

Анотація

Белих Д.Г. Моделювання фазових перетворень у маловуглецевих сталях та у рідинах поблизу точки кристалізації. - Кваліфікаційна наукова праця на правах рукопису.

Дисертація на здобуття наукового ступеня доктора філософії за спеціальністю 105 «Прикладна фізика та наноматеріали» (010 - Природничі науки). - Харківський національний університет імені В. Н. Каразіна Міністерства освіти і науки України, Харків, 2024.

На сьогоднішній день у майже всіх галузях промисловості широко використовуються різні сталеві вироби та конструкції. Вибір сталі як основного матеріалу для виготовлення деталей обумовлений передусім її найкращим поєднанням таких технологічних властивостей, як міцність, зносостійкість, надійність і довговічність. Крім того, висока різноманітність сталевих сплавів і низька собівартість залізної руди надають сталі значну перевагу у використанні.

Для покращення механічних властивостей сталевих виробів їх піддають легуванню та попередній обробці. Залежно від умов експлуатації та необхідних властивостей сталі, попередню обробку здійснюють різними методами.

Термічна обробка металевих виробів є дуже складним технологічним процесом, що включає нагрівання металу (сплаву) до певної температури, витримку при цій температурі протягом заданого часу і подальше охолодження з метою отримання необхідної мікроструктури і, відповідно, необхідних властивостей виробу для використання в конкретних умовах. Термічна обробка металевих виробів є надзвичайно складним технологічним процесом, який включає нагрівання металу (сплаву) до певної температури, утримання при цій температурі впродовж визначеного часу і подальше охолодження. Цей процес спрямований на отримання необхідної мікроструктури та відповідних властивостей виробу для його подальшого використання в конкретних умовах.

Величезна різноманітність металевих сплавів робить завдання термообробки надзвичайно індивідуальним процесом. Це передбачає детальний аналіз і підбір температурних режимів, методів нагрівання і охолодження, а також часу витримки, залежно від конкретного хімічного складу матеріалу.

Параметри термообробки сталі визначаються відсотковим вмістом вуглецю в сплаві та присутністю різних легуючих елементів. Ці компоненти мають значний вплив на тугоплавкість металу, його крихкість та інші механічні характеристики.

Окрім цього, слід зазначити, що сталі з вмістом вуглецю більше 6.67 % є нестійкими і надзвичайно крихкими, тому не знаходять застосування в промисловості. Сплави з вмістом вуглецю від 2 до 6.67 % відомі як чавуни. Вони відрізняються своїми фізичними і механічними характеристиками, які значно відрізняються від властивостей сталі, і тому займають особливу нішу в промисловому виробництві.

Оскільки властивості сталі безпосередньо залежать від її мікроструктури і співвідношення фаз, потрібне точне розуміння внутрішніх процесів, що відбуваються в матеріалі при його технологічному нагріві і охолодженні. Передусім слід звернути увагу на мікроструктуру сталі в рівноважному стані, зокрема, на будову кристалічної решітки, яка значною мірою визначає механічні властивості сплаву.

Метою дослідження є пошук теорій, які точно описують експериментальні результати фазових перетворень у металах і сплавах при зміні температури. У ході дослідження було виявлено суттєві розбіжності між наявними теоретичними моделями фазових перетворень і експериментальними даними. Ці розбіжності підкреслюють важливість і необхідність подальших досліджень у цьому напрямку для розробки теорій, які зможуть більш адекватно описати механізми фазових перетворень.

Наявні теорії не завжди враховують усі фактори, що впливають на фазові перетворення, такі як мікроструктурні особливості, швидкість охолодження

або нагрівання, та вплив домішок у металах і сплавах. Тому подальші дослідження мають зосередитися на створенні більш комплексних моделей, які враховують ці фактори і дозволяють отримувати результати, що краще співпадають з експериментальними даними.

Також варто звернути увагу на розробку нових експериментальних методик, які можуть забезпечити більш точні та детальні дані для верифікації теоретичних моделей. Спільна робота теоретиків і експериментаторів у цій галузі є ключем до досягнення більш глибокого розуміння фазових перетворень у металах і сплавах.

Таким чином, продовження пошуку та розробки нових теорій, а також удосконалення існуючих підходів, є критично важливими для досягнення повного розуміння і точного опису фазових перетворень. Це, у свою чергу, сприятиме розробці нових матеріалів з покращеними властивостями, що матимуть широке застосування в різних галузях промисловості. Розробка теорій, що точно описують експериментальні результати фазових перетворень у кристалічних середовищах при зміні температури, є надзвичайно важливим завданням для сучасної науки. Фазові перетворення в кристалічних середовищах, такі як мартенситні перетворення, значно впливають на властивості матеріалів, тому їх точне моделювання має велике значення для різних галузей промисловості.

Існуючі розбіжності між теоретичними моделями і експериментальними даними щодо прямих мартенситних перетворень свідчать про те, що наявні теорії не завжди враховують усі аспекти цих процесів. Крім того, проблеми з описом задачі з рухомою межею кристалізації також вказують на необхідність розробки більш адекватних теоретичних підходів. Такі розбіжності вимагають продовження пошуку нових теорій і вдосконалення існуючих моделей, щоб вони краще відповідали експериментальним даним і могли більш точно описувати фазові перетворення у кристалічних середовищах.

Об'єктом дослідження є процеси кристалізації у твердих тілах при зміні температури. Це включає вивчення різних аспектів кристалізації, таких як

зародження і ріст кристалів, вплив температурних градієнтів, і взаємодія між фазами під час перетворень. Ці процеси є фундаментальними для розуміння поведінки матеріалів в умовах змінних температур.

Предметом дослідження є фізична модель, яка описує процеси кристалізації у твердих тілах при зміні зовнішньої температури. Така модель повинна враховувати динаміку фазових переходів, мікроструктурні зміни, що відбуваються під час перетворень, та вплив різних факторів, таких як швидкість охолодження або нагріву, на кінцеву структуру матеріалу. Модель має бути здатною прогнозувати властивості матеріалів після кристалізації і допомагати в оптимізації технологічних процесів.

Розробка адекватних теорій і моделей фазових перетворень у кристалічних середовищах не тільки поглибить наше розуміння цих процесів, але й сприятиме створенню нових матеріалів з покращеними властивостями. Це, в свою чергу, матиме широке застосування в таких галузях, як металургія, машинобудування, авіаційна та космічна промисловість, мікроелектроніка, а також у виробництві нових композитних матеріалів і сплавів. Особистий внесок здобувача у досягнення наукових результатів та їх новизна полягає у ряді значних досягнень у галузі моделювання фазових перетворень у кристалічних середовищах. Здобувач вперше розробив аналітичну модель прямих мартенситних перетворень, засновану на дворівневій системі А. Ейнштейна, яка дозволяє отримати результати, що наближені до експериментальних даних. Ця модель враховує ймовірність спонтанного переходу індукованих частинок, що раніше не було зроблено в науковій літературі.

Значним внеском стало також вперше запропоноване врахування ймовірності спонтанного переходу індукованих частинок, що є важливим для точного опису фазових перетворень. Крім того, здобувач вперше запропонував модель для опису фазових перетворень у вуглецевих сталях, зокрема нікелевих та марганцевих, яка продемонструвала високу кількісну відповідність експериментальним даним. Ця аналітична модель опису

мартенситних перетворень вперше забезпечила відповідність експериментальним результатам як для високих, так і для низьких температур, що є значним проривом у цій галузі досліджень.

Вивчення мартенситних перетворень відіграє ключову роль у різних галузях, включаючи матеріалознавство та металургію, сприяючи розробці нових матеріалів і оптимізації процесів термічної обробки. У автомобільній та авіаційній промисловості такі дослідження важливі для створення легких, але міцних матеріалів, що зменшують вагу транспортних засобів і підвищують їхню ефективність. В енергетичному секторі знання про мартенситні перетворення допомагають у виробництві матеріалів, здатних витримувати високі температури, що важливо для підвищення надійності та ефективності енергетичних систем.

У мікроелектроніці вивчення мартенситних перетворень може впливати на розробку нових матеріалів для елементів пам'яті, сприяючи створенню більш надійних і довговічних електронних компонентів. Деякі біоматеріали, що піддаються мартенситним перетворенням, знаходять застосування у медичних імплантатах та пристроях, забезпечуючи покращені механічні властивості та біосумісність. Це відкриває перспективи для подальших досліджень і розвитку нових матеріалів і технологій для медичної галузі. Здобувач також запропонував модифіковану умову для задачі Стефана, отриману з рівняння зміни концентрації фаз у одновимірній двофазній системі методом інтегрування за тонким перехідним шаром. Вперше проведене порівняння теоретичного підходу до опису задачі Стефана з використанням нового методу руху міжфазного кордону з експериментальними даними підтвердило справедливість запропонованого методу отримання умови задачі Стефана. Це порівняння показало, що новий підхід дозволяє більш точно моделювати процеси фазових перетворень у кристалічних середовищах.

Розроблені моделі та нові теоретичні підходи мають важливе значення для різних галузей науки і техніки. Вони сприяють більш глибокому розумінню процесів, що відбуваються у кристалічних матеріалах під час фазових

перетворень, і відкривають нові можливості для розробки матеріалів з покращеними властивостями. Такі матеріали можуть знайти широке застосування в металургії, машинобудуванні, авіаційній та космічній промисловості, мікроелектроніці та багатьох інших галузях, де вимоги до матеріалів постійно зростають. Моделювання мартенситних перетворень у вуглецевих сталях має велике значення для розуміння їхніх структурних та механічних властивостей. Це дослідження є основою для вдосконалення технологій виробництва і покращення якості матеріалів. Подальші дослідження можуть включати розробку удосконалених методів моделювання, використання нових матеріалів для створення більш точних моделей, а також розширення діапазону умов, які можуть бути враховані в цих моделях.

Моделювання задачі Стефана, яка описує фазовий перехід на рухомій межфазній межі, є важливим у різних наукових сферах. Це включає матеріалознавство, металургію, геофізику, енергетику, медичну діагностику, метеорологію, біологію та хімію. Математичне моделювання процесів фазових переходів допомагає розв'язувати складні завдання у технологічних, медичних та природничих науках, полегшуючи розуміння, оптимізацію та прогнозування цих процесів. Це сприяє розвитку інноваційних технологій і нових матеріалів, що мають велике значення для прогресу в різних галузях індустрії та науки.

Ключові слова: мартенсит, аустеніт, фазове перетворення, фонон, перехід енергії, деформація, задача Стефана, міжфазний кордон, границі зерен, дифузія, кристалізація, мікроструктура.