationship is consistent with the KCV_{th} values, which are given in the PNAE G-7-002-86 standard.

Key words: critical brittleness temperature, impact toughness threshold, radiation embrittlement, Charpy impact test, pressure vessel steels.

Corresponding author: Serhii Oleksiyovych Kotrechko
E-mail: kotr@imp.kiev.ua

Citation: S. Kotrechko, V. Revka, and K. Soroka, A Physically Based Criterion for Determining the Critical Brittleness Temperature from Charpy Impact Tests for PRV Steels and Welds, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **45**, No. 8: 1015–1027 (2023).
DOI: [10.15407/mfint.45.08.1015](https://doi.org/10.15407/mfint.45.08.1015)

Спираючись на уявлення щодо фізичної природи крихкості та пластичності металу запропоновано критерій визначення критичної температури крихкості за випробувань на ударну в'язкість. Показано, що в першому наближенні критерій сталості величини локальної пластичної деформації в околі концентратора напружень може використовуватися для коригування порогового рівня ударної в'язкості KCV_{th} в залежності від величини границі плинності $\sigma_{0,2}$ металу. Одержано наближену аналітичну залежність рівня KCV_{th} від величини $\sigma_{0,2}$ корпусного металу для реакторів ВВЕР-1000. Теоретично обґрунтовано, що пороговий рівень KCV_{th} ударної в'язкості не є однозначною функцією величини $\sigma_{0,2}$. На рівень KCV_{th} додатковий вплив має здатність металу чинити опір крихкому руйнуванню в умовах концентрації напружень. Одержано наближену залежність, яка уможливорює прогнозувати рівень KCV_{th} з урахуванням міцності металу $\sigma_{0,2}$. В інтервалі значень $\sigma_{0,2} = 400\text{--}690$ МПа ця залежність узгоджується з пороговими значеннями, яких наведено в стандарті ПНАЕ Г-7-002-86.

Ключові слова: критична температура крихкості, пороговий рівень ударної в'язкості, радіаційне окрихчення, тест за Шарпі, реакторні криці.

(Received 10 August, 2023; in final version, 22 August, 2023)

1. INTRODUCTION

Charpy impact tests are an effective ‘tool’ for assessment of the ability of structural materials to resist brittle fracture, since for these tests the simultaneous action of three embrittlement factors is realized, namely: dynamic load, local triaxial tension (overstress effect), low temperatures. One of the most common characteristics of fracture toughness, determined by Charpy impact test data, is the critical temperature of brittleness, T_K . In nuclear energy, a shift of the T_K temperature is used as a measure of radiation embrittlement of the reactor pressure vessel (RPV) metal, *i.e.*, the difference between the values of critical brittleness temperature for the irradiated (T_{KF}) and non-irradiated (T_{KI}) materials.

The value of T_{KF} (T_{KI}) corresponds to a pre-determined level of KCV_{th} on a temperature dependence of absorbed energy. In the ASTM E185 standard [1], it is recommended to use the specified value of the absorbed energy of 41 J (51 J·cm⁻²). Furthermore, other criterion levels of energy are also used, for example, 28 J (35 J·cm⁻²) [2] or 56 J (70 J·cm⁻²) [3]. In Ukraine, for a determination of the critical temperature of brittleness, PNAE G-7-002-86 [4] is used, in which the criterion level of absorbed energy is not constant, but increases with increasing the yield strength. This is quite logical, since the yield strength contributes to the magnitude of the fracture work; therefore, at the same levels of brittleness of metal, an increase in the strength causes an increase in the fracture work [5]. This means that, when the material yield strength changes, the threshold level of impact toughness must be determined in such a way as to charac-

terize uniquely the level of brittleness of the metal.

The paper proposes a physically justified criterion for determining the critical temperature of brittleness, at which the value of the threshold level of impact toughness is adjusted in such a way as to provide the same level of critical deformation at fracture with a radiation-induced increase in metal strength.

2. THEORY

The cornerstone of modern fracture physics is the notion of crack nuclei, which play the same fundamental role in the fracture process as dislocations in the process of plastic deformation. These cracks are called ‘crack nuclei’ because they do not originally exist in the material. They are formed directly in the process of plastic deformation in the vicinity of the grain or phase boundaries. Their dimensions are given by the size of the microstructural components of the metal [6]. In Refs. [7–9], based on the fundamental properties of crack nuclei, a general approach to assessing the ability of a metal to resist brittle fracture is formulated. It was shown that the transition of metal from ductile to brittle condition is controlled by the level of dynamic stability in the ensemble of crack nuclei. If, at the time of nucleation, the crack nuclei are stable, then, the metal at the macrolevel is capable of plastic deformation, and if not, then, such a metal is in a brittle state.

In terms of macrocharacteristics, the condition for loss of stability in an ensemble of crack nuclei can be described as [10, 11]

$$P_{ms} = \frac{R_{MC}}{\sigma_{0.2} E_m (e_f / 0.002)^n}, \quad (1)$$

where P_{ms} is the parameter of mechanical stability of the metal; R_{MC} is the parameter of mechanical stability of the metal; $\sigma_{0.2}$ is yield strength; n is strain hardening parameter; E_m is parameter of brittle action of the stress raiser; e_f is the magnitude of local plastic deformation in the vicinity of the stress raiser, where the brittle fracture is initiated.

Equation (1) allows us to establish a relationship between the force characteristics R_{MC} , $\sigma_{0.2}$, E_m , which characterize the mechanical stability of the metal, and the magnitude of the residual deformation of fracture e_f in the vicinity of the stress raiser, namely,

$$e_f = 0.002 \left(\frac{R_{MC}}{\sigma_{0.2} E_m} \right)^{1/n}. \quad (2)$$

According to (2), the e_f value can be used as a measure of the brittleness

of a metal at the transition temperature T_K . In this connection, the KCV_{th} value should be determined under the condition $e_f = \text{const}$. The idea of experimental determination of T_K under the condition $e_f = \text{const}$ is demonstrated in Fig. 1.

According to Fig. 1, the T_K value is defined as the intersection point of the Charpy curve with the temperature dependence of the energy of plastic deformation A_f , at which the value of local plastic deformation e_f is reached. The expression for the A_f energy can be written as follows:

$$A_f = V_Y \int_0^{e_f} \sigma_i(x, y, z) de_i(x, y, z), \quad (3)$$

where V_Y is the volume of the area of local yielding, $\sigma_i(x, y, z)$ and $e_i(x, y, z)$ are the distributions of the intensity of local stresses and plastic deformations in the vicinity of the stress raiser.

Using the Hollomon dependency for strain hardening and Mises criterion allows us to obtain an expression for $\sigma_i(x, y, z)$:

$$\sigma_i(x, y, z) = \sigma_{0.2}^D(x, y, z) \left[\frac{e_i(x, y, z)}{0.002} \right]^{n(x, y, z)}, \quad (4)$$

where $\sigma_{0.2}^D(x, y, z)$ is the yield strength considering the distribution of strain rates in the vicinity of the Charpy V -notch; $n(x, y, z)$ is the parameter of strain hardening.

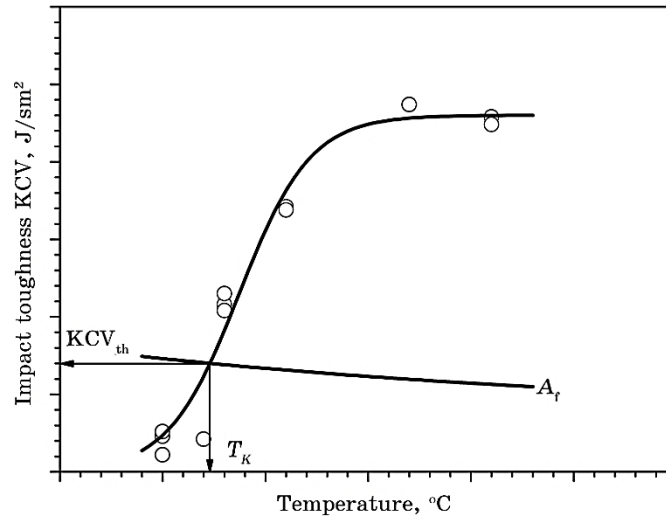


Fig. 1. Temperature dependences of impact toughness KCV and an energy of plastic deformation A_f at a fixed value of critical deformation e_f ; KCV_{th} is threshold value of impact toughness; T_K is critical temperature of brittleness.

Substituting (4) into (3) we get:

$$A_f = V_Y \int_0^{e_f} \sigma_{0.2}^D(x, y, z) \left[\frac{e_i(x, y, z)}{0.002} \right]^{n(x, y, z)} de_i(x, y, z). \quad (5)$$

According to (5), finding the relationship between A_f , the yield strength $\sigma_{0.2}$ and local deformation e_i requires the use of numerical methods, in particular, the finite element method. In this case, such approach is not effective, since, for engineering calculations, it is advisable to obtain the appropriate dependence in analytical form. The problem is considerably simplified if we consider the fact that the task is only to find regularity of change in A_f depending on $\sigma_{0.2}$ at a constant value of plastic deformation.

The idea of an approximate approach is to use the effective volume V_{ef} , within which stresses σ_i and deformations e_i are uniformly distributed, but the energy of the plastic deformation A_f is equal to that for a Charpy V -notch (CVN) specimen.

In this case, the expression (5) is significantly simplified:

$$A_{ef} = V_{ef} \sigma_{0.2}^D \left(\frac{1}{0.002} \right)^n \int_0^{e_f} \bar{e}_i^n d\bar{e}_i, \quad (6)$$

where $\sigma_{0.2}^D$ and n are the yield strength and the exponent of strain hardening at the maximum strain rate ahead of the notch (for the CVN specimen under standard test conditions $e_i \approx 200 \text{ s}^{-1}$ [12]); $\bar{e}_i$ is the average value of the intensity of plastic deformations within the effective volume V_{ef} .

After integrating in the equation (6), we get:

$$A_{ef} = V_{ef} \sigma_{0.2}^D \left(\frac{1}{0.002} \right)^n \frac{1}{1+n} e_f^{1+n}. \quad (7)$$

Considering that, for typical structural ferritic steels, $n \approx 0.05$ and the fact that n decreases with increasing the strain rate, we put that $1+n \approx 1$ and $(1/0.002)^n = 1.36$. In this case,

$$A_{ef} = 1.36 V_{ef} \sigma_{0.2}^D e_f. \quad (8)$$

When structural steels with ferritic microstructure are fractured in the temperature range of the ductile to brittle transition, the value of the critical deformation of initiation of brittle fracture in the vicinity of typical stress raisers is approximately of 2% [13]. This allows in the first approximation to put that $e_f = 0.02$.

The effective volume V_{ef} in the region of local plastic deformation should also be unchanged at a fixed value of critical deformation e_f . Some variations of V_{ef} may be due to different values of the strain-

hardening exponent n ; however, taking into account the above remarks regarding this parameter, in the first approximation, the effect n can be neglected.

For a typical value of the depth h of the local yield region $h \approx 2R$ (where R is the radius of a V -notch, $R = 0.25$ mm). At fracture in the region of ductile-to-brittle transition and cylindrical shape of the area of local yielding and the Charpy specimen thickness of 10 mm, we have $V_{ef} \approx 2 \text{ mm}^3$.

For the practical use of the proposed approach, the invariance of V_{ef} to the value of the yield strength of the metal is of key importance. To verify the derived relationship (8), you can use empirical data on the dependence of the threshold level of impact toughness KCV_{th} on the yield strength of RPV steels and their welds, which are given in the PNAE G-7-002-86 standard [4].

The idea of the calibration procedure is that the V_{ef} value is determined based on the threshold level KCV_{th} for a metal with a given yield strength $\sigma_{0.2}$.

According to (8),

$$V_{ef} = \frac{KCV_{th}}{1.36e_c \sigma_{0.2}^D(T_{KF})}, \quad (9)$$

where $\sigma_{0.2}^D(T_{KF})$ is the yield strength in the vicinity of the Charpy V -notch at the temperature T_K .

3. EXPERIMENTAL METHODS

Experimental studies included uniaxial tensile tests of round specimens at two temperatures of 293 K and 573 K and impact tests of standard Charpy V -notch specimens in the temperature range from 173 K to 373 K.

VVER-1000 RPV steels and their welds were applied as research objects (Table 1).

3.1. Constructing the Temperature Dependence of Impact Toughness

The impact toughness KCV is defined as the absorbed energy, A , divided by the cross-sectional area of the Charpy specimen, F , at the V -notch plane [12]:

$$KCV = \frac{A}{F}. \quad (10)$$

Typically, the temperature dependence of KCV values is approximated by the following relationship [14]:

$$KCV = \left(\frac{USE}{2} \right) \left[1 + \tanh \left(\frac{T - T_0}{C} \right) \right], \quad (11)$$

where USE is the impact toughness value on the upper shelf energy of the Charpy curve, $\text{J}\cdot\text{cm}^{-2}$; T is test temperature; T_0 and C are fitting parameters, $^{\circ}\text{C}$. The values of USE , T_0 and C are found, when processing experimental data by the least squares method.

3.2. Constructing the Temperature Dependence of Yield Strength at Dynamic Loading and Determination of Critical Brittleness

To develop the dependence of the yield $\sigma_{0.2}$ strength on the temperature and strain rate, a model of thermally activated motion of dislocations was used [15, 16], according to which

$$\sigma_{0.2} = \sigma_{0.2}(T_r) + C_1 \exp[-\beta T] - C_1 \exp[-\beta T_r], \quad (12)$$

TABLE 1. Mechanical properties, impact toughness threshold KCV_{th} and critical brittleness temperature T_{KF} , determined by criteria of PNAE-G-7-002-86 and $e_c = 0.02$ for VVER-1000 base and weld metal in irradiated and non-irradiated condition.

Material	Φ , 10^{22}n/m^2	$\sigma_{0.2}$, MPa	$KCV_{\text{th}}^{\text{PNAE}}$, J/sm^2	T_{KF}^{PNAE} , $^{\circ}\text{C}$	V_{ef} , mm^3	$\sigma_{0.2}^D(T_{KF})$, MPa	$KCV_{\text{th}}^{0.02V_{ef}}$, J/sm^2
RPV steel (VVER-1000)							
Steel H	0	543	49	-36	2.152	837	49.8
	11.1	605	59	-18	2.482	874	52.0
	22.2	620	59	-20	2.433	892	52.0
Steel K	0	595	59	-81	2.090	1038	61.0
	18.2	663	59	-43	2.088	1039	61.0
Steel P	0	567	59	-37	2.317	936	54.4
	27.6	593	59	-34	2.264	958	56.0
	68.7	635	59	-23	2.200	986	57.6
Steel W	0	564	59	-73	2.197	987	58.1
	22.2	615	59	-14	2.262	959	60.3
	58.9	627	59	-10	2.245	966	61.2
Steel Y	0	612	59	-79	2.142	1012	59.3
	13.1	665	59	-50	2.134	1016	59.6
	27.3	683	59	-39	2.133	1017	59.8
Steel 15X2NMFA (slab 7)	0	576	59	-76	2.368	916	54.1
Steel 15X2NMFA (slab 5)	0	609	59	-46	2.575	843	51.9

TABLE 1 (*continuation*).

Material	Φ , 10^{22}n/m^2	$\sigma_{0.2}$, MPa	$KCV_{\text{th}}^{\text{PNAE}}$, J/sm^2	T_{KF}^{PNAE} , $^{\circ}\text{C}$	V_{ef} , mm^3	$\sigma_{0.2}^D(T_{KF})$, MPa	$KCV_{\text{th}}^{0.02V_{ef}}$, J/sm^2
RPV weld metal (VVER-1000)							
Weld metal K	0	510	49	-62	1.946	926	54.0
	16.9	593	59	-32	2.263	959	56.0
Weld metal L	0	562	59	-21	2.167	1001	59.0
	33.5	648	59	33	2.104	1031	60.0
	43.5	603	59	25	2.183	994	54.8
Weld metal P	0	502	49	-57	1.914	941	55.1
	22.2	558	59	-11	2.306	941	55.4
	55.8	580	59	11	2.313	938	55.4
Weld metal W	0	437	49	-22	2.032	887	52.0
	17.4	565	59	-17	2.149	1009	59.3
	42.7	625	59	7	2.077	1044	61.2
Weld metal Y	0	545	49	-43	1.875	961	55.9
	20.1	590	59	20	2.373	914	53.9
	56.9	609	59	37	2.379	912	53.9
Weld metal Sv-10XGNMAA	0	471	49	-52	1.886	955	55.8
	8.9	608	59	-8	2.109	1029	60.6
	20.9	593	59	14	2.203	985	58.0

where $\sigma_{0.2}(T_r)$ is the yield strength at room temperature $T_r = 293\text{ K}$; $C_1 = \sigma_{\text{th}}$ is the stress, which characterizes the maximum magnitude of barriers overcome by thermal activation. The coefficient β depends on the strain rate $\dot{\epsilon}$ and density of mobile dislocations ρ_d and is evaluated by the following equation:

$$\beta = C_2 - C_3 \ln \dot{\epsilon}, \quad (13)$$

where $C_2 = k(b^2 \omega_D \rho_d)/U_0$; (k is the Boltzmann constant, ω_D is the Debye frequency, b is the Burgers vector); $C_3 = k/U_0 = 0.000415$.

The C_1 and C_2 coefficients were defined separately for each steel by calibration using the tensile test data for the yield strength at $T = 293\text{ K}$ and $T = 573\text{ K}$ (Table 2). According to the results of processing experimental data in the first approximation, these coefficients do not depend on neutron fluence.

According to (12), the expression for the athermal component of the yield strength σ_a is as follows:

$$\sigma_a = \sigma_{0.2}^{293} - C_1 \exp\left(-(C_2 - C_3 \ln \dot{\epsilon}_0) T_0\right), \quad (14)$$

where $\dot{\epsilon}_0 = 0.0004\text{ s}^{-1}$ is a strain rate under quasi-static tension.

Considering (12) and (13), the expression for the yield strength $\sigma_{0.2}^D$

TABLE 2. The C_1 and C_2 coefficients for the RPV steels, determined by calibration using the yield stress $\sigma_{0.2}$.

Material	C_1 , MPa	C_2
RPV steel (VVER-1000)		
Steel H	933	0.00633
Steel K	1036	0.00584
Steel P	900	0.00518
Steel W	900	0.00513
Steel Y	983	0.00606
Steel 15X2NMFA (slab 7)	1100	0.00755
Steel 15X2NMFA (slab 5)	1100	0.00843
RPV weld metal (VVER-1000)		
Weld metal K	1049	0.00581
Weld metal L	900	0.00423
Weld metal P	900	0.00467
Weld metal W	900	0.00414
Weld metal Y	1045	0.00542
Weld metal Sv-10XGNMAA	1041	0.00483

at the strain rate $\dot{\epsilon}_D = 200 \text{ s}^{-1}$ in the vicinity of the Charpy V -notch is:

$$\sigma_{0.2}^D = \sigma_a + C_1 \exp \left[- (C_2 - C_3 \ln \dot{\epsilon}_D) T \right]. \quad (15)$$

Formula (15) was used to develop the temperature dependence of the $\sigma_{0.2}^D$ for the RPV metal in the initial and irradiated states.

To determine the transition temperature T_{KF} , the KCV_{th} values for four ranges of strength of ferrite steels given in the PNAE G-7-002-86 standard were used (Table 3).

4. RESULTS AND DISCUSSION

In accordance with the results obtained, the V_{ef} value practically does not depend on the strength of RPV metal (Fig. 2). In the range of yield strength 437–683 MPa, the average value of V_{ef} equals to 2.16 mm^3

TABLE 3. Threshold levels of impact toughness depending on the yield strength of structural steels and their welds.

Yield strength $\sigma_{0.2}$ at 20°C, MPa	Impact toughness	
	E , J	KCV , J/sm ²
Before 304	23	29
304–402	31	39
402–549	39	49
549–687	47	59

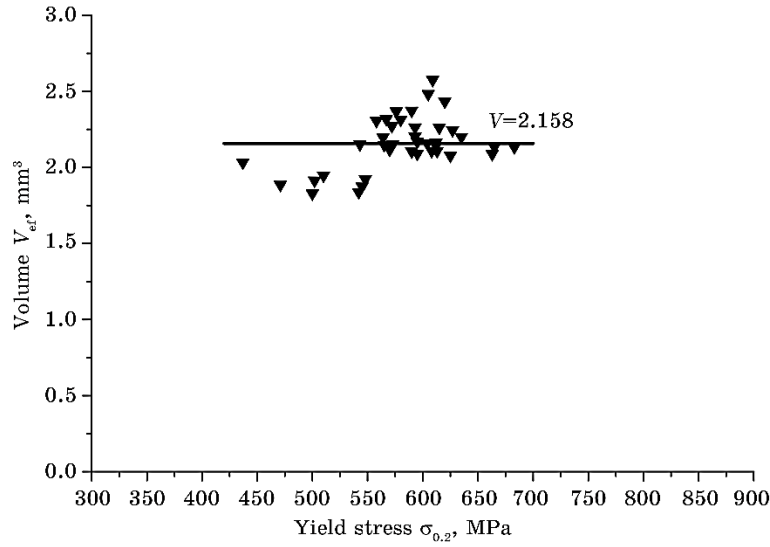


Fig. 2. The effective volume V_{ef} of the Charpy V-notch specimen for the RPV base and weld metal. Line is an average value $V_{ef} = 2.16$.

with a standard deviation of $\pm 8\%$. This is quite close to the estimate above $V_{ef} = 2.00 \text{ mm}^3$.

According to (9), invariance of V_{ef} to the yield strength means the linear dependence of KCV_{th} on the yield strength $\sigma_{0.2}^D(T_{KF})$ at the temperature T_{KF} under the condition of dynamic loading:

$$KCV_{th} = 1.36V_{ef}e_f\sigma_{0.2}^D(T_{KF}). \quad (16)$$

According to (8), (11) and (15), the T_{KF} value can be calculated by solving a nonlinear equation:

$$\begin{aligned} & \left(\frac{USE}{2} \right) \left[1 + \tanh \left(\frac{T_{KF} - T_0}{C} \right) \right] = \\ & = 1.36V_{ef}e_f \left\{ \sigma_a + C_1 \exp \left[- (C_2 - C_3 \ln \dot{\epsilon}_D) T_{KF} \right] \right\}. \end{aligned} \quad (17)$$

The threshold level of impact toughness, KCV_{th} , depends on the yield strength at the temperature T_{KF} under dynamic loading conditions. However, from a practical point of view, it is relevant to establish a relationship between the KCV_{th} and value of the yield strength $\sigma_{0.2}(T_r)$ at room temperature under conditions of uniaxial quasi-static tension. Such an attempt was made in the PNAE G-7-002-86 standard within the framework of a purely empirical approach (Table 3). It should be noted that the threshold levels of impact toughness in PNAE G-7-002-86 are given not as a monotonic function of the material yield

strength, but as a number of fixed values of KCV_{th} for different ranges of $\sigma_{0.2}(T_r)$ (Table 3).

The results obtained in this study allow us to establish a relationship between KCV_{th} and the yield strength at room temperature. Substituting the expression (15) for $\sigma_{0.2}^D$ in Eq. (16) considering Eq. (14), after the math conversions, we get:

$$KCV_{th} = a + b\sigma_{0.2}, \quad (18)$$

where

$$a = 1.36V_{ef}e_fC_1 \left\{ \exp[-(C_2 - C_3 \ln \dot{\epsilon}_D)T_{KF}] - \exp[-(C_2 - C_3 \ln \dot{\epsilon}_D)T_K] \right\}, \quad (19)$$

$$b = 1.36V_{ef}e_f. \quad (20)$$

In accordance with Eqs. (18)–(20), the threshold level, KCV_{th} is not an unambiguous function of the yield strength $\sigma_{0.2}(T_r)$, since this parameter is influenced by the T_{KF} temperature, which, in turn, depends not only on the $\sigma_{0.2}$ and n , but also on the local cleavage stress σ_F in the vicinity of the stress raiser. The value of the latter is determined by the brittle strength R_{MC} [9, 10]. In the relationship (18), the influence of these factors on KCV_{th} is characterized by the coefficient b .

The derived values of KCV_{th} (Fig. 3) allow us to estimate the degree of variation of this parameter for RPV steels and welds in the initial

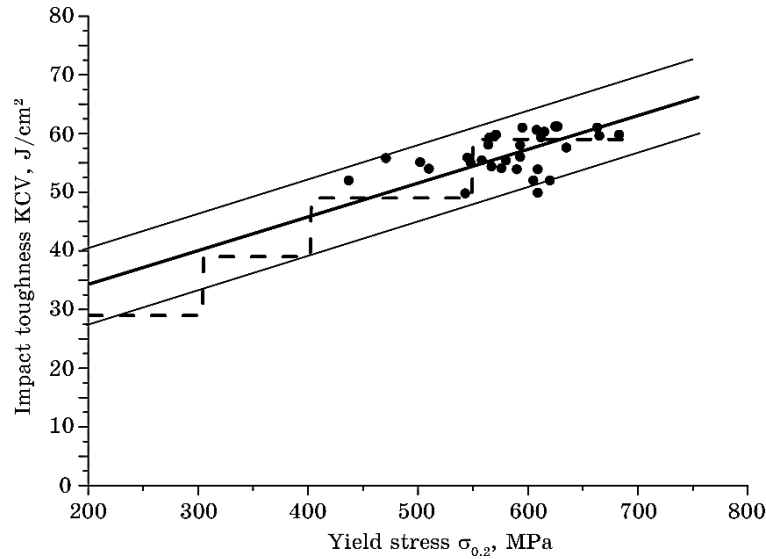


Fig. 3. Dependence of KCV_{th} values on the yield strength $\sigma_{0.2}(T_r)$ at room temperature under quasi-static loading conditions: solid lines—calculations by Eq. (18) at $a = 22.63 \pm 6.77 \text{ J}\cdot\text{cm}^{-2}$; dashed lines—the KCV_{th} values according to PNAE G-7-002-86.

and irradiated states. For this, the data in Fig. 3 were approximated using the relationship (18) provided that $b = 0.058 \text{ J}/(\text{cm}^2 \cdot \text{MPa})$ ($e_f = 0.02$, $V_{ef} = 2.16 \text{ mm}^3$). In this case, $a = 22.63 \pm 6.77 \text{ J}/\text{cm}^2$, that is, the coefficient of variation of parameter a is of 30%.

Thus, using Eq. (18) with specified a and b allows us to outline the entire array of KCV_{th} values. For the range of yield strength 400–690 MPa at room temperature, this dependence is generally consistent with the empirical KCV_{th} values used in PNAE G-7-002-86; however, unlike PNAE G-7-002-86, dependence of KCV_{th} on the yield strength $\sigma_{0.2}(T_r)$ is a monotonic function.

Finally, it should be emphasized that a scatter of the KCV values in Fig. 3 is not due to the test conditions (a variation of test temperature from a specimen to a specimen, V -notch parameters, impact velocity, etc.). This scatter is due to influence of additional factors, first of all, the R_{MC} parameter, which characterizes the brittle fracture resistance of RPV steels and depends on their microstructure.

5. CONCLUSIONS

To assess the ability of structural steels to resist the brittle fracture using the transition temperature T_{KF} , the threshold value of impact toughness KCV_{th} should increase with increasing the strength in such a way as to ensure a constant value of local plastic deformation in the vicinity of the V -notch for the Charpy specimen.

The KCV_{th} value is not an unambiguous function of the yield strength $\sigma_{0.2}(T_r)$ at room temperature. An additional influence on the KCV_{th} is exerted by factors that characterize the ability of RPV metal to resist brittle fracture under stress concentration conditions, in particular the brittle strength R_{MC} .

For practical use, the dependence of KCV_{th} on $\sigma_{0.2}(T_r)$ can be represented in the 1st approximation as a linear function $KCV_{th} = a + b\sigma_{0.2}$, where the influence of additional factors on KCV_{th} is taken into account by the variation of the parameter $a = 22.63 \pm 6.77 \text{ J}\cdot\text{cm}^{-2}$. In this interpretation, the proposed relationship is generally consistent with the empirical KCV_{th} values used in PNAE G-7-002-86 in the range of yield strength 400–690 MPa.

The research leading to these results was funded by the National Academy of Sciences of Ukraine (Grant Number 0121U107569).

REFERENCES

1. *Standard Practice for Design of Surveillance Programs for Light-Water Moderated Nuclear Power Reactor Vessels*, ASTM E185-16 (2016).
2. K. Wallin, *Innovative Approaches to Irradiation Damage and Fracture Analy-*

- sis, ASME Pressure Vessels and Piping Conference-JSME Co-sponsorship (July 23–27, 1989, Honolulu, Hawaii).
3. B. Tanguy, J. Besson, R. Piques, and A. Pineau, *Engng. Fract. Mech.*, **72**: 49 (2005).
4. *Normy Raschyota na Prochnost Oborudovaniya i Truboprovodov Atomnykh Ehnergeticheskikh Ustanovok* [Standards for Strength Calculation of Equipment and Pipelines of Nuclear Power Plants], PNAE G-7-002-86 (in Russian).
5. S. A. Kotrechko and Yu. Ya. Meshkov, *Problemy Prochnosti*, No. 4: 352 (2001) (in Russian).
6. S. A. Kotrechko, Yu. N. Podrezov, I. N. Maksimchuk, and A. V. Kranikov, *Mekhanicheskoe Razrushenie Materialov* [Mechanical Failure of Materials]. *Inorganic Materials Science* (Eds. G. G. Gnesin and V. V. Skorohod) (Kiev: Naukova Dumka: 2007), vol. 1 (in Russian).
7. S. A. Kotrechko, Yu. Ya. Meshkov, and G. S. Mettus, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **12**, No. 6: 3 (1990) (in Russian).
8. S. A. Kotrechko and Yu. Ya. Meshkov, *Ukr. Phys. J.*, **36**, No. 7: 1087 (1991) (in Russian).
9. S. A. Kotrechko, Yu. Ya. Meshkov, G. S. Mettus, and D. I. Nikonenko, *Problemy Prochnosti*, No. 1: 72 (2000).
10. S. A. Kotrechko and Yu. Ya. Meshkov, *Problemy Prochnosti*, No. 2: 55 (2009) (in Russian).
11. S. A. Kotrechko and Yu. Ya. Meshkov, *Predelnaya Prochnost. Kristally, Metally, Konstruktsii* [Ultimate Strength. Crystals, Metals, Structures] (Kiev: Naukova Dumka: 2008) (in Russian).
12. *Materialy Metalevi. Vyprovuvannya na Udarnyi Vygyn za Charpi. Chastyna 1. Metody Vyprovuvannya* [Metallic Materials. Charpy Impact Bending Test. Part 1. Test Method], DSTU EN 10045-1:2006 (in Ukrainian).
13. S. Kotrechko, B. Strnadel, and I. Dlouhy, *Appl. Fract. Mech.*, **47**: 171 (2007).
14. *Inzhenernaya, Nauchnaya i Tekhnicheskaya Podderzhka. Metodika Opredeleniya Radiatsionnogo Okhrupchivaniya Metalla Korpusov Reaktorov i Srokov Vygruzki Obraztsov-Svideteley po Rezultatam Ikh Ispytaniy*, [Engineering, Scientific and Technical Support. Method for Determining the Radiation Embrittlement of The Metal of Reactor Vessels and The Timing of Unloading Witness Samples Based on The Results of Their Tests], SOU NAEK 087:2015 (in Russian).
15. F. J. Zerilli, and R. W. Armstrong, *J. Appl. Phys.*, **65**, No. 5: 1816 (1987).
16. V. D. Yaroshevich and D. G. Ryvkina, *Fiz. Met. Metalloved.*, **31**, Iss. 6: 1293 (1971) (in Russian).

PACS numbers: 46.50.+a, 62.20.fk, 62.20.fq, 62.20.mj, 62.20.mm, 62.20.mt, 81.40.Np

Механічна стабільність і крихкість металів і сплавів.

Ч. 1. Параметри і критерії стабільного стану

Ю. Я. Мешков, Г. П. Зіміна

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

В статті розглядається проблема крихкого руйнування криць, спричиненого дією концентраторів напружень (КН), в тому числі тріщин, за низьких температур випробування. Автори роботи розглядають в'язко-крихкий перехід за критичної температури T_c руйнування зразків з КН як втрату механічної стабільності граничної міцності σ_{NF} під час руйнування зразка з КН нижче межі плинності металу $\sigma_{0,2}$. Механічну стабільність міцності металевим матеріалам надає пластичність, яка зосереджується в інтервалі деформаційного зміцнення між межею плинності $\sigma_{0,2}$ й істинним напруженням руйнування S_K у вигляді показника зламостійкості $B_r = S_K / \sigma_{0,2}$ під час в'язкого відриву у «шийці» зразка. Концентратор напружень локалізує весь резерв механічної стабільності металу B_r в зоні пластичності, чим зумовлює макроскопічну крихку поведінку зразка за температури $T \leq T_c$, де міцність зразка з КН $\sigma_{NF} \leq \sigma_{0,2}$. Встановлено залежність критичного рівня B_{rc} при T_c від резерву механічної стабільності міцності (B_r) і виду КН. Розглянуто ефективність окрихчувальної дії різних типів КН (надрізів і тріщин) на прикладі армко-заліза (α -Fe), а також конструкційних криць у широкому діапазоні показників міцності ($\sigma_{0,2} = 150\text{--}1500$ МПа) і пластичності ($\psi_K \approx 10\text{--}83\%$). Показано, що критичний параметер резерву механічної стабільності B_{rc} може стати ключовим засобом ранжування конструкційних сплавів у практичному матеріалознавстві під час атестації сплавів для застосування їх у виробі, що містять в собі конструкційні концентратори або тріщини втоми.

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

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

Citation: Yu. Ya. Meshkov and H. P. Zimina, Mechanical Stability and Brittleness of Metals and Alloys. Pt. 1. Parameters and Criteria of the Stable State, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, 45, No. 8: 1029–1040 (2023). DOI: [10.15407/mfint.45.08.1029](https://doi.org/10.15407/mfint.45.08.1029)

Ключові слова: міцність, крихкість, механічна стабільність, концентратор напружень, стабільність міцності, резерв стабільності міцності, ефективність концентратора.

This article considers the problem of brittle fracture of steels due to stress raisers (SRs), including cracks, at low test temperatures. The authors consider the ductile-to-brittle transition at the critical temperature of fracture of specimens with SRs, T_C , as a mechanical instability of the ultimate strength, σ_{NF} , at fracture of above specimens below the yield stress of metal, $\sigma_{0.2}$. The mechanical strength stability of metal materials is provided by ductility, which is manifested within the strain-hardening range between the yield stress $\sigma_{0.2}$ and true fracture stress S_K as the break resistance index $B_r = S_K / \sigma_{0.2}$ at ductile break in specimen 'neck'. The stress raiser localises the entire margin of mechanical stability of metal, B_r , in the ductility zone, which causes the macroscopic brittle behaviour of specimen at temperatures $T \leq T_C$, where strength of the specimen with SRs is $\sigma_{NF} \leq \sigma_{0.2}$. Dependence of the critical level, B_{rc} , at T_C on both the margin of mechanical stability of strength, B_r , and the SR type is ascertained. Effectiveness of the embrittlement effect of various SR types (notches and cracks) is considered using the example of armco-iron (α -Fe), as well as of structural steels over both a wide strength range ($\sigma_{0.2} = 150\text{--}1500$ MPa) and ductility range ($\psi_K \approx 10\text{--}83\%$). It is shown that the critical parameter of mechanical stability margin, B_{rc} , may become a key tool for ranking structural alloys in practical materials science, when certifying these alloys for their use in products containing structural stress raisers or fatigue cracks.

Key words: strength, brittleness, mechanical stability, stress raiser, strength stability, strength stability margin, concentrator efficiency.

(Отримано 27 березня 2023 р.; остаточн. варіант — 13 квітня 2023 р.)

1. ВСТУП. ДВА ВИДИ МЕХАНІЧНОЇ СТАБІЛЬНОСТІ

Кожному руйнуванню навантаженого тіла передує певний етап стабільного механічного стану, під час якого в матеріалі відбуваються процеси накопичення пружних і пластичних деформацій і зростання відповідних напружень σ_N . Стабільність механічного стану завершується руйнуванням у момент, коли напруження досягає граничної для наявної структури матеріалу міцності S_K : $\sigma_{NF} = S_K$. Відповідно, співвідношення напружень σ_N і S_K відображає поточний параметр механічної стабільності напруженого стану P_N :

$$P_N = S_K / \sigma_N. \quad (1)$$

Фізична сутність параметра P_N полягає в тому, що він відображає міру стабільності напруженого стану по відношенню до стану руйнування тіла, а з технічного боку вираз (1) є ні чим іншим, як коефіцієнтом запасу міцності навантаженого тіла під напруженням

σ_N , в якому замість широко вживаного в інженерній практиці показника $\sigma_{0,2}$ чи σ_B фігурує істинне напруження руйнування S_K . За визначенням $\sigma_N < S_K$ і $P_N > 1$. При $\sigma_N = S_K$ маємо $P_N = 1$ — критичний механічний стан напруження, тобто руйнування. Отже, за визначенням такий вид механічної стабільності, як механічна стабільність напружено деформованого стану (НДС) навантаженого тіла не може бути нижче критичного $P_C = 1$ навіть у однорідних полях напружень (ОПН). В умовах суто неоднорідних полів напружень (НПН), наприклад, за вигину, кручення або поблизу тріщин чи інших концентраторів напружень (КН) умова $P_N \geq 1$ ще більше підсилюється, тому що номінальні (середні) напруження σ_N можуть бути набагато нижчими за локальні σ_L . А оскільки руйнування у своєму зародковому стані є суто локальним явищем [1, 2], то слід розрізняти номінальні P_N по (1) і локальні P_L параметри механічної стабільності напруженого стану:

$$P_L = S_K / \sigma_L. \quad (2)$$

Але для металів, де у показника міцності є межа плинності $\sigma_{0,2}$, можливий інший вид механічної стабільності — стабільність механічних властивостей: міцності та пластичності. Другий вид механічної стабільності можливий тільки для металевих матеріалів і впливає з першого у окремому випадку, коли номінальне σ_N (або локальне σ_L) напруження перетинає рівень межі плинності $\sigma_{0,2}$ і стабільно підтримує міцність металу у стані пластичної деформації. Для другого виду стабільності відведено обмежений інтервал напружень між двома показниками міцності — $\sigma_{0,2}$ і S_K , де виникає додаткова міцність деформаційного зміцнення металу, що доповнює базову міцність, яку позначимо B_r :

$$B_r = S_K / \sigma_{0,2}. \quad (3)$$

Теоретичні основи механічної стабільності на підґрунті уявлень локального підходу щодо процесу руйнування детально розроблено в [3]. В даній роботі механічна стабільність розглядається як стабільність міцності у термінах, зручних для практичного застосування.

Параметер P_N механічної стабільності напруження σ_N по (1) може частково перекриватися з показником B_r по (3), але фізичні сутності їх істотно відрізняються між собою: P_N відмічає інтервал механічної стабільності напруженого стану в межах напружень від σ_N до S_K у чисто пружньому відліку, що прийнятно лише для крихких матеріалів, тоді як B_r , будучи для металів лише частиною величини P_N , відображає механічну стабільність міцності металу у стані активного пластичного деформування в межах двох фіксованих рубежів міцності — базової $\sigma_{0,2}$ і граничної S_K . Співвідношення цих

показників дає кількісний вимір особливої властивості — показник B_r механічної стабільності міцності та пластичності одночасно, який слугує резервом міцності металу в особливих умовах навантаження, коли в ході пластичної деформації в структурі металу постійно виникають зародкові тріщини (ЗТ) [1, 2], з яких за певних умов (при $\sigma_N = S_K$ або $\sigma_L = S_K$) сформується джерело руйнування [2].

Постає задача — з'ясувати як співвідношення показників B_r і P_N впливає на стан крихкості у металах, що є метою даної роботи. Але перед тим треба відмітити деякі особливості показника стабільності міцності B_r як специфічної механічної властивості металу.

Завдяки тому, що в формулі (3) замість показника напруження σ_N представлений показник механічної властивості $\sigma_{0,2}$, то величина B_r за своїм фізичним змістом переходить від категорії показника стабільності напруженого стану (типу P_N по (1)) до показника нової властивості металу B_r , яка відображає стабільність міцності в умовах пластичної деформації, коли $\sigma_{NF} \geq \sigma_{0,2}$. Можна відмітити, що ця властивість, — механічна стабільність міцності та пластичності металів, — здавна відома технологам гарячого та холодного оброблення металів у процесах кування, прокатки та холодного волочіння дроту, коли міцність металу зберігається під час інтенсивної деформації вище межі плинності $\sigma_{0,2}$. Саме від величини резерву стабільності міцності B_r залежить ступінь можливої деформаційної формозміни заготовки під захистом властивості механічної стабільності міцності металу (B_r) в інтервалі між базовою ($\sigma_{0,2}$) і граничною (S_K) міцностями металу.

Надалі властивість стабільності міцності та пластичності B_r для скорочення будемо називати резервом стабільності міцності або просто резервом міцності.

Але в конструкційному застосуванні металів у показника B_r інша роль — в зоні стабільності міцності може виникати або стабільно існувати будь-яка неоднорідність НДС, якщо вона не перевищує резерв стабільності міцності B_r . Тим самим показник резерву стабільності міцності B_r відіграє вирішальну роль у захисті елементів конструкцій (ЕК) від крихкого руйнування в тих видах навантаження, де має місце різка неоднорідність НДС — під час вигину, кручення, в ЕК, що містять в собі конструктивні КН або набуті дефекти — тріщини.

За таку корисну функцію характеристики B_r автори робіт [4–7] назвали цю властивість металу зламостійкістю. Яким чином реалізується захисна роль цієї властивості в крицях мова піде нижче, але слід зазначити, що саме нестабільність міцності природньо крихких матеріалів (скло, граніт, тощо) є характерним проявом їхньої особливої механічної поведінки в умовах неоднорідних видів навантаження (вигин, кручення, наявність КН, тріщини). Безсумнівно, що добре відому крихкість, а по-суті таку екстремально ви-

соку нестабільність міцності викликано відсутністю резерву стабільності міцності: $B_r = 1$ через відсутність у крихких матеріалів характеристики межі плинності $\sigma_{0,2}$.

З усього вищенаведеного випливає, що два розглянуті вище види механічної стабільності P_N (1) і B_r (3) описують різні предмети стабільності: P_N є параметром, що характеризує стабільний (без руйнування) напружений стан навантаженого тіла, B_r — показником особливої властивості металу — резерву стабільності його міцності в умовах пластичного деформування. Порушення стабільності напруженого стану ($P_N = 1$) означає руйнування тіла; порушення стабільності міцності ($B_r = 1$) означає крихкість матеріалу.

2. РОЛЬ РЕЗЕРВУ МЕХАНІЧНОЇ СТАБІЛЬНОСТІ МІЦНОСТІ МЕТАЛЕВИХ СТОПІВ У НЕОДНОРІДНИХ СИЛОВИХ ПОЛЯХ

Головною особливістю напруженого стану в неоднорідних силових полях (НСП) є те, що в умовах НСП різко розрізняється роль номінальних (σ_N) і локальних (σ_L) напружень у відповідності з різною фізичною сутністю двох граничних явищ у металі — плинності та руйнування: плинність ($\sigma_{0,2}$) зумовлено статистично усередненою структурою металу, а руйнування (S_K) — зародковими тріщинами (ЗТ) суто локального походження на окремих елементах структури металу — межах зерен, на розломах включень твердої фази та ін. [2, 8]. Тому локальний і номінальний параметри механічної стабільності для напруження руйнування S_K (P_L і P_N) будуть відрізнятися відповідно до ступеня неоднорідності НДС в зоні КН. В такому разі умова локального руйнування по (2) $P_L = 1$ може відбутися за будь-якого параметра P_N , більшого чи меншого за 1, в тому числі і при $P_N > B_r$, тобто при $\sigma_{NF} < \sigma_{0,2}$.

Руйнування металічного виробу з КН за середніх (номінальних) навантажень нижче межі плинності металу $\sigma_{0,2}$, тобто в пружній області, є аналогом прояву нестабільності міцності для природньо крихкого матеріалу в неоднорідних НДС. Але в металах ця нестабільність стає критичною (або практично відчутною) лише в тому випадку, коли гранична міцність руйнування σ_{NF} під дією КН падає нижче $\sigma_{0,2}$ металу. Це означає, що насправді в металевих стопах ми маємо справу не з крихкістю металів, а з крихкою поведінкою металевого тіла в неоднорідних НДС, якщо розмах неоднорідності напружень в момент руйнування перевищує резерв стабільності міцності B_r :

$$S_K / \sigma_{NF} > S_K / \sigma_{0,2} . \quad (4)$$

Як бачимо, пластичність як властивість металу (ψ_K) не фігурує в умові переходу до крихкої поведінки тіла з КН; тому в металах

крихкість в умовах НСП означає не втрату пластичності (ψ_K), а нестачу достатнього для даного виду НСП резерву стабільності міцності B_r . Тому цілком зрозуміло, що у природньо крихких матеріалів (скло, граніт), у яких просто немає резерву стабільності міцності ($B_r = 1$), характерною особливістю їхньої поведінки під навантаженням є прояв цілковитої нестабільності міцності під час вигину зразків або нанесення надрізів твердим інструментом.

Зі співвідношення (4) видно, що в умовах НСП стабільність міцності руйнування металу S_K зникає, коли тривка здатність σ_{NF} зразка з КН стає меншою, ніж межа плинності $\sigma_{0,2}$; отже критерієм крихкості зразка з КН природньо прийняти умову

$$\sigma_{NF} = \sigma_{0,2}. \quad (5)$$

На рисунку 1 показано, що умова (5) відмічає критичну температуру в'язко-крихкого переходу для зразка з КН, якій відповідає критичний рівень міцності металу $\sigma_{0,2} = \sigma_{0,2C}$ і критичний показник

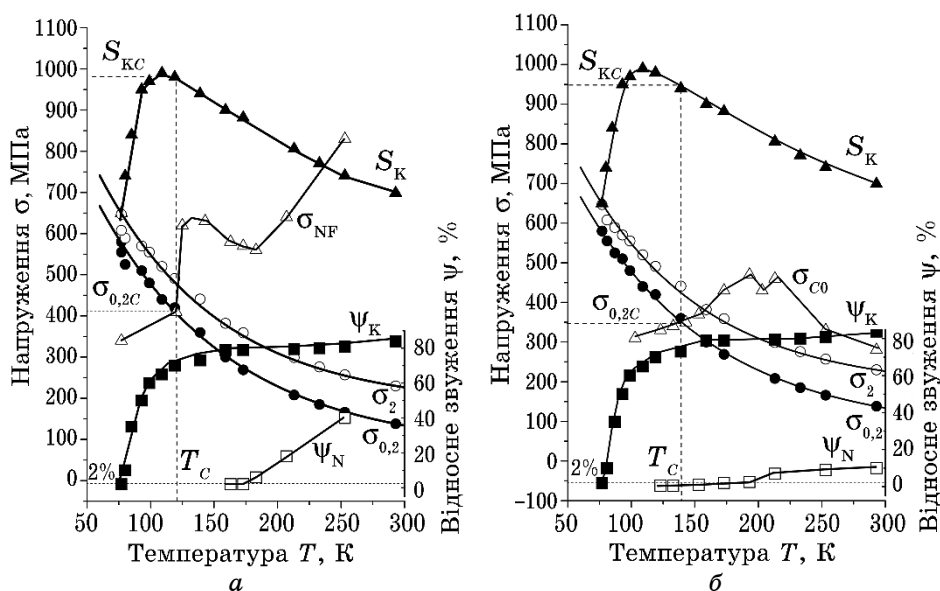


Рис. 1. Температурні залежності механічних властивостей α -Fe для гладких зразків ($\sigma_{0,2}$, ψ_K , S_K) і зразків з концентраторами напружень: *a* — зразки з кільцевим надрізом за руйнування на розтяг (σ_{NF} , ψ_N); *б* — зразки з тріщиною втоми за триточкового навантаження (σ_{C0} , ψ_N).

Fig. 1. Temperature dependence of the mechanical properties of α -Fe for unnotched specimens ($\sigma_{0,2}$, ψ_K , S_K) and specimens with stress raisers: *a* — specimens with an annular notch at tensile test fracture (σ_{NF} , ψ_N); *б* — specimens with a fatigue crack under three-point loading (σ_{C0} , ψ_N).

зламостійкості $B_r = B_{rc}$. Отже, для позначення критичного стану переходу зразка з КН до крихкості (тобто втрати стабільності міцності) достатньо лише одного параметра — критичного резерву міцності (зламостійкості) B_{rc} :

$$B_{rc} = S_{Kc} / \sigma_{0,2C} . \quad (6)$$

За температури $T > T_C$ маємо $B_r > B_{rc}$ і $\sigma_{NF} > \sigma_{0,2}$ — стабільність міцності σ_{NF} ; за $T < T_C$ — навпаки, нестабільність граничної міцності, крихкість.

Два споріднених параметра стабільності — стабільність напруженого стану P_N по (1) і резерв стабільності міцності B_r по (3), що запобігає крихкості металу, характеризують процес руйнування у всій необхідній повноті, як з боку напруженого стану (P_N), так і з боку властивостей металу ($\sigma_{0,2}$, S_K , B_r). Тому системну аналізу ефективності окрихчувальної дії КН на різних металевих стопах доцільно здійснювати саме на цих показниках процесу руйнування.

В момент руйнування при σ_{NF} під дією КН показник $P_N > 1$ відображає ефективність α_{ef} руйнувальної дії КН для металу з певним рівнем B_r :

$$\alpha_{ef} = S_K / \sigma_{NF} . \quad (7)$$

Нижче ми будемо користуватися саме показниками α_{ef} і B_r для аналізу ефективності окрихчувальної дії КН на прикладі криць різного класу міцності.

3. ВПЛИВ РЕЗЕРВУ СТАБІЛЬНОСТІ МІЦНОСТІ B_r НА ЕФЕКТИВНІСТЬ РУЙНУВАЛЬНОЇ ДІЇ КН α_{ef}

Вибір двох вищезгаданих механічних показників (B_r і α_{ef}) для аналізу природи окрихчувальної дії КН у металевих виробах виглядає цілком доречним і обґрунтованим, оскільки в такій постановці задачі має місце протистояння двох співрозмірних, але протилежних по своїй природі властивостей — властивості спротиву руйнуванню металу у неоднорідних полях напружень (B_r) і здатності КН за рахунок сили, закладеної в коефіцієнті концентрації напружень α_σ [9, 10], здолати наявний резерв стабільності міцності металу B_r . Нагадаємо, що в металевих стопах завдяки присутності резерву міцності B_r ця сила КН різко знижується від ідеального Нейберового показника α_σ до ефективної діючої сили КН — α_{ef} по (7), яка залежить не лише від α_σ , а й від резерву міцності B_r .

Співвідношення властивостей металу (B_r) і ефективної сили концентратора напружень стосовно цього ж металу (α_{ef}) повністю контролюють характер руйнування тіла з КН: при $\alpha_{ef} < B_r$ руйнування

в'язке, оскільки при $\sigma_{NF} > \sigma_{0,2}$ маємо стабільність базової міцності; при $\alpha_{ef} > B_r$ руйнування крихке, тому що при $\sigma_{NF} < \sigma_{0,2}$ — нестабільність міцності руйнування (S_K); при $\alpha_{ef} = B_r$ — в'язко-крихкий перехід ($\sigma_{NF} = \sigma_{0,2} = \sigma_{0,2C}$) при $T = T_C$ (рис. 1). Отже, критерієм крихкості для будь-якого тіла з КН (в тому числі і з тріщиною) є не лише умова (5) $\sigma_{NF} = \sigma_{0,2}$, але також її еквіваленти: $B_r = B_{rc}$ (6) і

$$\alpha_{ef} = B_r. \quad (8)$$

Критерій (8) визначає критичну для даного металу ефективність КН α_{efc} через критичний показник резерву стабільності міцності B_{rc} для температури в'язко-крихкого переходу T_C (рис. 2).

При $T > T_C$ маємо $B_r > \alpha_{ef}$, тому що $\sigma_{0,2} < \sigma_{NF}$ (рис. 2). Це означає, що захисні (від крихкості) можливості металу (B_r) переважають руйнівальні можливості КН (α_{ef}), і метал зберігає стабільність своєї міцності ($\sigma_{0,2}$) у зразку з КН. Нижче T_C , навпаки, $\alpha_{ef} > B_r$, відповідно, $\sigma_{NF} < \sigma_{0,2}$, під дію КН метал втрачає стабільність своєї міцності, що означає перехід до крихкої поведінки зразка з КН (рис. 2).

Отже, критичне значення резерву стабільності міцності стає B_{rc} вузловим чинником у проблемі переходу металу від в'язкого до

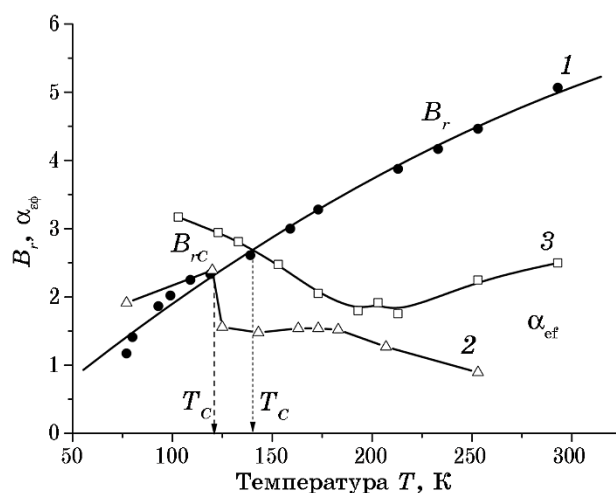


Рис. 2. Температурні залежності показників резерву стабільної міцності B_r (лінія 1) і ефективності руйнувальної дії КН α_{ef} для зразків α -Fe (за рис. 1): 2 — кільцевий надріз, розтяг; 3 — тріщина втоми (вигин) (розраховано за даними S_K , $\sigma_{0,2}$, σ_{NF} (σ_{C0}) по [11]).

Fig. 2. Temperature dependences of indexes of both the strength stability margin, B_r (line 1), and the 'destructive effectiveness' of the SRs, α_{ef} , for α -Fe specimens (by Fig. 1): 2—annular notch at tensile test; 3—fatigue crack under three-point bending (calculated according to the data of S_K , $\sigma_{0,2}$, σ_{NF} (σ_{C0}) by [11]).

крихкого стану, де безпосередньо стикаються у прямій протидії механічні властивості металу (міцність і пластичність у параметрі B_r) і механічні руйнівальні чинники напруженого стану (ефективність руйнувальної дії КН α_{ef}).

Подальша задача полягає у системній аналізі основних чинників, що впливають на параметер критичного резерву міцності B_{rc} для криць різного класу міцності. Для цього автори скористалися результатами експериментальних досліджень з доступних джерел інформації, де наведено дані, потрібні для розрахунку величини α_{ef} (7) і B_r (3) в широкому інтервалі температур для зразків з КН і без КН [11, 12] (табл. 1). Результати випробувань для криць з різним рівнем міцності ($\sigma_{0,2} \approx 150\text{--}1600$ МПа) і резервом стабільності міцності (PCM) ($B_r \approx 1,5\text{--}5,0$) на зразках з кільцевим надрізом за розтягування (п.п. 1–7 табл. 1 по [12]) або на призматичних балках на триточковий вигин з наведеною тріщиною (п.п. 8–16 по [11]) представлено на рис. 3.

Ефективність α_{ef} руйнувальної дії тріщин (лінія 2 рис. 3) помітно вище за α_{ef} для кільцевих надрізів (лінія 1 рис. 3), але ця різниця нівелюється для високоміцних малопластичних криць ($B_r \approx 1,5\text{--}2,0$). В цілому зростання B_r супроводжується підвищенням B_{rc} , особливо на зразках з тріщинами, але для кільцевих надрізів ця тенденція помітна лише для криць з надлишковою високою пластичністю, тобто для низькоміцних криць ($B_r \approx 5,0$, $\sigma_{0,2} \approx 150$ МПа), в той час як у конструкційних криць високої міцності ($B_r \leq 2,5$, $\sigma_{0,2} \approx 1000\text{--}1500$ МПа) руйнівальна ефективність надрізів залишається невисокою ($\alpha_{ef} \leq 1,5$), очевидно, внаслідок недостатньо великого рівня концентрації напружень α_σ в порівнянні з тріщинами.

З наведеної аналізи видно, що резерв механічної стабільності міцності B_r у взаємодії з руйнувальною ефективністю КН (α_{ef}) дійсно відіграє регулювальну роль у окрихченні металу в умовах НСП через критичне значення резерву стабільності міцності B_{rc} . В зв'язку з цим виникає потреба більш детального розгляду цієї проблеми під кутом зору впливу виду НДС на ефективність руйнувальної дії КН (α_{ef}), що є задачею подальших досліджень.

4. ВИСНОВКИ

Стабільність механічного стану в металах означає стабільність їхніх основних механічних властивостей — міцності та пластичності в умовах неоднорідних НДС. Рівень механічної стабільності визначається показником резерву стабільності міцності B_r (зламостійкості), який для конструкційних матеріалів є повноцінним замінником властивостей пластичності.

Поняття механічної стабільності металу набуває принципово важливого значення для визначення поняття крихкості матеріалів

ТАБЛИЦЯ 1. Критичні показники крихкого стану криць під час випробувань на холодостійкість (п.п. 1–7 за даними [11], п.п. 8–16 по [12]).**TABLE 1.** Critical parameters of brittle state of steels during cold resistance tests (rows 1–7—according to [11], rows 8–16—according to [12]).

№	Криця, оброблення	Тип КН	$\sigma_{0,2}$, МПа	$\sigma_{0,2c}$, МПа	B_r	B_{rc} (α_{efc})	T_c , К
1	ст.30	Кільцевий надріз, розтяг	350	800	2.97	1.31	77
2	30ХГСА (г.в. 2000С)		1400	1600	1.58	1.50	150
3	30ХГСА (ізот. г. 3000С)		1500	1600	1.80	1.45	130
4	30ХГСНА (ізот. г. 2000С)		1450	1700	1.77	1.57	83
5	30ХГСНА (ізот. г. 3000С)		1170	1400	2.10	1.36	77
6	10Х2СВА		1600	1700	1.83	1.59	160
7	У8 (г.в. 4000С)		1180	1300	1.58	1.54	200
8	α -Fe	Вигин балки з тріщиною	140	350	5.0	2.77	140
9	У8 (відп.)		340	450	2.8	2.15	220
10	ст.3сп		160	400	3.1	2.10	147
11	10ХСНД		310	420	2.9	2.5	180
12	АК35		1027	1100	2.3	2.0	180
13	12ХН2МДФ ЗШ (лег. Бором $B = 0.0$)		640	700	1.97	1.81	173
14	12ХН2МДФ ЗШ (лег. Бором $B = 0.001$)		640	820	1.80	1.46	175
15	12ХН2МДФ ЗШ (лег. Бором $B = 0.0022$)		640	977	2.00	1.50	65
16	12ХН2МДФ ЗШ (лег. Бором $B = 0.004$)		650	968	2.17	1.67	81

Примітки: г.в. — гартування + відпуск; ізот. г. — ізотермічне гартування, відп. — відпал, ЗШ — зварний шов, В — легування Бором.

у матеріалознавстві: крихкість — це нестабільний механічний стан матеріалу, який проявляється у нестабільності його міцності в умовах неоднорідних НДС через відсутність (у крихких матеріалів) або локальне вичерпання (у металевих стопах) резерву міцності B_r — властивості зламостійкості.

Для металевих матеріалів вузлове значення набуває критичний показник властивості зламостійкості B_{rc} , за якого відбувається перехід від стабільного до нестабільного механічного стану під дією КН (при $T = T_c$).

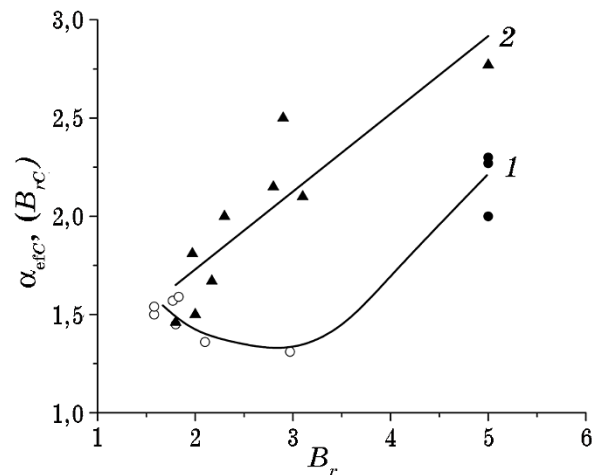


Рис. 3. Залежність показника критичного резерву стабільності міцності криць B_{rc} (α_{efc}) під час переходу до стану крихкості ($T = T_c$) від наявного резерву міцності B_r при $T = 300$ К за даними табл. 1: 1 — розрив за розтягування зразків з кільцевим надрізом ($\circ$ — п.п. 1–7 по [12], $\bullet$ — по [11]); 2 — руйнування зразків з тріщиною за вигину (п.п. 8–16 по [11]).

Fig. 3. Dependence of the index of critical strength stability margin of steels, B_{rc} (α_{efc}), at transition to the state of brittleness ($T = T_c$) on the current strength margin, B_r , at $T = 300$ K, according to the data of Table 1: 1—break at tension of specimens with an annular notch ($\circ$ —lines 1–7 by [12], $\bullet$ —by [11]); 2—fracture of specimens with a crack at bending (lines 8–16 by [11]).

В межах резерву стабільної міцності B_r концентратор напружень як джерело неоднорідності НДС втрачає свою руйнівальну ефективність, закладену в Нейберовому коефіцієнті концентратора напружень α_σ і реалізує істотно зменшену ефективність локальних перенапружень α_{ef} відповідно до критичної величини резерву міцності B_{rc} .

Детальна аналіза закономірностей впливу на ключовий параметер крихкого стану металів B_{rc} головних показників механічних властивостей і основних чинників НДС стає нагальною задачею в подальшому розвитку концепції механічної стабільності металів як стабільності їхніх механічних властивостей.

ЦИТОВАНА ЛІТЕРАТУРА

1. A. N. Stroh, *Proc. Roy. Soc. London A*, **223**, No. 1154: 404 (1954).
2. Ю. Я. Мешков., С. А. Котречко, А. В. Шиян. *Механическая стабильность металлов и сплавов* (Киев: Наукова думка: 2014).
3. С. А. Котречко, Ю. Я. Мешков, *Проблемы прочности*, № 2: 55 (2009).

4. В. Н. Грищенко, Ю. Я. Мешков, Ю. А. Полушкин, А. В. Шиян, *Металлофиз. новейшие технол.*, **37**, № 7: 961 (2015).
5. Ю. Я. Мешков, А. В. Шиян, *Сталь*, № 4: 46 (2018).
6. Ю. Я. Мешков, А. В. Шиян, *Сталь*, № 12: 52 (2019).
7. А. В. Шиян, Ю. Я. Мешков, *Металлофиз. новейшие технол.*, **41**, № 6: 775 (2019).
8. Ю. Я. Мешков, Г. А. Пахаренко. *Структура металла и хрупкость стальных изделий* (Киев: Наукова думка: 1985).
9. Р. Петерсон. *Коэффициенты концентрации напряжений* (Москва: Мир: 1977) (пер. з англ.).
10. Г. Н. Савин, В. И. Тульчин. *Справочник по концентрации напряжений* (Киев: Вища школа: 1976).
11. П. Ф. Кошелев, С. Е. Беляев, *Прочность и пластичность конструкционных материалов при низких температурах* (Москва: Машиностроение: 1967).
12. А. В. Шиян, *Физическая природа локального напряжения хрупкого разрушения сталей и сварных швов* (Автореф. дис. канд. физ.-мат. наук) (Киев: Институт металлофизики АН УССР: 1990).

REFERENCES

1. A. N. Stroh, *Proc. Roy. Soc. London A*, **223**, No. 1154: 404 (1954).
2. Yu. Ya. Meshkov, S. A. Kotrechko, and A. V. Shiyani, *Mekhanicheskaya Stabilitnost' Metallov i Splavov* (Kiev: Naukova Dumka: 2014) (in Russian).
3. S. A. Kotrechko and Yu. Ya. Meshkov, *Problemy Prochnosti*, No. 2: 55 (2009).
4. V. N. Grishchenko, Yu. Ya. Meshkov, Yu. A. Polushkin, and A. V. Shiyani, *Metallfiz. Noveishie Tekhnol.*, **37**, No. 7: 961 (2015) (in Russian).
5. Yu. Ya. Meshkov and A. V. Shiyani, *Stal'*, No. 4: 46 (2018) (in Russian).
6. Yu. Ya. Meshkov and A. V. Shiyani, *Stal'*, No. 12: 52 (2019) (in Russian).
7. V. Shiyani and Yu. Ya. Meshkov, *Metallfiz. Noveishie Tekhnol.*, **41**, No. 6: 775 (2019) (in Russian).
8. Yu. Ya. Meshkov and G. A. Pakhareno, *Struktura Metalla i Khrupkost' Stal'nykh Izdeliy* (Kiev: Naukova Dumka: 1985) (in Russian).
9. R. Peterson, *Koeffitsienty Kontsentratsii Napryazheniy* (Moskva: Mir: 1977) (Russian translation).
10. G. N. Savin and V. I. Tul'chin, *Spravochnik po Kontsentratsii Napryazheniy* (Kiev: Vyshcha Shkola: 1976) (in Russian).
11. P. F. Koshelev and S. E. Belyaev, *Prochnost' i Plastichnost' Konstruktsionnykh Materialov pri Nizkikh Temperaturakh* (Moskva: Metallurgiya: 1967) (in Russian).
12. A. V. Shiyani, *Fizicheskaya Priroda Lokalnogo Napryazheniya Khrupkogo Razrusheniya Staley i Svarnykh Shvov* [The Physical Nature of the Local Stress of Brittle Fracture of Steels and Welds] (Thesis of Dissert. for Cand. Phys.-Math. Sci.) (Kiev: Institute for Metal Physics, Academy of Sciences of Ukr.SSR: 1990) (in Russian).

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

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

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

2) через Internet:

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

(передплатний індекс МНТ: 74312) або ж

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

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

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

Код банку: 820172

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

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

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

Код призначення платежу: 25010100

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

ПІДСТАВА: передплата 100%.

INFORMATION FOR FOREIGN SUBSCRIBERS

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

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

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

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

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

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

currency account No. UA603223130000025308000000067, MFO 322313,

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

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

Prepayment is 100%.

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

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

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

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

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