

УДК 669.15-194.56:532.739.2

ПРОГНОЗИРОВАНИЕ РАЗМЕРА КАРБОНИТРИДНЫХ ЧАСТИЦ СЛОЖНОГО СОСТАВА ПРИ ГОРЯЧЕЙ ДЕФОРМАЦИИ НИЗКОЛЕГИРОВАННОЙ СТАЛИ

^{1,2}Попов В.В., ^{1,2}Горбачев И.И., ¹Пасынков А.Ю.

¹Институт физики металлов им. М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург;

²ФГБОУ ВО «Уральский государственный экономический университет», Екатеринбург,
e-mail: vpopov@imp.uran.ru

Предложена модель для описания эволюции нескольких ансамблей карбонитридных частиц сложного состава в низколегированной стали при горячей деформации в температурном диапазоне стабильного аустенита. В модели учитывается взаимное влияние изменения при деформации таких структурных параметров, как плотность дислокаций, средний размер зерна аустенита (с учетом релаксационных процессов рекристаллизации и возврата, а также процессов выделения вторых фаз), и эволюции карбонитридных фаз. Модель также учитывает полидисперсность ансамблей выделений. В основе метода лежит совместное использование деформационной модели на основе так называемого метода «внутренней переменной» и разработанной нами ранее кинетической модели для описания эволюции вторых фаз в многофазных многокомпонентных системах. Основными особенностями кинетической модели является возможность моделирования поведения выделений комплексного состава, а также совместной эволюции ансамблей выделений нескольких составов (с учетом образования новых зародышевых центров). На основе модели создана программа, с помощью которой выполнены расчеты для стали, низколегированной ниобием и титаном, для двух термомеханических обработок. Полученные результаты сопоставлялись с экспериментальными данными, где было показано их удовлетворительное согласие.

Ключевые слова: компьютерное моделирование, эволюция выделений, многокомпонентные системы, аустенитизация, горячая деформация

PREDICTING THE SIZE OF CARBONITRIDE PARTICLES OF COMPLEX COMPOSITION IN HOT DEFORMATION OF LOW-ALLOYED STEEL

^{1,2}Popov V.V., ^{1,2}Gorbachev I.I., ¹Pasyнков A.Yu.

¹M.N. Mikheev Institute of Metal Physics Ural Branch of RAS, Ekaterinburg;

²Ural State University of Economics, Ekaterinburg, e-mail: vpopov@imp.uran.ru

A model has been proposed for describing the evolution of several ensembles of carbonitride particles with complex compositions in alloyed steel upon hot deformation in the temperature range of stable austenite. In the model the mutual influence of changes upon deformation in structural parameters such as dislocation density and average austenite-grain size (with allowance for relaxation processes of recrystallization and recovery and precipitation processes of second phases) and the evolution of carbonitride phases have been considered. Likewise, the model takes into account the polydispersity of ensembles of precipitates. The method is based on joint use of the deformation model and the kinetic model of precipitates evolution in multiphase multicomponent systems with consideration of nucleation developed by us earlier. The deformation model is based on the so-called «internal variable» method. Main features of our kinetic model are ability to simulate the behavior of complex composition precipitates and cooperative evolution of precipitate ensembles of several compositions (taking into account the formation of new nucleation centers). On the basis of the model, a program was created that used calculations for steel, low-alloyed niobium and titanium for two thermomechanical treatments. The results of calculations have been compared with the experimental data obtained in steel microalloyed with niobium and titanium.

Keywords: precipitate evolution, computer simulation, nucleation, multicomponent system, austenitizing, hot deformation

В настоящее время существует два основных подхода к моделированию структуры и конечных механических свойств стали после термомеханической обработки. Первый подход применяет полуэмпирические модели, которые определяют связь между внешними параметрами процесса деформации (такими как температура, скорость и степень деформации) и получаемой микроструктурой [1, 2], используя ряд подгоночных параметров. Хотя такой подход относительно прост в реализации, но из-за слабой физической основы даёт неплохие

результаты лишь при небольших отклонениях от условий, при которых были получены подгоночные параметры модели.

Во втором подходе для описания процессов, происходящих во время термомеханической обработки, используются не только «внешние» переменные процесса, но и переменные, описывающие внутреннее состояние материала – плотность дислокаций, размер субзерен и т.п. [3–5]. В моделях такого типа большинство применяемых констант имеет физический смысл, поэтому они являются более перспективными.

Однако существенным недостатком обеих подходов является то, что они либо абсолютно не учитывают влияние ансамбля выделений вторых фаз (в том числе карбонитридных) на эволюцию структуры при термомеханической обработке, либо учитывает её косвенно, либо в лучшем случае на очень упрощённом уровне. Между тем карбонитридообразующие элементы могут оказывать значительное влияние на кинетику рекристаллизации и вносят свой вклад в упрочнение материала по механизму дисперсионного твердения.

В наших предыдущих исследованиях [6, 7] была предложена модель для описания эволюции выделений нескольких составов на всех стадиях процесса, начиная с зарождения и заканчивая коагуляцией. В работе [7] были совместно использованы эта модель [6] и деформационная модель для описания изменения размера зерна аустенита сталей, микролегированных сильными карбонитридообразующими элементами, при горячей деформации в температурном диапазоне стабильного аустенита. Однако этот подход, позволяющий прогнозировать эволюцию выделений при горячей деформации, не был подробно разобран и протестирован. Это является целью настоящей работы.

Модель

Для моделирования процессов, протекающих при деформации и после нее, в нашем подходе учитывается взаимное влияние плотности дислокаций в материале, среднего размера аустенитного зерна и характеристик ансамбля карбонитридных выделений.

Для описания эволюции плотности дислокаций в материале рассчитывается изменение средней плотности дислокаций в сплаве $\bar{\rho}$, которая связана с плотностью дислокаций в деформированных и рекристаллизованных зёрнах, ρ_0 , соотношением

$$\bar{\rho} = (1 - X)\rho_{Def} + X\rho_0, \quad (1)$$

где X – доля материала, претерпевшего рекристаллизацию.

При этом использовалось модельное допущение о том, что ρ_{Def} одинакова во всех деформированных зёрнах, а ρ_0 полагалась постоянной величиной. Таким образом, изменение средней плотности дислокаций в материале можно записать как

$$\frac{d\bar{\rho}}{dt} = (\rho_0 - \rho_{Def})\frac{dX}{dt} + (1 - X)\frac{d\rho_{Def}}{dt}. \quad (2)$$

Здесь t – время, а dX/dt – скорость рекристаллизации.

Для вычисления ρ_{Def} в процессе деформации был использован подход, предло-

женный в работе [3]. При этом было использовано допущение, что статические и динамические процессы возврата и рекристаллизации описываются одинаковыми выражениями.

Выражение для изменения плотности дислокаций в деформированном материале имеет вид [4]:

$$\frac{d\rho_{Def}}{dt} = \frac{\dot{\epsilon}}{bd} - k\dot{\epsilon}\rho_{Def}, \quad (3)$$

где $\dot{\epsilon}$ – скорость деформации, b – вектор Бюргерса, d – длина свободного пробега дислокации, k – коэффициент динамического возврата, t – время.

Согласно [8] доля материала, претерпевшего рекристаллизацию, как функция скорости миграции границ зерен v_b и скорости образования зародышей рекристаллизации \dot{N} , может быть представлена в виде

$$X = 1 - \exp\left(-\frac{\pi}{3}\dot{N}v_b^3t^4\right). \quad (4)$$

Чтобы учесть влияние выделений вторых фаз при описании скорости миграции границы зерна, рассматривается суперпозиция сил, действующих на границу зерна аустенита. В этом случае скорость миграции границы описывается выражением [8]:

$$v_b = m(P_d - P_z), \quad (5)$$

где m – подвижность границ зерен, P_d – движущая сила роста зерна, которая задается как давление на единицу площади границы зерна; P_z – тормозящая сила, препятствующая миграции и действующая со стороны частиц.

Скорость зарождения \dot{N} новых зёрен для динамической рекристаллизации рассчитывалась по формуле [8]:

$$\dot{N} = A\dot{\epsilon}\exp\left(-\frac{Q_n}{RT}\right), \quad (6)$$

где A – константа, зависящая от температуры, Q_n – энергия активации образования зародышей, T – абсолютная температура, R – универсальная газовая постоянная. Согласно [8] $Q_n = 260$ кДж/моль. В работе [8] были определены значения A для трех температур. Обработка этих результатов позволила получить следующее выражение для температурной зависимости A :

$$A = 2,26 \cdot 10^{-5} \cdot \exp\left(\frac{72520}{T}\right). \quad (7)$$

Выражение (6) описывает скорость зарождения только при динамической рекристаллизации. Образованием новых зародышей при статической рекристаллизации в данной работе мы пренебрегали. Это до-

пущение не должно вносить существенной погрешности, если уже прошла динамическая рекристаллизация.

Подвижность высокоугловых границ зерен m зависит от температуры и может быть описана аррениусовской зависимостью [8]:

$$m = m_0 \exp\left(-\frac{Q}{RT}\right), \quad (8)$$

где m_0 – предэкспоненциальный множитель; Q – энергия активации движения границы. Согласно [8] $m_0 = 120 \text{ м}^4/(\text{Дж}\cdot\text{с})$, $Q = 310 \text{ кДж/моль}$.

Рост рекристаллизованных зерен зависит от разности плотностей дислокаций в рекристаллизованных, ρ_{Rex} и деформированных зернах, ρ_{Def} таким образом, движущая сила может быть определена как

$$P_d = \tau(\rho_{\text{Def}} - \rho_{\text{Rex}}) + \frac{4\gamma}{D}, \quad (9)$$

где γ – удельная энергия границы зерна, равная $0,5 \text{ Дж/м}^2$ [8], а $\tau = Gb^2/2$ – энергия дислокации, приходящаяся на единицу ее длины.

Плотность дислокаций в рекристаллизованных зернах предполагалась равной равновесной плотности дислокаций для заданной температуры, которая рассчитывалась как [9]:

$$\rho_0 = \left[1,68 \cdot 10^9 \cdot \exp\left(\frac{5020}{RT}\right)\right]. \quad (11)$$

Дисперсные частицы тормозят движение границы зерна. Тормозящая сила P_z , действующая со стороны сферических частиц, распределенных случайным образом в матрице, выражается как [10]:

$$P_z = \frac{3\gamma}{2} \sum_i (F_i / R_i), \quad (12)$$

где F_i – объемная доля, приходящаяся на частицы со средним радиусом R_i из i -го размерного интервала. Критическая плотность дислокаций, необходимая для начала рекристаллизации, согласно работе [11], определяется как

$$\rho_{cr} = \left[\frac{20\gamma\dot{\epsilon}}{3blm\tau^2}\right]^{1/3}. \quad (13)$$

Более подробное описание той части нашей модели, которая касается изменения среднего размера зерна и плотности дислокаций в материале, дано в работе [7].

Для расчета скорости рекристаллизации необходимы данные о характеристиках ансамбля выделений вторых фаз – их объемных долях и распределении по размерам. Эту информацию обеспечивает кинетическая часть модели [6]. Входными

данными для неё являются составы сплава и карбонитридных фаз, а также объемные доли выделений и распределения частиц по размерам в текущий момент времени для каждой фазы. Кроме того, в качестве входного параметра здесь используется средняя плотность дислокаций в образце, ρ , которая необходима для расчёта скорости зарождения новых выделений. На основании этих параметров прогнозируется последующее изменение объёмных долей и распределение по размерам карбонитридных частиц. Более подробно кинетическая модель описана в работе [6].

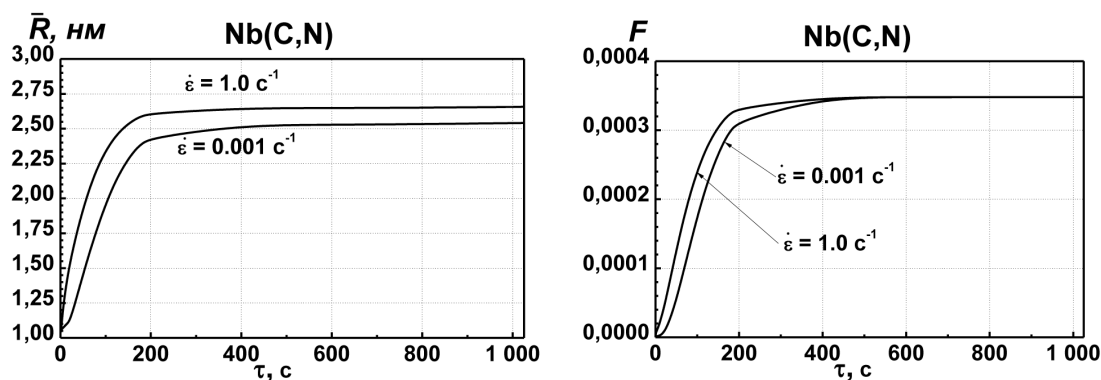
Выбор исходных данных для моделирования

Для оценки возможностей прогнозирования размера карбонитридных выделений в сталях, подвергаемых деформации в аустенитной области, с помощью предложенного алгоритма было выполнено сравнение результатов расчетов с экспериментальными данными, взятыми из работы [12]. В этой работе с помощью методики углеродных реплик и просвечивающей электронной микроскопии получали информацию о составе и морфологии частиц, характере их распределения в образце и среднем размере выделений после нескольких термомеханических обработок низколегированной стали. Исследования были выполнены на углеродистой низколегированной стали с Ti и Nb, химический состав которой приведен в таблице.

Состав исследуемой стали, мас. % [12]

C	Cr	Ti	Nb	N	Ni
0,16	1,64	0,002	0,031	0,012	1,56

Образцы, вырезанные из промышленной заготовки, сначала подвергались выдержке при $1250 \text{ }^\circ\text{C}$ в течение 600 с, затем часть образцов закаляли и изучали фазовый состав и размер карбонитридных частиц. Остальные образцы охлаждали со скоростью $200 \text{ }^\circ\text{C}$ в минуту до температуры деформации в $900 \text{ }^\circ\text{C}$. Затем часть образцов подвергали деформации со скоростью 1 с^{-1} , а часть со скоростью $0,001 \text{ с}^{-1}$ до достижения степени деформации 1, после чего шла изотермическая выдержка при температуре деформации. Продолжительность цикла, включающего деформацию образцов с заданной скоростью и последующую изотермическую выдержку при температуре деформации, составляла 1025 с для обеих обработок. Затем образцы закалялись, после чего также изучалось состояние ансамбля карбонитридных частиц.



Изменение объемной доли F и среднего радиуса \bar{R} фазы $NbCN$ при термомеханических обработках со скоростями деформации 1 c^{-1} и $0,001\text{ c}^{-1}$ для температуры $900\text{ }^\circ\text{C}$

В качестве исходного состояния для моделирования мы брали состояние образца после аустенизации при $1250\text{ }^\circ\text{C}$. Авторы работы [12] сообщают, что в данной стали после выдержки в течение 600 c при температуре $1250\text{ }^\circ\text{C}$ обнаруживаются богатые титаном частицы со средним размером 22 nm . После цикла, включающего деформацию со скоростью 1 c^{-1} и отжиг, в стали присутствуют выделения, большая часть которых близка по составу к карбонитриду ниобия, со средним радиусом 5 nm . После такого же цикла, но с меньшей скоростью деформации в $0,001\text{ c}^{-1}$ в стали присутствуют частицы со средним радиусом $3,5\text{ nm}$, подавляющее большинство которых близко по составу к карбонитриду ниобия.

Объемные доли выделений не измерялись в [12]. Они были оценены нами с помощью программы IMP Equilibrium, предназначенной для термодинамических расчетов и созданной на основе алгоритма, предложенного в [13].

Исходной точкой для моделирования является момент времени, когда выдержка при $1250\text{ }^\circ\text{C}$ закончена и образцы охладили до $900\text{ }^\circ\text{C}$. Предполагалось, что фазовый состав в этом случае соответствует равновесному фазовому составу для температуры $1250\text{ }^\circ\text{C}$. В результате термодинамических расчетов было определено, что в равновесии с аустенитом находится карбонитрид, близкий по составу к нитриду титана с составом $(Ti_{0,95}, Nb_{0,05})(C_{0,013}, N_{0,987})_{0,98}$, массовая доля которого составляет $0,00249\%$. Средний радиус частиц был принят найденным из эксперимента – 22 nm , а распределение частиц по размерам задавалось как нормальное. Что касается второго карбонитрида – на основе карбида ниобия, – то предполагалось, что после быстрого охлаждения образца до $900\text{ }^\circ\text{C}$ он ещё не успел выделиться в замет-

ном количестве, а будет зарождаться и расти при моделировании дальнейшей обработки (деформации и изотермической выдержки). Состав этой фазы был взят согласно термодинамическим расчетам – $Nb(C_{0,68}, N_{0,32})_{0,97}$.

Результаты расчетов

При моделировании воспроизводились две обработки из работы [12]: первая представляла собой деформацию со скоростью 1 c^{-1} до достижения степени деформации 1 при температуре $900\text{ }^\circ\text{C}$ суммарной продолжительностью 1025 секунд, а вторая отличалась от нее скоростью деформации, которая была $0,001\text{ c}^{-1}$. На рисунке приведены расчётные графики изменения среднего радиуса частиц и объемных долей карбонитрида ниобия для двух обработок.

На рисунке видно, что объемная доля растет быстрее, достигая равновесного значения, при скорости деформации в 1 c^{-1} , чем при меньшей скорости деформации. Так же во время деформации с большей скоростью образуются более мелкие частицы. Это можно объяснить тем, что при большей скорости деформации в материале образуются больше дислокаций, которые являются предпочтительными местами зарождения и, как следствие, на них образуется больше частиц. Чем активнее в начальный момент времени идет выделение частиц (которое зависит от дефектности структуры), тем меньше степень пересыщения твердого раствора и тем медленнее частицы растут во время последующего отжига.

Графики эволюции карбонитрида на основе TiN не приводятся, поскольку эта фаза термодинамически устойчива и ее объемная доля и размер частиц практически не изменяются во время изотермической выдержки. Кроме того, вклад этой фазы в средний радиус всех частиц, получаемый к концу

обработок, незначителен. Таким образом, средний радиус частиц будет определяться, прежде всего, эволюцией карбонитридной фазы NbCN.

Средний радиус частиц в [12] к концу термомеханической обработки со скоростью деформации 1 с^{-1} составлял 5 нм, в то время как в наших расчетах он получился 2,65 нм. Для скорости деформации $0,001 \text{ с}^{-1}$ средний радиус частиц составил 3,5 нм в эксперименте и 2,4 нм в расчетах. В целом полученные при помощи моделирования оценки размеров карбонитридных выделений удовлетворительно согласуются с экспериментальными данными.

Заключение

Предложен метод для моделирования эволюции ансамблей карбонитридных выделений комплексного состава при деформации легированной стали в аустенитной области. В основе метода лежит совместное использование моделей, описывающих кинетику, изменение плотности дислокаций при деформации и скорость рекристаллизации, с предложенной нами ранее моделью для описания эволюции карбонитридных выделений. На основе предложенного метода проведено моделирование эволюции ансамблей карбонитридных фаз нескольких составов при деформации и последующей выдержке. Сравнение результатов с экспериментальными данными показало их удовлетворительное согласие.

Работа выполнена в рамках государственного задания по теме «Спин» № АААА-А18-118020290104-2 при поддержке программы фундаментальных исследований УрО РАН (проект № 18-10-2-37).

Список литературы

1. Madej L., Sitko M., Pietrzyk M. Perceptive comparison of mean and full field dynamic recrystallization models // Archives of Civil and Mechanical Engineering. 2016. V. 16. P. 569–589.
2. Quan L., Zheng-dong L., Guang-bo T., Zhi-ling T., Siciliano F. Mathematical model of microstructure evolution of X60 line pipe steel during CSP hot rolling // Journal of iron and steel research. 2010. V. 17 No. 1. P. 70–78.
3. Sandstrom R., Lagneborg R. A Model for Hot Working Occurring by Recrystallization // Acta Metall. 1975. V. 23. P. 387–398.
4. Vinogradov A., Estrin Y. Analytical and numerical approaches to modelling severe plastic deformation // Progress in Materials Science. 2018. V. 95. P. 172–242.
5. Buken H., Kozeschnik E. State parameter-based modelling of microstructure evolution in micro-alloyed steel during hot forming // IOP Conference Series: Materials Science and Engineering. 2016. V. 119. P. 1–9.
6. Popov V.V., Gorbachev I.I., Pasyнков A.Yu. Simulation of precipitates evolution in multiphase multicomponent systems with consideration of nucleation // Phil. Mag. 2016. V. 96. P. 3632–3653.
7. Горбачёв И.И., Пасынков А.Ю., Попов В.В. Моделирование влияния горячей деформации на размер аустенитного зерна низколегированных сталей с карбонитридным упрочнением // Физика металлов и металловедение. – 2018. – № 6. – С. 582–591.
8. Timoshenkov A., Warczok P., Albu M., Klarner J., Kozeschnik E., Bureau R., Sommitsch C. Modelling the dynamic recrystallization in C-Mn micro-alloyed steel during thermomechanical treatment using cellular automata // Comput. Mater. Sci. 2014. V. 24. P. 85–94.
9. Liu W.J., Jonas J. Nucleation kinetics of Ti carbonitride in microalloyed austenite. Metall. Trans. 1989. V. A 20. P. 689–697.
10. Горбачёв И.И., Пасынков А.Ю., Попов В.В. Прогнозирование размера аустенитного зерна микрелегированных сталей на основе моделирования эволюции карбонитридных выделений // Физика металлов и металловедение. – 2015. – Т. 116, № 11. – С. 1184–1191.
11. Hallberg H., Wallin M., Ristinmaa M. Simulation of discontinuous dynamic recrystallization in pure Cu using a probabilistic cellular automaton // Computational Materials Science. 2010. V. 49. P. 25–34.
12. Springer P., Prah U. Pinning effect of strain induced Nb(C,N) on case hardening steel under warm forging conditions // Journal of Materials Processing Tech. 2018. P. 121–133.
13. Попов В.В., Горбачев И.И. Анализ растворимости карбидов, нитридов и карбонитридов в сталях методами компьютерной термодинамики. I. Описание термодинамических свойств. Метод расчета // Физика металлов и металловедение. – 2004. – Т. 98, № 4. – С. 11–21.