

## ЧЕБЫШЕВСКИЙ СБОРНИК

Том 21. Выпуск 4.

---

УДК 51-74

DOI 10.22405/2226-8383-2020-21-4-333-339

### **К вопросу о роли математических вычислений в экспертном исследовании процессов структурообразований и фазовых превращений в металлических материалах**

О. В. Кузовлева, А. Е. Гвоздев, А. В. Маляров

**Ольга Владимировна Кузовлева** — кандидат технических наук, доцент, Российский государственный университет правосудия (г. Москва).

*e-mail: kusovleva@yandex.ru*

**Александр Евгеньевич Гвоздев** — доктор технических наук, профессор, Тульский государственный педагогический университет им. Л. Н. Толстого (г. Тула).

*e-mail: gwozdew.alexandr2013@yandex.ru*

**Андрей Викторович Маляров** — инженер, Тульский государственный педагогический университет им. Л. Н. Толстого (г. Тула).

*e-mail: vascko.andr@yandex.ru*

#### **Аннотация**

В статье проиллюстрирована роль математики в исследованиях в области технических наук, посвящённых изучению свойств металлических материалов на примере титана.

*Ключевые слова:* зародыши, изучение, металл, наука, свойства, теория, фазовое превращение.

*Библиография:* 19 названий.

#### **Для цитирования:**

О. В. Кузовлева, А. Е. Гвоздев, А. В. Маляров. К вопросу о роли математических вычислений в экспертном исследовании процессов структурообразований и фазовых превращений в металлических материалах // Чебышевский сборник, 2020, т. 21, вып. 4, с. 333–339.

## CHEBYSHEVSKII SBORNIK

Vol. 21. No. 4.

UDC 51-74

DOI 10.22405/2226-8383-2020-21-4-333-339

**On the role of mathematical calculations in the expert study of the processes of structure formation and phase transformations in metal materials**

O. V. Kuzovleva, A. E. Gvozdev, A. V. Malyarov

**Olga Vladimirovna Kuzovleva** — candidate of technical Sciences, docent, Russian State University of justice (Moscow).

*e-mail: kusovleva@yandex.ru*

**Alexander Evgenievich Gvozdev** — doctor of engineering, Professor, Tula State Pedagogical University L. N. Tolstoy (Tula).

*e-mail: gvozdev.alexandr2013@yandex.ru*

**Andrey Viktorovich Malyarov** — engineer, Tula State Pedagogical University L. N. Tolstoy (Tula).

*e-mail: vascko.andr@yandex.ru*

**Abstract**

The article illustrates the role of mathematics in research in the field of technical Sciences, devoted to the study of the properties of metallic materials on the example of titanium.

*Keywords:* embryos, study, metal, science, properties, theory, phase transformation.

*Bibliography:* 19 titles.

**For citation:**

O. V. Kuzovleva, A. E. Gvozdev, A. V. Malyarov 2020, “On the role of mathematical calculations in the expert study of the processes of structure formation and phase transformations in metal materials”, *Chebyshevskii sbornik*, vol. 21, no. 4, pp. 333–339.

**1. Введение**

Математика является одной из древнейших наук. Она присутствует в самых различных сферах деятельности человека — в строительстве, экономике, и пересекается с другими науками — статистикой, физикой, астрономией.

Математика — точная наука. В ней и в настоящее время совершаются открытия, которые позволяют двигать вперёд и другие области науки.

Особенно велика роль математики в технических науках. Примером может служить изучение закономерностей изменения свойств металлов и сплавов в интервале критических температур — фазовых превращений, которые имеют большое значение в экспертном исследовании металлов и сплавов, в металловедении и термической обработке металлов и сплавов, т.к. влияют на процессы структурообразования металлических систем, на их механические и структурные свойства и определяют ресурс деталей и конструкций, изготовленных из сталей и сплавов [1].

## 2. Основной текст статьи

В ряде работ [2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9] с целью изучения изменения свойств металлов в интервале до температуры фазового перехода выдвигается гипотеза о вкладе объёмной доли зародышей в изменение свойств металлических материалов при определённых условиях. Для того, чтобы показать особое место математических вычислений при изучении свойств материалов, ниже приводится расчёт количества зародышей новой фазы.

Работу образования зародыша критической величины  $\Delta F_{g_o}$  оценим как  $\frac{1}{3}$  поверхностной энергии зародыша [10]:

$$\Delta F_{g_o} = \frac{1}{3}\beta \cdot g_o^{\frac{2}{3}}. \quad (1)$$

Поскольку размер зародыша  $g_o$  зависит от температуры, то и  $\Delta F_{g_o}$  оказывается различной для разных степеней переохлаждения.

Для расчёта величины работы образования зародыша критической величины оценим энергию поля упругих напряжений  $E_{упр}$ , возникающих при образовании зародыша новой фазы.

Согласно данным [11] с учётом дифференцирования упругая энергия при фазовом превращении составит:

$$\frac{\partial E_{упр}}{\partial g} g_o = \frac{6Gg_o\varepsilon^2}{1 + \frac{4}{3}G\chi}, \quad (2)$$

где  $G$  — модуль сдвига матрицы;  $\varepsilon$  — параметр размерного несоответствия;  $\chi$  — коэффициент сжимаемости.

Оценка по формуле (2) выполнена для  $T = 1100 K$ , при этом  $g_o = 216$  атомов (максимальная величина зародыша):

$$\frac{\partial E_{упр}}{\partial g} g_o \approx 21 \cdot 10^{-28} \text{ Дж.}$$

С ростом степени переохлаждения работа образования зародыша критической величины уменьшается, как и предсказывает флуктуационная теория зарождения [12, 13, 14, 15].

Далее рассчитывали число зародышей критического размера  $g_o$  при фиксированных температурах. Принимали число возможных мест для появления зародыша  $N = 10^{28} \text{ м}^{-3}$ , т.е. делали допущение, что зародыш может возникнуть в каждой элементарной ячейке.

$N \approx \frac{1}{a^3}$ , где  $a$  — период кристаллической решётки.

Расчёт объёмной доли зародышей проведём на примере титана. Для оценки количества зародышей в 1 моле вещества число зародышей в  $1 \text{ м}^3$  умножили на объём моля титана. Учитывали, что число всех атомов в 1 моле вещества равно числу Авогадро  $N_a = 6,023 \cdot 10^{23}$ .

Для температуры  $810 K$ , при которой начинается отклонение теплоёмкости титана от линейной зависимости, объёмная доля зародышей  $\beta$ -фазы титана составляет:

$$V_{810}^{\beta} = \frac{V_a g_o n_{g_o}}{N_a V_a} = \frac{12,19 \cdot 10^{-30} \cdot 64 \cdot 10^{13}}{6,023 \cdot 10^{23} \cdot 12,19 \cdot 10^{-30}} = 0,1 \cdot 10^{-8}.$$

Для температуры  $1100 K$  накопленное количество зародышей равно  $1,5 \cdot 10^{15}$ . В качестве размера зародыша в этих условиях принимали среднее количество атомов в зародышах критической величины, равное 132.

Таким образом, в интервале  $800 \dots 1156$  система может «накопить» объёмную долю зародышей  $\beta$ -фазы, равную:

$$V^{\beta} = \frac{12,19 \cdot 10^{-30} \cdot 132 \cdot 1,5 \cdot 10^{15}}{6,023 \cdot 10^{23} \cdot 12,19 \cdot 10^{-30}} = 0,3 \cdot 10^{-6}.$$

Приведенные оценки свидетельствуют о том, что полученные малые значения объёмной доли зародышей новой фазы не могут повлиять на существенное уменьшение теплоёмкости титана вблизи температуры фазового превращения, которое наблюдается при проведении экспериментов.

Такой вывод хорошо согласуется с классическим представлением в термодинамике о том, что при фазовых переходах I рода свойства решётки изменяются скачком только в точке превращения, а до и после неё характеризуются определённой температурной зависимостью.

Полученные результаты могут найти применение при создании ресурсосберегающих технологий обработки конструкционных и инструментальных металлических и композиционных материалов с учётом рекомендаций авторов работ [16–19].

### 3. Заключение

Приведённые вычисления свидетельствуют о том, что полученное количество зародышей является недостаточным, чтобы привести к изменениям, происходящим в кристаллической решётке металла.

Для объяснения скачкообразного изменения теплоёмкости титана возникновением и ростом зародышей новой фазы задолго до температуры фазового превращения объёмная доля таких зародышей вблизи начала фазового перехода должна иметь гораздо более высокое значение.

### СПИСОК ЦИТИРОВАННОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

1. Гераськин М. Ю. Использование метода коэрцитиметрии при исследовании холоднодеформированных стальных изделий для установления очага пожара // М.Ю. Гераськин, Л.В. Дашко, Г.В. Плотникова, А.А. Шеков // Судебная экспертиза. – 2019. – № 2. – С. 80–91.
2. Новиков И. И. Особые состояния металлических кристаллов / И. И. Новиков // Металлы. – 1997. – № 1. – С. 65–69.
3. Эстрин Э. И. Механические свойства высокоуглеродистой легированной стали вблизи температуры фазового превращения / Э. И. Эстрин, Б. М. Могутнов // ДАН РАН. – 2004. – Т. 397. – № 3. – С. 330–333.
4. Гвоздев А. Е. Об эффекте сверхпластичности сталей и сплавов / А. Е. Гвоздев, О. В. Кузовлева, Н. Е. Стариков, А. С. Пустовгар // Доклады II международной конференции «Деформация и разрушение материалов и наноматериалов». – Москва, 2007. – С.68–70.
5. Гвоздев А. Е. Анализ закономерностей экстремальных эффектов при фазовых переходах в металлических сплавах с помощью разработанного экспериментального программного комплекса // А. Е. Гвоздев, О. В. Кузовлева, Н. Е. Стариков [и др.]. – Электронное издание № 14225 от 12.09.2008. № гос. рег. 0320801998. – 1 эл. опт. диск (CD-ROM). – www.infoereg.ru.
6. Блантер М. Е. Аномальные изменения свойств сплавов в процессе фазовых превращений / М. Е. Блантер, А. К. Машков // МиТОМ. – 2002. – № 1. – С. 6–10.
7. Гвоздев А. Е. Деформация, структурообразование и разрушение стали Р6М5 / А. Е. Гвоздев, О. В. Кузовлева, А. В. Кондрашина // Деформация и разрушение материалов. – 2007. – №8. – С. 25–31.

8. Кузовлева О.В. Аномальные изменения структуры и свойств металлов и сплавов при термомеханических воздействиях в состоянии предпревращения // Под ред. д-ра техн. наук, проф. А.Е. Гвоздева. – Тула: Изд-во ТулГУ, 2012. 266 с.
9. Состояние предпревращения, механическая нестабильность и сверхпластичность сталей и сплавов / А.Е. Гвоздев, О.В. Кузовлева, А.Н. Сергеев, А.Н. Чуканов и др. // VII Международная конференция «Деформация и разрушение материалов и наноматериалов»: сб. материалов. Москва, 7-10 ноября 2017 г. М: ИМЕТ РАН, 2017. С. 78–80.
10. Гуляев А.П. Образование аустенита в низкоуглеродистых сталях (современное состояние вопроса) / А.П. Гуляев // МиТОМ. – 1989. – № 8. – С. 21–24.
11. Хачатурян А.Г. Теория фазовых превращений и структура твёрдых растворов. – М.: Наука, 1974. – 384 с.
12. Воробьёв В.Г. Аномальные свойства металлических веществ во время протекания внутренних превращений и их техническое значение / В.Г. Воробьёв // Известия ВУЗов. Машиностроение. – 1960. – № 8. – С. 120–131.
13. Гуляев А.П. Состояние предпревращения в сплавах железа / А.П. Гуляев // Металловедение и термическая обработка металлов. – 1991. – № 6. – С. 7–9.
14. Новиков И.И. Особые состояния металлических кристаллов / И.И. Новиков // Металлы. – 1997. – № 1. – С. 65–69.
15. Эстрин Э.И. О природе пластичности при полиморфных превращениях / Э.И. Эстрин // Физика металлов и материаловедение. – 2006. – Т. 102. – № 1. – С. 123–128.
16. Шоршоров, М.Х., Гвоздев, А.Е., Афанаскин, А.В., Гвоздев, Е.А. 2002, «Расчёт кластерной структуры расплава, её влияние на образование наноаморфных твердых фаз и их структурную релаксацию при последующем нагреве», Металловедение и термическая обработка металлов, №6, С. 12–16.
17. Гвоздев А.Е. 2019. Экстремальные эффекты прочности и пластичности в металлических высоколегированных слитковых и порошковых системах. 2-е изд., испр. и доп. Изд-во ТулГУ, 476 с.
18. Кузовлева О.В., Гвоздев А.Е., Тихонова И.В., Сергеев Н.Н., Бреки А.Д., Стариков Н.Е., Сергеев А.Н., Калинин А.А., Малий Д.В., Титова Ю.Е., Александров С.Е., Крылов Н.А. 2016. О состоянии предпревращения металлов и сплавов. Тула: Изд-во ТулГУ, 245 с.
19. Sergeev, N.N., Minaev, I.V., Tikhonova, I.V., Gvozdev, A.E., Kolmakov, A.G., Sergeev, A.N., Kutepov, S.N., Malii, D.V. 2020, «Selecting Laser Cutting Modes for Engineering Steel Sheets Aiming at Provision of the Required Properties of Surface Quality», Inorganic Materials: Applied Research, V.11, №4, pp. 815–822.

## REFERENCES

1. Geraskin, M.Yu., Dashko, L.V., Plotnikova, G.V., Shekov, A.A. 2019, «Using the method of coercimetry in the study of cold-deformed steel products to establish the fire source», *Forensic examination*, No. 2, pp. 80-91.
2. Novikov, I.I. 1997, «Special States of metal crystals», *Metals*, No. 1, pp. 65-69.

3. Estrin, E.I. 2004, «Mechanical properties of high-carbon alloy steel near the temperature of phase transformation», *DAN RAS*, Т. 397, No. 3, pp. 330-333.
4. Gvozdev, A.E., Kuzovleva, O.V., Starikov N.E., Pustovgar, A.S. 2007, «About the effect of superplasticity of steels and alloys», *Reports of the II international conference "Deformation and destruction of materials and nanomaterials"*, Moscow, pp. 68-70.
5. Gvozdev, A.E., Kuzovleva O.V., Starikov, N.E. 2008, «Analysis of the laws of extreme effects in phase transitions in metal alloys using the developed experimental software package», Electronic publication No. 14225 of 12.09.2008. state reg.0320801998.-1, El.wholesale.disk (CD-ROM), available at: [www.infoereg.ru](http://www.infoereg.ru).
6. Blanter, M.E., Mashkov, A.K. 2002, «Anomalous changes in the properties of alloys in the process of phase transformations», *Mitom*, No. 1, pp. 6-10.
7. Gvozdev, A.E., Kuzovleva, O.V., Kondrashina, A.V. 2007, «Deformation, structure formation and destruction of steel R6M5», *Deformation and destruction of materials*, No. 8, pp. 25-31.
8. Kuzovleva, O.V. 2012, Anomalous changes in the structure and properties of metals and alloys under thermomechanical effects in the pre-rotation state, Tula, *Publishing house of Tula state University*, 266 p.
9. Gvozdev, A.E., Kuzovleva, O.V., Sergeev, A.N., Chukanov, A.N. 2017, «State of pre-rotation, mechanical instability and superplasticity of steels and alloys», *VII international conference "Deformation and destruction of materials and nanomaterials": collection of materials*, Moscow, IMET RAS, pp. 78-80.
10. Gulyaev, A.P. 1989, «Formation of austenite in low-carbon steels (current state of the issue)», *Mitom*, No. 8, pp. 21-24.
11. Khachaturian, A.G. 1974, *Theory of phase transformations and structure of solid solutions*, Moscow, Nauka, 384 p.
12. Vorobjev, V.G. 1960, «Anomalous properties of the metal material during flow of internal transformations and their technological significance», *Izvestiya vuzov. Engineering*, No. 8, pp. 120-131.
13. Gulyaev, A.P. 1991, «State of pre-conversion in iron alloys», *Metallography and heat treatment of metals*, No. 6, pp. 7-9.
14. Novikov, I.I. 1997, «Special States of metal crystals», *Metals*, No. 1. pp. 65-69.
15. Estrin, E.I. 2006, «About the nature of plasticity in polymorphic transformations», *Physics of metals and materials science*, Т. 102, No. 1, pp. 123-128.
16. Shorshorov, M.H., Gvozdev, A.E., Afanaskin, A.V., Gvozdev, E.A. 2002, «The calculation of the cluster structure of the melt, its impact on education anamorph solid phases and their structural relaxation upon subsequent heating», *The Metallography and heat treatment of metals*, No. 6, pp. 12-16.
17. Gvozdev A.E. 2019. Extreme strength and ductility effects in high-alloy metal ingot and powder systems. 2nd ed., ISPR. and add. Tulsu publishing house, 476 pp.
18. Kuzovleva O.V., Gvozdev A.E., Tikhonova I.V., Sergeev N.N., Breki A.D., Starikov N.E., Sergeev A.N., Kalinin A.A., Maliy D.V., Titova Yu.E., Aleksandrov S.E., Krylov N.A. 2016. On the state of pre-conversion of metals and alloys. Tula: Tulsu publishing house, 245 pp.

19. Sergeev, N.N., Minaev, I.V., Tikhonova, I.V., Gvozdev, A.E., Kolmakov, A.G., Sergeev, A.N., Kutepov, S.N., Malii, D.V. 2020, «Selecting Laser Cutting Modes for Engineering Steel Sheets Aiming at Provision of the Required Properties of Surface Quality», Inorganic Materials: Applied Research, V.11, №4, pp. 815–822.

Получено 21.01.2020 г.

Принято в печать 22.10.2020 г.