

Харківський національний університет імені В. Н. Каразіна

Міністерство освіти і науки України

Кваліфікаційна наукова
праця на правах рукопису

Бєлих Дмитро Геннадійович

УДК 621.1.016+519.633

ДИСЕРТАЦІЯ
«МОДЕЛЮВАННЯ ФАЗОВИХ ПЕРЕТВОРЕНЬ У
МАЛОВУГЛЕЦЕВИХ СТАЛЯХ ТА У РІДИНАХ ПОБЛИЗУ ТОЧКИ
КРИСТАЛІЗАЦІЇ»

Спеціальність 105 – Прикладна фізика та наноматеріали

(Галузь знань 10 – Природничі науки)

Подається на здобуття ступеня доктора філософії

Дисертація містить результати власних досліджень. Використання ідей, результатів і текстів інших авторів мають посилання на відповідне джерело.

_____ Д.Г.Бєлих

Науковий керівник: Ткаченко Віктор Іванович, професор, доктор фізико-математичних наук

Харків – 2024

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.

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 [65,66,67], 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[80], 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.

Abstract

Belykh D.G. Modeling of phase transformations in low-carbon steels and in liquids near the crystallization point. - Qualifying scientific work on manuscript rights.

Thesis for the Doctor of Philosophy degree in specialty 105 "Applied Physics and Nanomaterials" (010 - Natural Sciences). - V. N. Karazin Kharkiv National University of the Ministry of Education and Science of Ukraine, Kharkiv, 2024.

Today, various steel products and structures are widely used in almost all industries. The choice of steel as the main material for the manufacture of parts is primarily due to its best combination of such technological properties as strength, wear resistance, reliability and durability. In addition, the high variety of steel alloys and the low cost of iron ore give steel a significant advantage in use.

To improve the mechanical properties of steel products, they are alloyed and pre-treated. Depending on the operating conditions and required steel properties, pre-treatment is carried out by various methods.

Heat treatment of metal products is a very complex technological process, which includes heating the metal (alloy) to a certain temperature, holding it at this temperature for a given time and further cooling in order to obtain the required microstructure and, accordingly, the required properties of the product for use in specific conditions. Heat treatment of metal products is an extremely complex technological process, which includes heating the metal (alloy) to a certain temperature, keeping it at this temperature for a certain time and then cooling it. This process is aimed at obtaining the necessary microstructure and corresponding properties of the product for its further use in specific conditions.

The huge variety of metal alloys makes the task of heat treatment an extremely individual process. This involves a detailed analysis and selection of temperature regimes, methods of heating and cooling, as well as exposure time, depending on the specific chemical composition of the material.

The parameters of heat treatment of steel are determined by the percentage

of carbon in the alloy and the presence of various alloying elements. These components have a significant influence on the refractory metal, its brittleness and other mechanical characteristics.

In addition, it should be noted that steels with a carbon content of more than 6.67% are unstable and extremely brittle, so they are not used in industry. Alloys with a carbon content of 2 to 6.67% are known as cast iron. They differ in their physical and mechanical characteristics, which are significantly different from the properties of steel, and therefore occupy a special niche in industrial production.

Since the properties of steel directly depend on its microstructure and phase ratio, an accurate understanding of the internal processes occurring in the material during its technological heating and cooling is required. First of all, attention should be paid to the microstructure of steel in an equilibrium state, in particular, to the structure of the crystal lattice, which largely determines the mechanical properties of the alloy.

The purpose of the research is to find theories that accurately describe the experimental results of phase transformations in metals and alloys when the temperature changes. In the course of the study, significant discrepancies were found between the available theoretical models of phase transformations and experimental data. These discrepancies emphasize the importance and necessity of further research in this direction for the development of theories that can more adequately describe the mechanisms of phase transformations.

Existing theories do not always take into account all the factors affecting phase transformations, such as microstructural features, cooling or heating rates, and the influence of impurities in metals and alloys. Therefore, further research should focus on creating more complex models that take these factors into account and allow obtaining results that better match experimental data.

It is also worth paying attention to the development of new experimental methods that can provide more accurate and detailed data for the verification of theoretical models. The joint work of theorists and experimentalists in this field is the key to achieving a deeper understanding of phase transformations in metals and

alloys.

Thus, the continued search and development of new theories, as well as the improvement of existing approaches, are critical to achieving a complete understanding and accurate description of phase transformations. This, in turn, will contribute to the development of new materials with improved properties that will be widely used in various industries. The development of theories that accurately describe the experimental results of phase transformations in crystalline environments when the temperature changes is an extremely important task for modern science. Phase transformations in crystalline environments, such as martensitic transformations, significantly affect the properties of materials, so their accurate modeling is of great importance for various industries. Existing discrepancies between theoretical models and experimental data regarding direct martensitic transformations indicate that existing theories do not always take into account all aspects of these processes. In addition, problems with the description of the problem with a moving boundary of crystallization also indicate the need to develop more adequate theoretical approaches. Such discrepancies require the continuation of the search for new theories and the improvement of existing models so that they better correspond to experimental data and can more accurately describe phase transformations in crystalline environments.

The object of the research is the crystallization processes in solid bodies when the temperature changes. This includes the study of various aspects of crystallization, such as crystal nucleation and growth, the effects of temperature gradients, and interactions between phases during transformations. These processes are fundamental to understanding the behavior of materials under conditions of variable temperatures.

The subject of research is a physical model that describes the processes of crystallization in solid bodies when the external temperature changes. Such a model should take into account the dynamics of phase transitions, microstructural changes occurring during transformations, and the influence of various factors, such as the rate of cooling or heating, on the final structure of the material. The

model should be able to predict the properties of materials after crystallization and help in the optimization of technological processes. The development of adequate theories and models of phase transformations in crystalline environments will not only deepen our understanding of these processes, but also contribute to the creation of new materials with improved properties. This, in turn, will have wide application in such industries as metallurgy, mechanical engineering, aviation and space industry, microelectronics, as well as in the production of new composite materials and alloys. The recipient's personal contribution to the achievement of scientific results and their novelty consists in a number of significant achievements in the field of modeling phase transformations in crystalline environments. The degree holder first developed an analytical model of direct martensitic transformations[65,66,67], based on A. Einstein's two-level system, which allows obtaining results close to experimental data. This model takes into account the probability of spontaneous transition of induced particles, which has not been done before in the scientific literature.

A significant contribution was also the first proposed consideration of the probability of spontaneous transition of induced particles, which is important for an accurate description of phase transformations. In addition, the researcher first proposed a model for describing phase transformations in carbon steels, particularly nickel and manganese steels, which demonstrated a high quantitative agreement with experimental data. This analytical model for describing martensitic transformations for the first time provided agreement with experimental results for both high and low temperatures, which is a significant breakthrough in this field of research.

In microelectronics, the study of martensitic transformations can influence the development of new materials for memory elements, contributing to the creation of more reliable and durable electronic components. Some martensitic biomaterials find applications in medical implants and devices, providing improved mechanical properties and biocompatibility. This opens prospects for further research and development of new materials and technologies for the

medical field.

The acquirer also proposed a modified condition for Stefan's problem[80], obtained from the equation of phase concentration change in a one-dimensional two-phase system by the method of integration over a thin transition layer. For the first time, a comparison of the theoretical approach to the description of the Stefan problem using a new method of movement of the interphase boundary with experimental data confirmed the validity of the proposed method of obtaining the condition of the Stefan problem. This comparison showed that the new approach allows more accurate modeling of phase transformation processes in crystalline media.

The developed models and new theoretical approaches are important for various fields of science and technology. They contribute to a deeper understanding of the processes occurring in crystalline materials during phase transformations and open up new opportunities for the development of materials with improved properties. Such materials can be widely used in metallurgy, mechanical engineering, aviation and space industry, microelectronics and many other industries where the requirements for materials are constantly increasing. Modeling of martensitic transformations in carbon steels is of great importance for understanding their structural and mechanical properties. This research is the basis for improving production technologies and improving the quality of materials. Further research may include developing improved modeling techniques, using new materials to create more accurate models, and expanding the range of conditions that can be accounted for in these models. The study of martensitic transformations plays a key role in various fields, including materials science and metallurgy, contributing to the development of new materials and optimization of heat treatment processes. In the automotive and aerospace industries, such research is important for creating lightweight yet strong materials that reduce the weight of vehicles and increase their efficiency. In the energy sector, knowledge of martensitic transformations helps in the production of materials capable of withstanding high temperatures, which is important for increasing the reliability

and efficiency of energy systems.

Modeling the Stefan problem, which describes the phase transition at a moving interface, is important in various scientific fields. This includes materials science, metallurgy, geophysics, energy, medical diagnostics, meteorology, biology and chemistry. Mathematical modeling of phase transition processes helps to solve complex tasks in technological, medical and natural sciences, facilitating the understanding, optimization and prediction of these processes. This contributes to the development of innovative technologies and new materials, which are of great importance for progress in various fields of industry and science.

Key words: martensite, austenite, phase transformation, phonon, energy transfer, deformation, Stefan's problem, interphase boundary, grain boundaries, diffusion, crystallization, microstructure..

СПИСОК ПУБЛІКАЦІЙ ЗДОБУВАЧА ЗА ТЕМОЮ ДИСЕРТАЦІЇ

Наукові праці, в яких опубліковані основні наукові результати дисертації:

Публікації у наукових фахових виданнях України, які входять до міжнародних наукометричних баз Scopus:

1. Bielykh D.G., Skoromnaya S.F., Tkachenko V.I. DIRECT MARTENSITIC TRANSFORMATIONS OF LOW-CARBON STEELS. Problems of Atomic Science and Technology. 2023. №. 2. P. 37-41. (Q3)

(Особистий внесок здобувача: здійснив оцифровку відомих експериментальних даних минулих досліджень; провів розрахунки для констант, що відповідають сталям; переніс отримані результати на графіки, що описують аналітичну модель, врахував ймовірність спонтанного переходу індукованих частинок, опрацював аналітичну модель, що використовується для опису ізотермічних прямих мартенситних перетворень малоуглецевої нікелевої сталі ($Fe + 7\%Cr + 2\%Ni$))

2. Bielykh D.G., Skoromnaya S.F., Tkachenko V.I. MODIFIED STEFAN CONDITION IN STEFAN PROBLEM. Problems of Atomic Science and Technology. 2023. №. 5. P. 21-26 (Q3)

(Особистий внесок здобувача: провів аналіз існуючих досліджень за темою вирішення задачі Стефана; запропонував новий метод формулювання граничної умови на рухомому кордоні; порівняв зміщення міжфазного кордону, що впливає зі стандартної задачі Стефана, з експериментальними даними; перевірів модифіковані умови Стефана з використанням експериментальних результатів щодо зміщення межі розділу Cu/Sn під час дифузійного з'єднання)

Наукові праці, які засвідчують апробацію матеріалів дисертації:

3. Белих Д.Г., Скоромна С.Ф., Ткаченко В.І. Прямі мартенситні перетворення вуглецевих сталей. Вісник херсонського національного технічного університету №3 том 2, 2018 р., Херсон, 2018. С. 177-182.

(Особистий внесок здобувача: здійснив оцифровку відомих експериментальних даних минулих досліджень; провів розрахунки для констант, що відповідають сталям; переніс отримані результати на графіки, що описують аналітичну модель, врахував ймовірність спонтанного переходу індукованих частинок, опрацював аналітичну модель, що використовується для опису ізотермічних прямих мартенситних перетворень маловуглецевої нікелевої сталі (Fe + 7%Cr + 2%Ni))

Результати дисертаційної роботи повністю відображено в публікаціях.

ЗМІСТ

Перелік умовних позначень.....	17
ВСТУП.....	18
РОЗДІЛ 1.	27
1.1 ТЕРМІЧНА ОБРОБКА СТАЛІ.....	32
1.1.1 Процес аустенізації.....	32
1.1.2. Розпад аустеніту і утворення перліту.....	34
1.2. Мартенситне перетворення.....	35
1.2.1. Легуючі елементи і їхній вплив на фазові перетворення.....	36
1.3. Математичний опис аустенітного перетворення.....	38
1.4. Задача Стефана.....	44
1.4.1. Методи розв'язку Задача Стефана.....	44
Висновки до розділу 1.....	48
РОЗДІЛ 2.	50
2.1. Формулювання фізичної моделі фазових перетворень у кристалічних середовищах.....	50
2.2. Пряме мартенситне перетворення у марганцевих сталях.	72
Висновки до розділу 2.....	75
РОЗДІЛ 3.	77
3.1. Модифікована умова для вирішення Задачі Стефана.	80
3.1.1.Одновимірна двофазна ЗС в напівобмеженій області з модифікованим рухомим міжфазним кордоном.....	82
3.1.2. Модифікована умова Стефана на міжфазному кордоні.....	84
Висновки до розділу 3.....	93
Висновки.....	95
СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ.....	97
ДОДАТОК А.....	106

Перелік умовних позначень

ЗС – Задача Стефана

ІМП – ізотермічне мартенситне перетворення

МК – міжфазний кордон

МП – мартенситне перетворення

ПМП – пряме мартенситне перетворення

ПРЗА – попередній розмір зерна аустеніту

ФП – фазовий перехід

ВСТУП

Обґрунтування вибору теми дослідження.

У сучасний період практично в усіх галузях промисловості широко застосовуються різноманітні сталеві вироби і конструкції. Один із важливих чинників, що обумовлює вибір сталі як основного матеріалу для виготовлення деталей, полягає у найкращому поєднанні технологічних властивостей, таких як міцність, зносостійкість, надійність і довговічність. Додатково, велика різноманітність сталевих сплавів і низька собівартість залізної руди надають цьому матеріалу величезну перевагу у різних сферах застосування.

З метою поліпшення механічних характеристик сталевих виробів, їх піддають процесам легування і попередньої обробки. Ці процеси проводяться за різними методами, залежно від конкретних умов експлуатації та вимог до властивостей сталі.

Термічна обробка металевих виробів є надзвичайно складним технологічним процесом, який включає кілька етапів: нагрівання металу або сплаву до певної температури, витримку при цій температурі протягом визначеного часу та подальше охолодження. Метою цього процесу є досягнення необхідної мікроструктури та відповідних властивостей виробу для його подальшого використання в конкретних умовах експлуатації.

Завдяки величезній різноманітності металевих сплавів, термічна обробка є дуже індивідуалізованим процесом, що потребує ретельного аналізу і вибору оптимальних температурних режимів, методів нагрівання та охолодження, а також часу витримки, враховуючи специфіку хімічного складу матеріалу. Кожен елемент у складі сплаву відіграє свою роль у формуванні кінцевих властивостей виробу, тому підхід до термообробки повинен бути точним і науково обґрунтованим.

Параметри термообробки сталі значною мірою визначаються відсотковим вмістом вуглецю в сплаві та наявністю різних легуючих елементів. Ці компоненти суттєво впливають на властивості сталі, зокрема на

її тугоплавкість, крихкість та інші механічні характеристики. Важливо зазначити, що сталі з вмістом вуглецю понад 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, і вони мають свої унікальні фізичні та механічні характеристики, які відрізняються від властивостей сталі, забезпечуючи їм окрему нішу в промисловому виробництві.

Властивості сталі безпосередньо залежать від її мікроструктури і співвідношення фаз, що робить точне розуміння внутрішніх процесів, які відбуваються в матеріалі під час його технологічного нагрівання та охолодження, надзвичайно важливим. Особливу увагу слід приділяти мікроструктурі сталі в рівноважному стані, зокрема, будові кристалічної решітки, яка значною мірою визначає механічні властивості сплаву. Розуміння цих внутрішніх структурних змін дозволяє оптимізувати процеси термічної обробки, що веде до покращення якості та надійності кінцевих металевих виробів, забезпечуючи їх відповідність вимогам різних галузей промисловості.

Таким чином, термічна обробка є критично важливим етапом у виробництві металевих виробів, що вимагає детального наукового підходу для досягнення високої якості продукції. Це включає аналіз хімічного складу, вибір оптимальних параметрів термообробки і розуміння впливу цих параметрів на мікроструктуру та властивості кінцевого продукту. Феноменологічна теорія фазових переходів у кристалічних середовищах, сформульована як опис зміни їх симетрії (наприклад, перехід кристала з фази з кубічної симетрії в тетрагональну), вперше запропонована Ландау в роботі [1]. В теорії Ландау для кількісного опису зміни симетрії було введено поняття параметра порядку, в якості якого обрана величина, що лінійно перетворюється під дією групи симетрії середовища. Цей феноменологічний підхід, що полягає в припущенні про розкладність термодинамічних потенціалів в ряд за ступенями цього параметра, дозволив

описати зміни теплоємності поблизу температури фазового перетворення. Зокрема, було показано, що якщо в точці зміни симетрії не відбувається стрибка стану тіла (немає теплоти переходу), то такі переходи супроводжуються стрибком теплоємності[2].

Пов'язані зі зміною симетрії кристалічних решіток металів і сплавів фазові переходи спостерігаються також при термічній обробці сталей.

Так, наприклад, у процесі охолодження вуглецевої сталі, що знаходиться в γ - фазі і характеризується як аустеніт (фаза А), відбувається її структурне перетворення, пов'язане зі зміною симетрії кристалічної решітки. ГЦК симетрія γ - фази переходить в нову, міцнішу α - фазу з симетрією ОЦК, іменовану мартенсит (фаза М) [3,4,5].

Для розуміння фізики процесів перетворення вуглецевої сталі представляється корисним сформулювати деякі його характерні особливості [3,4,5]:

1. Перетворення є бездифузійним процесом. Концентрація вуглецю в мартенситі така ж, як і в початковому аустеніті. Мартенсит є перенасичений твердий розчин вуглецю в α - залізі (Fe_α)[6,7,8].

2. Механізм перетворення носить зсувний характер, в процесі якого атоми зміщуються відносно один одного на відстані, що не перевищують міжатомні. Сусіди будь-якого атома в аустеніті залишаються його сусідами і в мартенситі[9,10].

3. Час створення єдиного кристала М менше 10^{-7} с, а швидкість його росту – 10^5 см/с, тобто близька до швидкості звуку в твердому тілі, і не залежить від температури перетворення[11,12,13].

4. При концентрації вуглецю C_0 перетворення протікає в певному температурному інтервалі (див. Рис. 3.1): починається при температурі $T_H < T_0$, і закінчується при більш низькій температурі T_K , де T_H і T_K - мартенситні точки, а T_0 - температура метастабільної рівноваги обох кристалічних модифікацій.[14,15,16,17]

5. Температура T_H в широкому діапазоні швидкості охолодження не

залежить від її величини, а перетворення неможливо подавити навіть при найбільших швидкостях охолодження, крім випадку утворення ізотермічного мартенситу[18,19].

6. Температури мартенситних точок сильно знижується зі збільшенням вмісту вуглецю[20].

Далі, фазовий перехід, в якому процеси дифузії і самодифузії протікають повільно, і які можна не враховувати при розрахунках, будемо називати, згідно [3,4,5,21], прямим мартенситним перетворенням (ПМП).

В цілому, ПМП призводить до того, що в кожному, наперед обраному зерні вихідного А, утворюється велика кількість кристалів М, які мають форму пластинки з товщиною, принаймні на порядок меншою її розмірів в ортогональних до неї напрямках. Розмір кристалів М залежить від початкового стану зерен А[22,23]: однорідна і досконала кристалічна структура А дає великі кристали М, і навпаки, велика неоднорідність будови і наявність недосконалостей кристалічної структури зерна А може дати кристали М дуже малих розмірів[24,25,26].

Для опису ПМП металів і сплавів на основі феноменологічної теорії Ландау в якості параметра порядку використовується така термодинамічна величина, як деформація зсуву [27,28,29,30]. У цьому випадку розкладання вільної енергії Гіббса здійснюється за ступенями цієї величини. Однак, у деяких випадках, таке розкладання не описує експериментальні результати [31,32].

Вивчення мартенситних перетворень - це складний та важливий аспект матеріалознавства та металургії. Мартенситні перетворення відбуваються в металах та сплавах при швидкому охолодженні з високих температур і відіграють важливу роль у формуванні механічних властивостей та мікроструктури матеріалів[33].

Слід відзначити, що використання підходу Ландау не завжди описує експериментальні результати, тому, що у кожній задачі треба обирати свій параметр порядку [31,35,36]

Інший підхід в описі ПМП полягає в використанні строгого розв'язку задачі кристалізації речовини, яке отримано при деяких схематичних і досить загальних припущеннях, застосованих в роботі [37]. Зокрема, в цій роботі показано, що частка перетвореного об'єму f визначається виразом $f = 1 - \exp(-Kt^4)$, де t – час кристалізації, K – кінетичний коефіцієнт.

У більш складному випадку, для опису ізотермічної кінетики тримірного зародження і росту нової фази Аврамі запропонував використовувати загальне співвідношення, яке носить його ім'я [4]: $f = 1 - \exp(-Kt^n)$, де n – кінетичний коефіцієнт. Це рівняння при $3 \leq n \leq 4$ повинно охоплювати всі випадки, при яких швидкість перетворення є деякою спадною функцією часу, аж до її постійного значення.

Однак розрахунки кінетики фазових перетворень, засновані на рівнянні Аврамі, не завжди приводять до правильних результатів, тому що їх значення дискретно змінюються в ході перетворення, залежать від вмісту вуглецю і, можливо, температури аустенізації. Підстановка експериментально виміряних значень n у рівняння Аврамі дозволяє в деяких випадках побудувати добре узгоджені з експериментальними даними теоретичні діаграми кінетики розпаду аустеніту для різних вуглецевих і легованих сталей.

Тому, не зважаючи на отримані раніше результати щодо задачі дослідження ПМП металів і сплавів, продовжує існувати інтерес до її подальшого дослідження з метою застосування результатів для адекватного опису експериментальних результатів.

Іншим прикладом фазового перетворення у твердому тілі є задача Стефана (ЗС). Задача Стефана відіграє важливу роль у різних наукових і практичних областях завдяки своїй значущості для розуміння теплопередачі та випромінювання. У сучасному світі, де питання сталої енергетики та ефективного використання ресурсів набувають першочергового значення, розуміння механізмів теплопередачі та випромінювання допомагає розробляти більш ефективні та енергозберігаючі системи опалення,

охолодження та виробництва електроенергії. Вивчення задачі Стефана є важливим для розвитку технологій відновлюваної енергії, таких як сонячні батареї та термоелектричні пристрої. Розуміння теплопередачі сприяє підвищенню ефективності перетворення тепла в електричну енергію.

Розв'язання задачі Стефана, яка виникає в контексті термодинамічних перетворень у речовинах, таких як танення та замерзання, стикається зі значними труднощами через складний характер цієї задачі. Вона включає нелінійні рівняння теплопровідності та інші рівняння з нелійними властивостями. Додатково, розподіл температури та інших параметрів може бути неоднорідним, особливо під час фазових перетворень. Розв'язання задачі Стефана вимагає інтеграції знань з фізики теплопровідності, математичного аналізу та числових методів.

Мета і завдання дослідження. Метою дослідження є пошук теорій, які адекватно описують експериментальні результати фазових перетворень в металах і сплавах при зміні температури.

Описані вище розбіжності теоретичного опису ПМП і експериментальних даних вимагають продовження пошуку теорій, які більш адекватно описують фазові перетворення в металах і сплавах.

Основні завдання дисертаційного дослідження:

Розробка теорій, які адекватно описують експериментальні результати фазових перетворень в кристалічних середовищах при зміні температури.

Існуючі розбіжності теоретичного опису прямих мартенситних перетворень і експериментальних даних, також розбіжності опису задачі з межою кристалізації, що рухається, вимагають продовження пошуку теорій, які більш адекватно описують фазові перетворення в кристалічних середовищах.

Об'єкт та предмет дослідження.

Об'єктом дослідження є процеси кристалізації в твердих тілах при зміні температури.

Предмет дослідження є фізична модель опису процесів кристалізації в

твердих тілах при зміні зовнішньої температури.

Методи дослідження.

1. Аналіз відомих теорій з опису прямих мартенситних перетворень, пошук розбіжностей з даними попередніх експериментів.
2. Розробка нової аналітичної моделі для розрахунків прямих мартенситних перетворень у вуглецевих сталях.
3. Застосування моделі для опису прямих мартенситних перетворень вуглецевих сталей, а потім випробування моделі для марганцевих сталей і порівняння отриманих результатів з експериментами.
4. Аналіз ЗС, як приклад крайової задачі, що описує міжфазний перехід з рухомим міжфазним кордоном.

Наукова новизна отриманих результатів:

Особистий внесок дисертанта в отриманні наукових результатів та їх новизна полягає у наступному:

1. Вперше розроблено аналітичну модель прямих мартенситних перетворень, засновану на дворівневій системі А.Ейнштейна, що дає наближений до експериментальних даних результат.
2. Вперше враховано ймовірність спонтанного переходу індукованих частинок.
3. Вперше було розглянуто модель для опису фазових перетворень вуглецевих сталей, а саме нікелевих і марганцевих, що показали гарну кількісну відповідність.
4. Вперше аналітична модель опису мартенситних перетворень дає відповідність експериментальним даним для високих і низьких температур.
5. Вперше запропонована модифікована умова ЗС, що отримана з рівняння зміни концентрації фаз одновимірної двофазної ЗС методом інтегрування за тонким перехідним шаром.
6. Вперше проведене порівняння теоретичного розгляду ЗС з використанням нового підходу в описі руху міжфазного кордону з

експериментальними даними, вказує на справедливість запропонованого способу одержання умови ЗС.

Особистий внесок здобувача.

Роботи, покладені в основу дисертації, виконано в співавторстві. В роботі [66] здобувач здійснив оцифровку відомих експериментальних даних минулих досліджень, провів розрахунки для констант, що відповідають сталям; переніс отримані результати на графіки, що описують аналітичну модель, врахував ймовірність спонтанного переходу індукованих частинок і опрацював аналітичну модель, що використовується для опису ізотермічних прямих мартенситних перетворень маловуглецевої нікелевої сталі ($\text{Fe} + 7\% \text{Cr} + 2\% \text{Ni}$). В роботі [67] здобувач провів аналіз існуючих досліджень за темою вирішення задачі Стефана, запропонував новий метод формулювання граничної умови на рухомому кордоні, порівняв зміщення міжфазного кордону, що впливає зі стандартної задачі Стефана, з експериментальними даними і перевіряв модифіковані умови Стефана з використанням експериментальних результатів щодо зміщення межі розділу Cu/Sn під час дифузійного з'єднання.

Структура та обсяг дисертації.

Дисертаційна робота складається зі вступу, трьох розділів, висновків, списку використаних джерел та трьох додатків. Обсяг загального тексту дисертації складає 108 с., з них основного тексту 80 с. Робота містить 15 рисунків та 4 таблиці. Список використаних джерел містить 98 найменувань.

Практичне значення отриманих результатів.

Моделювання мартенситних перетворень у вуглецевих сталях важливе для розуміння їх структурних та механічних властивостей. Подальше дослідження може включати у себе вдосконалені методи моделювання, використання нових матеріалів для створення більш точних моделей, або розширення діапазону умов, які можуть бути враховані в моделях.

Вивчення мартенситних перетворень має ключове значення у різних

галузях, включаючи матеріалознавство та металургію, де воно сприяє розробці нових матеріалів та оптимізації процесів термічної обробки. У сферах автомобільної та авіаційної промисловості, вивчення цих перетворень важливе для створення легких, але міцних матеріалів. Також воно знаходить застосування в енергетичній галузі для виробництва матеріалів, які можуть витримувати високі температури. У мікроелектроніці вивчення мартенситних перетворень може впливати на розробку матеріалів для елементів пам'яті. Деякі біоматеріали також піддаються цим перетворенням, знаходячи застосування у медичних імплантах та пристроях. У цій області існує потенціал для подальших досліджень та розвитку нових матеріалів і технологій для різних індустріальних секторів.

Задача Стефана моделює фазовий перехід на рухомій межфазній межі і відіграє важливу роль у різних галузях знань. Її застосування включає такі галузі знань, як матеріалознавство, металургія, геофізика, енергетика, медична діагностика, метеорологія, біологія та хімія. Математичне моделювання процесів фазових переходів допомагає розв'язувати завдання у технологічних, медичних та природничих науках, полегшуючи розуміння, оптимізацію та прогнозування цих процесів.

РОЗДІЛ 1.

ОГЛЯД ІСНУЮЧИХ ПІДХОДІВ ДЛЯ ОПИСУ МАРТЕНСИТНИХ ПЕРЕТВОРЕНЬ І ВИРІШЕННЯ ЗАДАЧІ СТЕФАНА

Феноменологічна теорія фазових переходів (ФП) в кристалічних середовищах вперше запропонована Ландау в роботі [1]. У цій теорії для кількісного опису зміни симетрії було введено поняття параметра порядку (ПП), в якості якого обрана величина, що лінійно перетворюється під дією групи симетрії середовища.

У роботі розглядається кристал з деякою густиною ρ_0 , що має певну симетрію. У точці переходу густина починає змінюватися і переходить в $\rho = \rho_0 + \delta\rho$, де $\delta\rho$ мале порівняно з ρ_0 . $\delta\rho$ також має деяку симетрію, але більш низьку ніж ρ_0 . Тоді, $\rho = \rho_0 + \delta\rho$ має ту ж симетрію, адже сума двох функцій має симетрію менш симетричного доданка. За умови більш високої симетрії $\delta\rho$ ніж ρ_0 , $\rho_0 + \delta\rho$ мало б ту ж симетрію що і ρ_0 . Автор посилається на теорію груп, за якою функцію $\delta\rho$ можна розбити на суму функцій у кількості, рівному числу елементів групи ρ_0 , таким чином, що при будь-якому перетворенні цієї групи всі ці функції перетворюються одна через одну, тобто переходять в лінійні комбінації інших функцій.

Термодинамічний потенціал Φ тіла визначається густиною ρ , тобто залежить від виду функції ρ . Крім того, Φ залежить, як від параметрів, від температури T та від тиску p тіла. Л. Д. Ландау розглядається розкладання термодинамічного потенціалу за степенями $\varphi_i^{(n)}$ та $c_i^{(n)}$. Розкладання починається з членів другого порядку. Також визначено, що квадратична форма є єдиним інваріантом другого порядку, який можна скласти з заданих величин. Початок розкладання може бути записаний таким чином:

$$\Phi\{\rho_0 + \delta\rho\} = \Phi\{\rho_0\} + \sum_n A^{(n)} \sum_i c_i^{(n)2}, \quad (1.1)$$

де коефіцієнти $A^{(n)}$ залежать від функцій $\varphi_i^{(n)}$, та параметрів T і p .

Цей феноменологічний підхід, що полягає в припущенні про можливість розкладання термодинамічних потенціалів в ряд за степенями

ПП, дозволив описати зміну теплоємності поблизу температури фазового перетворення.

У своїй роботі Л. Д. Ландау розглядає особливості фазових переходів у різних речовинах та матеріалах. Наприклад, для сумішей розкладання Φ поблизу точки неперервного переходу не відрізняється від розкладання Φ для кристалів і має вигляд

$$\Phi = \Phi_0 + A\eta^2 + B\eta^4 + \dots, \quad (1.2)$$

однак Φ_0 , A , B залежать не тільки від p і T , але і від концентрації x суміші.

Згідно з теорією Л. Д. Ландау, переходи між тілами різної симетрії не можуть відбуватися неперервно. В кожен момент тіло має ту чи іншу симетрію. Крім фазових переходів можливі також неперервні переходи, при яких у точці переходу не відбувається стрибок стану тіла, але симетрія змінюється одразу. Такі переходи обов'язково супроводжуються стрибком теплоємності. Вони пов'язані з переходом кристала в неупорядкований стан.

Ландау Л. Д. розглядає такі типи неперервних переходів зі зміною симетрії:

- точки Кюрі, розташовані на кривій на діаграмі p, T ;
- ізольовані точки неперервних переходів, які лежать на перетині декількох ліній фазових переходів.

Крім того, автор доводить можливість неперервних переходів, пов'язаних із виникненням або зникненням середніх магнітних моментів у кожного з атомів кристала (до таких відносяться точки Кюрі феромагнітних тіл).

При фазових переходах першого роду розподільна функція за енергією або щільністю системи повинна бути бімодальною, тобто мати два піки. Вищий пік відповідає найбільш вигідному та стабільному стану системи, тоді як нижчий пік відображає менш вигідний, метастабільний стан. У точці переходу висоти обох піків зрівнюються, що дозволяє системі одночасно існувати в обох станах.

При фазових переходах другого роду розподільна функція завжди має тільки один пік, який стає ширшим у точці переходу. Відповідно, при таких переходах метастабільні стани не виникають..

У 1937 році була опублікована робота А. М. Колмогорова [37], у якій він розглядає ймовірність потрапляння певних точок речовини в область кристалізації. У результаті була отримана підсумкова формула для такої ймовірності $p(t)$:

$$p(t) = 1 - e^{-\frac{4\pi}{3}c^3\Omega}, \quad (1.3)$$

де

$$\Omega = \int_0^t \alpha(t') \left(\int_{t'}^t k(\tau) d\tau \right)^3 dt'$$

α – коефіцієнт тепловіддачі, t – температура, τ – швидкість протікання перехідного процесу, c – швидкість наростання маси.

Також у роботі [38] автором було визначена кількість центрів кристалізації, які утворюються протягом усього процесу кристалізації $N(t)$ в достатньо великому об'ємі V :

$$N(t) = V\alpha \int_0^t e^{-\frac{\pi}{3}c^3\alpha\tau^4} d\tau \quad (1.4)$$

Практичне значення даної роботи полягає в тому, що автор при розрахунках враховує зіткнення часток кристалічної речовини, з чим виникали труднощі у багатьох науковців того часу.

У роботі [39] Л. Й. Коган розглядає кінетику поліморфного перетворення легованого заліза з метою виявлення механізму впливу легуючих елементів на швидкість $\gamma \rightarrow \alpha$ -переходу. Для цього було проведено декілька експериментів з легуючими елементами, як-то: кобальт, молібден, хром і нікель у різних поєднаннях. Також було враховано вплив температури та величини сил міжатомних зв'язків на швидкість перетворень.

Дослідження показали, що швидкість ізотермічного перетворення може зростати не лише у випадку, коли при більш високих температурах перетворення γ -фази вже починається, а й у випадку перебування зразків у зоні цих температур протягом часу, що не перевищує інкубаційний період. Крім того, вплив легуючих елементів на кінетику $\gamma \rightarrow \alpha$ - перетворень заліза визначається не зміщенням критичних точок, а зміною фізичних параметрів сплаву.

У першу чергу слід відзначити, що легування заліза різними елементами значно знижує швидкість $\gamma \rightarrow \alpha$ - перетворення. Легуючі елементи неадитивно впливають на кінетику поліморфного перетворення заліза. Швидкість переходу атомів заліза з решітки γ в решітку α в деяких випадках визначає швидкість ізотермічного розпаду легованого аустеніту.

Легуючі елементи змінюють температурне положення мартенситної точки $\gamma \rightarrow \alpha$ - перетворення, що пов'язано зі зміною пружних властивостей середовища. Залізо має дві модифікації - так звані альфа-залізо Fe_α і гамма-залізо Fe_γ . Альфа-залізо Fe_α (ферит) є структурою заліза при температурі до 911°C і вмісті вуглецю менше 0,2 % і має кубічну об'ємно-центровану кристалічну решітку (ОЦК) (рис. 1.1, а). Гамма-залізо Fe_γ (аустеніт) може містити до 2 % вуглецю і утворюється при температурі 911°C , коли кристалічна решітка заліза перетвориться з ОЦК - ґратки в гранецентровані (ГЦК) ґратки (рис. 1.1, б).

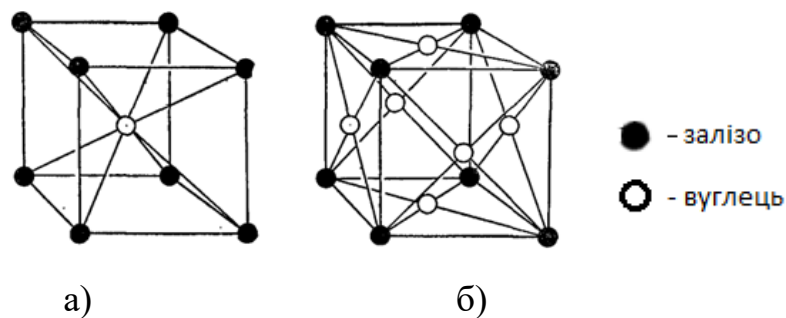


Рис. 1.1. а) об'ємно-центрована кристалічна решітка;

б) гранецентрована кристалічна решітка

Це перетворення обумовлене прагненням системи атомів заліза прийти

в стійкий стан з найменшим запасом вільної енергії. Так, при температурі менше 911°C найбільш вигідною будовою атомів являється ОЦК - ґратки, в інтервалі температур від 911°C до 1392°C стійким станом буде ГЦК - ґратки, а при температурі понад 1392°C і аж до 1539°C (температура плавлення чистого заліза) структура знову міняється на ОЦК - ґратки.

Вивченням мартенситних перетворень займався Г. В. Курдюмов [3]. У своїй монографії він описав природу мартенситу, причину високої твердості загартованої сталі, природу та механізм перетворення аустеніту в мартенсит. Він відзначив, що в результаті мартенситного механізму росту кристалів утворюється характерна мікро- і субмікроструктура (велика кількість пластинок мартенситу в середині кожного аустенітного зерна). Структурні зміни викликають у поведінці металів такий же ефект, як і холодна пластична деформація.

Деякі відмінні особливості мартенситного перетворення, характерні для вуглецевих сталей, були сформульовані Г. В. Курдюмовим:

- процес перетворення аустеніту в мартенсит являється повністю бездифузійним, відбувається без зміни концентрації вуглецю і полягає тільки в зміні кристалічної решітки;
- ґратки мартенситу строго орієнтовані відносно початкової матриці;
- утворення кристала мартенситу займає близько 1 мкс, отже, перетворення відбувається практично миттєво;
- утворення мартенситу можливе тільки при значних переохолодженнях в певному інтервалі температур.

Теорія ізотермічного мартенситного перетворення була сформульована у роботі [40]. Розрахункові і прямі експериментальні дані показують, що при низьких температурах (нижче $\sim 50\text{ K}$) термодинамічна рушійна сила перетворення перестає збільшуватися при зниженні температури. З іншого боку, саме в ділянці низьких температур межа плинності, що визначає опір перебудові ґраток, швидко збільшується. Взаємодія цих двох чинників

призводить до зменшення реальної термодинамічної рушійної сили перетворення.

Наслідком цього є припинення мартенситного перетворення при низьких температурах і зменшення швидкості ізотермічного мартенситного перетворення (ІМП), поява низхідної гілки С-подібної температурної залежності швидкості ІМП. Низхідні гілки С-подібної діаграми при «нормальних» високотемпературних перетвореннях і при ІМП мають, таким чином, різне походження[41,42].

1.1 ТЕРМІЧНА ОБРОБКА СТАЛІ

Термічна обробка полягає у нагріві сталі до вибраної температури, витримці для рівномірного прогріву виробу та завершення фазових перетворень і у подальшому охолодженні з певною швидкістю. Таким чином, головні параметри термічної обробки – температура нагріву t , час витримки τ , швидкість охолодження V_{ox} .

Мета термічної обробки полягає в пошуку належної структури для забезпечення необхідних функцій без жодних змін у хімічному складі металу чи сталі.

1.1.1 Процес аустенізації

Утворення аустеніту в евтектоїдній сталі зі структурою перліту починається при температурі вище рівноважної 727°C . Цей процес здійснюється в дві стадії [5]:

- 1) поліморфне $\alpha \rightarrow \gamma$ перетворення (гратка ОЦК перетворюється в ГЦК);
- 2) розчинення карбідів в аустеніті і перерозподіл вуглецю в твердому розчині.

У результаті цих двох процесів перліт, який складається з фериту з кількістю вуглецю 0,03% та цементиту з кількістю вуглецю 6,67% перетворюється на аустеніт, вміст вуглецю в якому дорівнює його середньому вмісту в сталі. У випадку евтектоїдної сталі це 0,8%.

У легованих сталях на другому етапі перетворення в аустеніті також перерозподіляються легувальні елементи.

Після нагріву вище точки 727°C в аустеніті ще зберігаються нерозчинені частинки цементиту. Внаслідок цього вміст вуглецю в аустеніті менше його концентрації у сталі (0,8%). До того ж спочатку аустеніт неоднорідний: у місцях, що відповідали фериту у перліті, кількість вуглецю менша, ніж у місцях, де були цементитні частинки. З розчиненням карбідів і дифузійним вирівнюванням концентрації вуглецю при підвищенні температури аустеніт стає гомогенним з вмістом вуглецю 0,8%, який відповідає складу сталі.

Для вивчення процесів, що відбуваються в переохоложеному аустеніті, будують діаграму ізотермічного перетворення аустеніту (рис.1.2.)

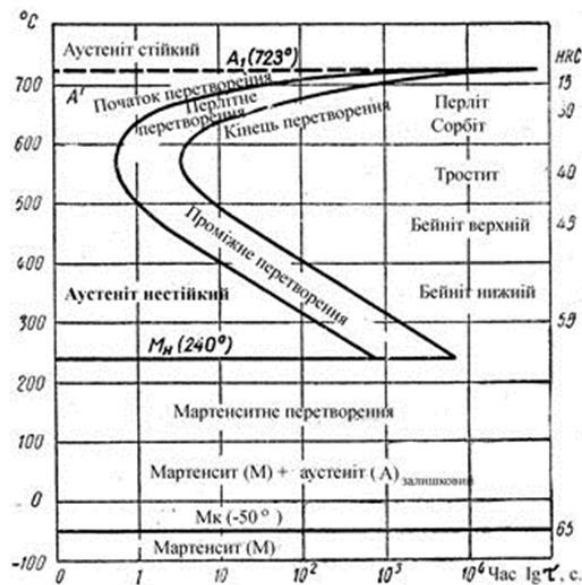


Рис. 1.2. Діаграма ізотермічного розпаду аустеніту

В доевтектоїдних сталях після аустенітного перетворення структура складається з двофазної суміші фериту та аустеніту. З підвищенням температури в міжкритичному інтервалі все більша кількість фериту перетворюється в аустеніт, і після гомогенізації концентрація вуглецю в аустеніті дорівнює його середньому вмісту в сталі[43].

В заевтектоїдних сталях після утворення аустеніту з підвищенням температури відбувається поступове розчинення в ньому цементиту і, після гомогенізації, структура сталі також складається з чистого аустеніту з концентрацією, рівною середньому вмісту вуглецю в сталі.

1.1.2. Розпад аустеніту і утворення перліту

Зі зниженням температури процес дифузії різко уповільнюється, отже, з одного боку збільшення ступеню переохолодження робить процес перетворення більш інтенсивним за рахунок зменшення вільної енергії системи, з іншого боку, зниження температури уповільнює процес за рахунок зниження інтенсивності процесу дифузії та можливості накопичення кількості вуглецю, необхідної для утворення цементиту[43].

На практиці, зі збільшенням ступеню переохолодження швидкість перетворення зростає, досягає при певному значенні переохолодження максимуму, а потім зменшується. Це можна уявити як криву, де на початку швидкість зростає, досягає піку, а потім починає спадати. Така поведінка пояснюється змінами у вільній енергії системи. Температура відіграє ключову роль у визначенні вільної енергії системи. При низьких температурах різниця вільних енергій між початковим і кінцевим станами матеріалу збільшується, що сприяє швидшому перетворенню. Проте, якщо температура стає надто низькою, енергія, необхідна для подолання енергетичного бар'єру, стає занадто великою, і швидкість перетворення починає спадати. Коли аустеніт охолоджується нижче критичної точки (близько 727°C для сталі з вуглецевим вмістом близько 0.8%), він стає термодинамічно нестабільним. Під час охолодження з аустеніту починають утворюватися зародки фериту та цементиту. Ці зародки ростуть і формують шарувату структуру, де чергуються тонкі шари фериту і цементиту. В результаті утворюється перліт, який складається з пластинчастої (ламелярної) структури фериту і цементиту.

Ферит має кубічну об'ємноцентровану решітку (ОЦК) і є більш м'яким та пластичним компонентом, тоді як цементит має орторомбічну структуру і є твердим та крихким компонентом. Перліт виглядає як чергування тонких шарів (пластин) фериту і цементиту, які ростуть з різною швидкістю в залежності від температури охолодження. Чим повільніше відбувається

оохолодження, тим більш виразною буде шарувата структура перліту. При швидшому оохолодженні утворюється дрібнозерниста структура.

Завдяки своїй шаруватій структурі, перліт поєднує властивості фериту (пластичність і м'якість) і цементиту (твердість і крихкість), що забезпечує сталі збалансовані механічні властивості. Перліт є твердішим за чистий ферит, але м'якшим за цементит.

Таким чином, розпад аустеніту з утворенням перліту є ключовим процесом для отримання сталі з бажаними механічними властивостями. Контроль температури і швидкості оохолодження дозволяє металургам впливати на мікроструктуру сталі, а отже і на її кінцеві властивості.[44].

1.2. Мартенситне перетворення [3]

Мартенситне перетворення протікає тільки у тому випадку, якщо швидким оохолодженням аустеніт переохолоджується до низьких температур (200°C і нижче), коли дифузія як вуглецю, так і заліза стає неможливою. При мартенситному перетворенні не проходить перерозподіл компонентів між аустенітом і мартенситом, тому його можна розглядати, як фазові перетворення в однокомпонентній системі.

Для початку мартенситного перетворення необхідно велике переохолодження аустеніту при якому значення різниці об'ємної вільної енергії аустеніту і мартенситу буде більшим за приріст поверхневої та пружної енергії. Таким чином, мартенситне перетворення носить бездифузійний характер, воно проходить шляхом зсуву і не супроводжується зміною складу твердого розчину.

Мартенситне перетворення не можна подавити швидким оохолодженням, як це можливо при дифузійних перетвореннях. Коли аустеніт переохолоджується до температури, що відповідає точці початку мартенситного перетворення (приблизно 200°C), він починає перетворюватися на мартенсит. Для продовження цього перетворення необхідно безперервно оохолоджувати сталь. Якщо оохолодження зупинити, мартенситне перетворення також зупиниться. Це кардинально відрізняє

мартенситне перетворення від дифузійного перлітного перетворення, яке проходить повністю в ізотермічних умовах.

Кількість утвореного мартенситу залежить від температури, до якої охолоджений зразок, і описується мартенситною кривою. Чим нижча температура, тим більше утворюється мартенситу. Зростання кількості мартенситу відбувається за рахунок утворення нових кристалів, а не через ріст вже існуючих, які мають когерентну межу. При досягненні певної температури для кожної сталі перетворення аустеніту в мартенсит припиняється. Ця температура закінчення мартенситного перетворення називається температурою мартенситного перетворення..

1.2.1. Легуючі елементи і їхній вплив на фазові перетворення

У практичному плані великого значення набуває здатність легуючих елементів до уповільнення розпаду аустеніту в області перлітного перетворення. Це важливий аспект, який сприяє зміцненню матеріалу та вдосконаленню його властивостей. Особливо вражаючим є вплив такої здатності на глибоке прогартовування та переохолодження аустеніту в інтервалі мартенситного перетворення. Цей процес набуває значущості при більш повільному способі охолодження.

Значення легуючих елементів таких як *Cr*, *Ni*, *Mo*, *Mn*, у забезпеченні високої прогартовуваності сталі не може бути переоцінене. Їхні властивості сприяють зміцненню матеріалу, а отже, вони часто знаходять своє застосування в конструкційних легованих сталях.

Також не можна забувати про вплив елементів *V*, *Ti*, *Nb* і частково *W* на кінетику розпаду аустеніту. Вони відіграють своєрідну роль у цьому процесі. Їхня відмінна взаємодія з матеріалом може як сповільнити, так і прискорити розпад аустеніту, залежно від умов нагрівання та охолодження. Важливою особливістю є те, що карбіди цих елементів в ряді випадків виступають як готові центри кристалізації перліту при нормальних температурах гартування. Це призводить до зниження прогартовуваності сталі під впливом цих елементів при її легуванні.

Проте, коли температура нагрівання при гартуванні досягає високих значень, карбіди цих елементів розчиняються в аустеніті, що дозволяє досягти збільшення прогартуваності сталі. Таким чином, контрольоване використання цих елементів в легуванні може забезпечити бажані механічні та структурні властивості матеріалу залежно від потреб конкретних застосувань.

Легуючі елементи мають значний вплив на мартенситне перетворення в сталі, змінюючи температуру початку і закінчення мартенситного перетворення (M_s і M_f), впливаючи на швидкість охолодження, необхідну для утворення мартенситу, і модифікуючи механічні властивості мартенситу. Вуглець є одним з основних елементів, який значно знижує температуру M_s і M_f . При високих концентраціях вуглецю мартенсит стає більш твердим і крихким через утворення твердого розчину, насиченого вуглецем. Вуглець також сприяє утворенню більшої кількості мартенситу при охолодженні, що робить сталь міцнішою, але водночас менш пластичною.

Марганець також знижує температуру M_s і M_f , збільшуючи прокаліваємість сталі. Це дозволяє формувати мартенсит при повільнішому охолодженні, що є важливим для забезпечення бажаних механічних властивостей. Марганець також покращує ударну в'язкість мартенситу, роблячи сталь більш стійкою до ударних навантажень. Нікель, подібно до марганцю, знижує температуру M_s і M_f , підвищує прокаліваємість і забезпечує стабільність аустеніту при нижчих температурах. Нікель також покращує пластичність і ударну в'язкість мартенситу, що дозволяє зберігати хороші механічні властивості навіть при низьких температурах.

Хром знижує температуру M_s і M_f і збільшує прокаліваємість, додаючи сталі корозійну стійкість. Він покращує твердість мартенситу, що робить сталь більш зносостійкою і довговічною. Молібден підвищує прокаліваємість сталі, знижує температуру M_s і M_f і сприяє зменшенню крихкості при низьких температурах. Це дозволяє сталям, легуваним молібденом, зберігати міцність і твердість у холодному кліматі.

Ванадій сприяє утворенню дрібнозернистої структури, знижує температуру Ms і Mf і підвищує прокаліваємість. Він додає сталі міцність і твердість, що робить її придатною для використання в умовах високих навантажень. Кремній трохи підвищує температуру Ms і Mf, але його вплив на мартенситне перетворення менший у порівнянні з іншими елементами. Кремній підвищує міцність і твердість сталі, роблячи її більш стійкою до деформацій.

1.3. Математичний опис аустенітного перетворення

Автори теоретичної роботи [45,46] розрахували період нестационарності зародження при бездифузійних фазових перетвореннях:

$$\tau_0 = \beta \cdot \frac{18k\sigma}{\pi v_m d^4} \cdot \frac{T}{\Delta f^2} \cdot e^{\frac{U}{kT}} \quad (1.5)$$

де Δf - об'ємна різниця вільних енергій γ - і α -фаз, U - енергія активації переходу атомів через міжфазну межу, k - константа Больцмана, d - діаметр атома, σ - енергія міжфазної межі, v_m - частота коливань атомів; коефіцієнт β дорівнює 4,8.

Оцінки періоду нестационарного зародження при $\gamma \rightarrow \alpha$ переході в сплаві показали напрочуд хорошу згоду з С-подібною кривою роботи для 5% фази, що утворюється. Це дозволило зробити висновок про важливу, якщо не основну, роль періоду нестационарності в кінетиці переходу. Проте можна відмітити дві обставини, які не дозволяють повністю прийняти таку точку зору. По-перше, якщо використати результати теорії для критичного розміру зародка

$$\rho_{cr} = \frac{2\sigma}{\Delta f} \quad (1.6)$$

і лінійної швидкості росту,

$$\omega = \frac{\pi^4}{9kT} \cdot v\Delta f \cdot e^{-\frac{U}{kT}} \quad (1.7)$$

то період нестационарності можна виразити інакше:

$$\tau_0 \cong 4,48 \cdot \rho_{cr} / \omega \quad (1.8)$$

Він приблизно в п'ять разів більше тривалості зростання зародка від одноатомного розміру до критичного. Але важливішою є інша обставина. Як відомо, для фазового переходу ізотермічна кінетика описується рівнянням Аврамі

$$f = 1 - \exp(-K\tau^n) \quad (1.9)$$

де f - частка перетвореного об'єму, а τ - тривалість розпаду γ -фази, використання осей діаграми 2 дозволяє визначити кінетичні коефіцієнти K і n (рис.1.3,1.4), оскільки

$$\ln(-\ln(1-f)) = \ln K + n \ln \tau \quad (1.10)$$

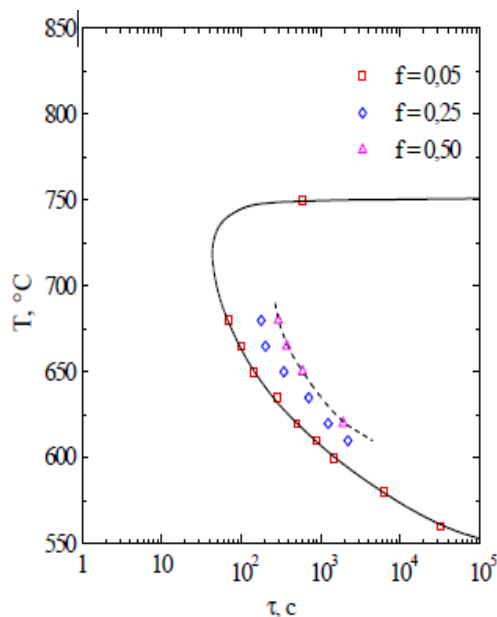


Рис. 1.3. Експериментальна діаграма розпаду γ -фази сплаву

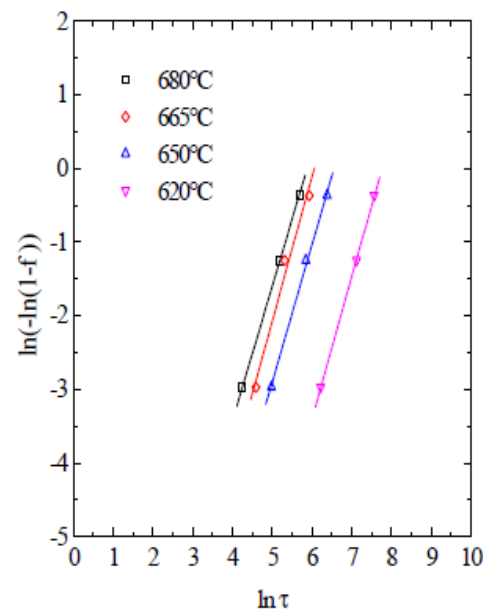


Рис. 1.4. Залежності $\ln(-\ln(1-f))$ від $\ln \tau$ для сплаву

Проте усупереч існуючій думці, що $n=4$, для сплаву Ентіна [39] при всіх температурах дослідження параметр $n \approx 2$, а для чистішого сплаву, вивченого Хонікомбом, n близько до 4 тільки для початкових стадій розпаду і надалі наближається до 1. З позицій теорії Кана [4] цей результат означає, що основний етап перетворення проходить в умовах, коли місця зародження на гранях ($n=1$) або на ребрах ($n=2$) меж аустенітних зерен вже вичерпані, і процес розпаду лімітується зростанням зародків. У цьому випадку кінетичний параметр K залежить тільки від швидкості зростання ω :

$$K = \mu\omega^n,$$

а час досягнення доли розпаду f дорівнює:

$$\tau(f) = \frac{(-\ln 1 - f))^{\frac{1}{n}}}{\mu^{\frac{1}{n}}\omega} = \beta \frac{(-\ln(1 - f))^{\frac{1}{n}}}{\Delta F - \Delta F_s} RT e^{\frac{U}{RT}} \quad (1.11)$$

де μ і β - постійні коефіцієнти; β включає коефіцієнт рухливості меж. На основі рівняння вдається побудувати теоретичні діаграми розпаду γ -фази, дуже близькі до експериментальних.

Але після проведення аналізу, розрахунки кінетичних діаграм, отриманих у даній роботі, що засновані на рівняннях Мейля-Колмогорова, тобто для $n=4$, не приводять до правильних результатів. Треба використовувати реальні значення n в рівнянні Аврамі для моделювання теоретичних діаграм кінетики розпаду аустеніту, що наближені до експериментальних даних.

Після аналізу існуючих теорій ізотермічного перетворення аустеніту були проведені додаткові дослідження. [47].

Розрахунки, зроблені у цій роботі, призвели до С-образної діаграми розпаду γ -фази за формулою:

$$\tau(f) = \beta \frac{(-\ln 1 - f))^{\frac{1}{n}}}{\Delta F - \Delta F_s} RT e^{\frac{U}{RT}}, \quad (1.12)$$

де ΔF – молярна різниця вільних енергій фаз, ΔF_s відповідає супротиву руху міжфазної межі через дефекти кристалічної ґратки і домішок, β –

константа.

Для подальшого вивчення кінетики розпаду аустеніту у сплаві $Fe-9\%Cr$ були розглянуті перетворення аустеніту в феррит у трьох сплавах з різним вмістом вуглецю і різних температурних режимах аустенізації[48,49].

Результатом даної наукової публікації стали наступні висновки: утворення фериту в сплавах підпорядковується кінетичній теорії Кана: існує початковий період, протягом якого зародження і зростання відбуваються одночасно, а параметр $n = 4$. У другому періоді місця зародження вичерпуються, кінетика визначається лише зростанням, одномірним при $n = 1$ і двовимірним при $n = 2$. Зміна n має бути пов'язано зі зміною характеру зародження і форми зростаючих α -кристалів.

В роботі [40] були розглянуті базові експериментальні дані кінетики ізотермічного мартенситного перетворення (ІМП) і зв'язок ІМП з іншими кінетичними варіантами фазових перетворень і з іншими низькотемпературними термічно активованими процесами у твердих тілах. Було докладно розглянуто вплив пластичної деформації і напруги, вплив магнітного поля на ІМП, автокаталітичний ефект при МП, а також ІМП в мідних сплавах і були отримані наступні висновки:

1. Швидкість зростання кристалів при ІМП, так само як і при атермічному МП, наближається до швидкості звука. Це означає, що термічно активованим етапом ІМП, що визначає його кінетику, є термічно активоване зародження кристалів ізотермічного мартенсита[50].

2. Температурна залежність швидкості ІМП, як і інших фазових перетворень, описується кривою з точкою максимуму. Найнижчою температурою, за якою ще фіксується ІМП, є температура близько до 77 К.

3. Швидкість ІМП залежить від попередньої пластичної деформації, опромінення нейтронами і від дефектної структури вихідної фази.

4. При фіксованій температурі збільшення термодинамічної рушійної сили перетворення за рахунок зовнішнього магнітного поля призводять до збільшення швидкості ІМП, аж до переходу в атермічне МП.

Вивчення ІМП показує, що при низьких температурах можливий спонтанний розвиток процесів, що тривало протікають, що призводять до значної зміни структури і властивості матеріалу. Нарешті, під час аналізу результатів експериментів можна побачити, що в описі кінетики низькотемпературних перетворень необхідно враховувати сильну залежність енергії активації від термодинамічної рушійної сили[51].

З огляду на цю обставину необхідне подальше дослідження ІМП з метою створення фізичної моделі таких процесів.

Вивчення природи мартенситних перетворень не припиняється й дотепер. У дослідженні [52] розглядається роль попереднього розміру зерна аустеніту (ПРЗА) у мартенситному перетворенні в низьковуглецевих сталях. Кінетика перетворення була експериментально вивчена для ПРЗА в діапазоні від 6 мкм до 185 мкм, і теоретично проаналізована на основі швидкості зародження і термодинамічного балансу між хімічною рушійною силою та опором, який чинить аустеніт прогресуванню перетворення. Спостерігається, що подрібнення зерна зміщує початкову температуру мартенситу до нижчих значень і прискорює швидкість перетворення на початкових стадіях. На більш пізньому етапі, коли утворюється приблизно 30% мартенситу, швидкість перетворення швидко знижується для невеликих ПРЗА, тоді як більші швидкості зберігаються в крупнозернистих мікроструктурах. Зміна швидкості утворення мартенситу з розміром зерна залежить від щільності зародків і міцності аустеніту. Це дослідження дозволяє оптимізувати параметри обробки для розробки над високоміцних сталей, які потребують утворення контрольованої фракції мартенситу.

Для кількісного опису прогресу об'ємної частки мартенситу під час охолодження f_{α} зазвичай використовується модель Койстінена-Марбургера (КМ) [52], яка дає наступну формулу:

$$f_{\alpha} = 1 - \exp(-\alpha_m(T_{KM} - T)), \quad (1.13)$$

де T_{KM} – початкова температура мартенситу Койстінена-Марбургера, а α_m – параметр загальної швидкості. Саме це рівняння було підігнано до експериментальних кривих.

Оскільки зміцнення аустенітної фази виступає як основний механізм контролю кінетики мартенситного перетворення, швидкість перетворення швидко зменшується, як тільки деякий об'єм аустеніту споживається, і для подолання надлишкової деформації та продовження процесу потрібне більше переохолодження перетворення. Таким чином, утворення подібних фракцій мартенситу вимагає меншого переохолодження (менший час) у дрібнозернистих, ніж у крупнозернистих мікроструктурах. Це відображається в невеликому збільшенні параметра швидкості Коїстінена-Марбургера (α_m) і менших відхиленнях між початковою температурою мартенситу (M_s) і початковою температурою КМ у міру зниження ПРЗА. З іншого боку, після утворення певної частки мартенситу швидкість перетворення швидко знижується в дрібнозернистих мікроструктурах за рахунок значного зміцнення аустеніту через: 1) ефект Холла-Петча; 2) утворення більш рівновісних мартенситних планок для низьких ПРЗА; 3) придушення самоакомодації багатоваріантним утворенням і, таким чином, релаксації енергії напруги. Ці фактори сприяють збільшенню роботи аустеніту проти руху поверхні розділу мартенсит/аустеніт (прогрес перетворення), що в поєднанні з роботою тертя твердого розчину, яку здійснює решітка аустеніту, і пружною деформацією та міжфазною енергією, пояснюють експериментальне зменшення в M_s , яке спостерігається, коли ПРЗА зменшується від 185 мкм до 6 мкм. Експериментальні спостереження пояснюються термодинамічно, через модель M_s , де всі необхідні параметри можна отримати та інтерпретувати на фізичній основі, що дозволяє передбачити вплив ПРЗА на кінетику утворення мартенситу. Ці результати дозволяють оптимізувати мікроструктурний дизайн передових високоміцних

сталей, які включають утворення контрольованої фракції мартенситу[53].

1.4. Задача Стефана

Ще одним прикладом фазового перетворення у твердому тілі є Задача Стефана (ЗС). З математичної точки зору ЗС є крайовою задачею для диференціального рівняння в частинних похідних, яка описує переміщення з часом межі розділу двох фаз[54].

Задача Стефана відіграє критичну роль у різних наукових та практичних областях через її важливість для розуміння теплопередачі та випромінювання. У сучасному світі, де питання сталої енергетики та ефективного використання ресурсів набувають першочергового значення, розуміння механізмів теплопередачі та випромінювання допомагає розробляти більш ефективні та енергозберігаючі системи опалення, охолодження та виробництва електроенергії. Вивчення Задачі Стефана має важливе значення для розробки технологій відновлюваної енергії, таких як сонячні батареї та термоелектричні пристрої. Розуміння теплопередачі допомагає збільшити ефективність перетворення тепла в електричну енергію.

Розв'язок задачі Стефана, яка виникає в контексті термодинамічних перетворень в речовинах, таких як танення та замерзання, стикається зі значними труднощами через її складний характер[55,56]. Задача Стефана включає нелінійні рівняння теплопровідності та інші рівняння, які мають нелінійні властивості. Крім того, розподіл температури та інших параметрів може бути неоднорідним, особливо під час перетворень фаз. Розв'язання задачі Стефана вимагає інтеграції знань з фізики теплопровідності, математичного аналізу та числових методів.

1.4.1. Методи розв'язку Задача Стефана

Сучасні числові методи, такі як метод скінченних елементів (Finite Element Method, FEM) і метод скінченних різниць (Finite Difference Method, FDM), дозволяють розв'язувати рівняння теплопровідності та розраховувати розподіл температур та випромінювальну потужність в складних геометричних конфігураціях[57]. Ці методи використовують обчислювальні

алгоритми для апроксимації диференціальних рівнянь та моделювання теплових процесів.

Проте, деякі числові методи можуть бути дуже обчислювально витратними, особливо для складних геометричних конфігурацій та високої роздільної здатності. Результати можуть залежати від розділеності обчислювальної сітки. Невірно побудована сітка може призводити до значних неточностей.

Числові методи розв'язку Задача Стефана

У статті [58] розглянуто та порівняно кілька ефективних числових методів для розв'язання задач Стефана в одновимірному випадку. Звернено увагу, що обмежено розгляд лише деякими задачами та геометриями, включаючи плавлення на півплощині, радіальну циліндричну та сферичну солідацію. В статті представлено кілька методів для розв'язання задач Стефана, зокрема: метод ентальпії, метод іммобілізації на границі, метод збурень, вузловий інтегральний метод та метод теплового балансу інтегралу. Дані методи застосовано до різних тестових задач, і на основі отриманих результатів зроблено корисні висновки та коментарі, які можуть бути корисні для майбутнього використання цих методів[59].

Метод ентальпії: цей метод базується на рівнянні збереження енергії та використовує ентальпію для опису фазового переходу. Головна ідея полягає в розгляді різниці між ентальпіями фаз та використанні цієї різниці для побудови рівняння, що описує рух границі фаз. Формули та рівняння можуть бути складними та включати параметри матеріалу та умови задачі.

Метод іммобілізації на границі[60]: цей метод передбачає включення рухомої границі в область дифузії та використання техніки іммобілізації границі для числової інтеграції рівняння у часі. Він базується на зсуві координати для того, щоб границя залишалася на місці.

Метод збурень[60]: у цьому методі розв'язок розшукується у вигляді ряду за малим параметром, який представляє величину збурення фронту. Ряд підставляється в рівняння, і відповідні коефіцієнти знаходяться шляхом

порівняння коефіцієнтів при однакових ступенях малих параметрів.

Вузловий інтегральний метод[61]: в цьому методі використовуються вузлові інтегральні рівняння для апроксимації рівняння з фронтом зміцнення/плавлення. Одна із головних ідей - розбити фронт на деяку кількість вузлів та апроксимувати інтегральне рівняння через ці вузли.

Метод теплового балансу інтегралу[61]: цей метод базується на рівності теплового балансу на фронті. Швидкість зміни розміру фронту визначається через вхідну та вихідну теплову потужність.

В підсумку [58], жоден з наведених методів не є основним чи беззаперечно вірним. Для різних випадків і початкових даних можна використовувати той чи інший метод.

Метод скінченних елементів

У дослідженні [62] надано загальний огляд розширеного методу скінченних елементів та його застосування до моделювання першорядних фазових переходів. Проведено детальні числові дослідження, фокусуючись на одновимірному випадку і досліджуючи: просторові і часові дискретизації, різні числові техніки для забезпечення умов на інтерфейсі, та різні підходи до обробки злиття елементів. Також розроблено та порівнюється підхід кінцевих елементів із вбудованим розривом із розширеним методом кінцевих елементів, щоб можна було дати більш чітке розуміння останнього. Представлені числові приклади танення/замерзання в пласкій, циліндричній та сферичній симетриях, і результати порівняно з аналітичними розв'язками.

В статті розглядається математичний та обчислювальний аспекти проблеми Стефана, яка є відображенням фазових переходів першого порядку, спричинених зміною температури, в матеріалах. Початково сформульована у контексті формування та танення льоду, математична структура цієї проблеми має широкі застосування в різних наукових і технологічних галузях. Стаття зосереджується на числовому вирішенні проблеми, зокрема у контексті переходу від твердої до рідкої фази (такий як замерзання рідини). При цьому вирішуються дві ключові задачі: опис

еволюції фазової межі та дискретизація температурного поля, зокрема врахування розриву градієнта температури на межі фаз.

Два основних підходи розглядаються: явні та неявні методи[63]. У явних методах застосовується лагранжівський підхід, де деякі точки-маркери на фазовій межі відстежуються явно. Наприклад, у разі використання методу скінченних елементів для дискретизації температурного поля, сітка генерується на початковому етапі так, щоб границя елементів лежала на фазовій межі. Вузли скінчених елементів на межі використовуються як точки-маркери, і на кожному кроці часу вони переміщуються залежно від розв'язку задачі теплопередачі у кожній фазі. З часом початкова сітка скінчених елементів може стати занадто спотвореною, і необхідно згенерувати нову сітку в областях твердої і рідкої фаз.

Це є недоліком цього дослідження, і повинно бути усунуто за допомогою пошука нових, фізично обґрунтованих моделей розв'язку ЗС.

З імпліцитними методами, навпаки, обчислювальна сітка зазвичай залишається незмінною, а позицію межі визначають непрямим шляхом з допомогою полів, визначених на всій області (і адекватно дискретизованих)[64]. Прикладами неявних методів є метод ентальпії, метод поля фази та метод рівня поверхні.

Було проведено детальне числове дослідження похибки та порівняльний аналіз. [62] Хоча підхід на основі штрафних функцій може бути застосований на практиці, метод множників Лагранжа дозволяє точно застосувати обмеження та не вимагає налаштування нереалістичного коефіцієнта штрафу. Метод множників Лагранжа може бути застосований безпосередньо до дискретизованих обмежень. Однак, як вбачається з цитованих джерел, у випадках вищих розмірностей слід звернути увагу на вибір простору множників Лагранжа для досягнення стійкості. Також було обговорено інтерполяцію для елементів змішання. Висновок, що без застосування збагачення в цих елементах покращується точність без яких-

небудь особливих недоліків, повинен також застосовуватися у випадках вищих розмірностей.

Різноманіття методів дослідження задачі Стефана не гарантує її вирішення, тому існує необхідність пошуку нових теоретичних моделей розв'язку ЗС з метою спрощення розрахунків та зменшення кількості методів для її розв'язання.

Висновки до розділу 1

1. Мартенситні перетворення важливі для розуміння та вдосконалення властивостей матеріалів. Мартенсит використовується в технології термообробки сталі для підвищення міцності і твердості матеріалу. Дослідження цих перетворень допомагають вдосконалити процеси обробки матеріалів і розробляти нові матеріали з вдосконаленими властивостями. Мартенситні перетворення важко вивчати експериментально через його мікроскопічний характер і високу швидкість перетворення. Тому не завжди можна докладно спостерігати його динаміку і властивості.

2. Деякі моделі МП працюють лише в обмежених умовах температури, тиску або складу матеріалу. Це обмежує їхню застосовність для більш широкого спектру ситуацій. Експериментальні дослідження не завжди узгоджуються з результатами, отриманими за допомогою моделей. Це може свідчити про те, що існуючі моделі не повністю враховують усі аспекти процесу.

Отже, постає питання вивчення і розробка нових моделей прямих мартенситних перетворень, що будуть більш універсальними та наближеними до вже відомих експериментів. Тому в цій роботі запропонована нова фізична модель мартенситних перетворень у кристалічних середовищах, яка заснована на принципі детальної рівноваги.

3. Задача Стефана є важливою для розуміння теплопередачі та випромінювання, і вона відіграє критичну роль у різних наукових та практичних областях. Сучасні числові методи, такі як метод скінченних елементів та метод скінченних різниць, стали корисними інструментами для

розв'язання задачі Стефана в складних геометричних конфігураціях. Однак вони можуть бути складними в обчислюванні та залежати від точності обчислювальної сітки. Оскільки жоден із методів не є універсальним, існує потреба в пошуку нових теоретичних моделей для спрощення розв'язку задачі Стефана та зменшення обчислювальних зусиль.

РОЗДІЛ 2.

МОДЕЛЬ ІНДУКОВАНИХ ІЗОТЕРМІЧНИХ МАРТЕНСИТНИХ ПЕРЕТВОРЕНЬ

2.1. Формулювання фізичної моделі фазових перетворень у кристалічних середовищах

Враховуючи відмічений вище незбіг теоретичних моделей з експериментальними результатами мартенситних перетворень в сталях автором було запропоновано висунути іншу фізичну модель [65,66,67], яка базується на моделі індукованих переходів квазічастинок між енергетичними рівнями, що розвинута А. Ейнштейном [47].

Розглянемо цю модель. Модель переходів схематично зображена на рис. 2.1. (а).

Фазові перетворення в кристалічних середовищах опишемо за допомогою спрощеної моделі схематично зображеної на Рис. 2.1. (б) дворівневої системи.

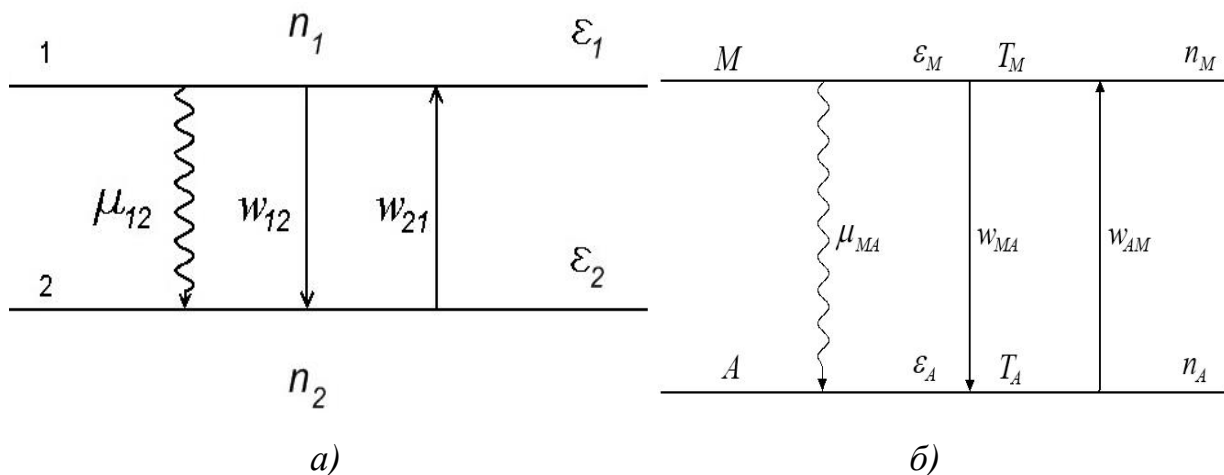


Рис.2.1. а) Модель індукованих процесів у дворівневих системах; б) Дворівнева система АМ вуглецевої сталі: n_A - кількість елементарних комірок фази А; n_M - кількість елементарних комірок фази М

Наведемо параметри дворівневої системи.

При зниженні температури від T_H до T_K структурне перетворення сталі А в М можна охарактеризувати, як індукований перехід зі стабільного стану А (рівень А) в метастабільний стан М (рівень М), і приписати цьому

переходу ймовірність індукованих переходів w_{AM} (див. Рис. 2.1.(б)). Будемо вважати, що стабільний стан характеризується енергією ε_A і температурою T_A , а метастабільне - ε_M і T_M відповідно. Причому справедливі нерівності: $\varepsilon_A < \varepsilon_M, T_A > T_M$.

На Рис. 2.1. (б) стрілками показані напрямки переходів з позначенням величини ймовірності: μ_{MA} - ймовірність спонтанного переходу; w_{MA} і w_{AM} - ймовірності індукованих переходів з верхнього рівня М на нижній рівень А і назад відповідно.

Таким чином, описані вище фазові перетворення в кристалічних середовищах за своїми характерними ознаками можуть бути описані за допомогою дворівневої моделі, основи якої сформульовані А. Ейнштейном [47].

Стан рівноваги забезпечується ймовірністю спонтанних переходів μ_{MA} кристалічної модифікації М в кристалічну модифікацію А. Математично воно описується рівняннями:

$$\frac{dn_A}{dt} = \mu_{MA} n_M = -\frac{dn_M}{dt}. \quad (2.1)$$

З (2.1) випливає, що приріст числа елементарних осередків фази А дорівнює зменшенню числа елементарних осередків фази М. При цьому загальне число елементарних осередків фази А і фази М постійне.

Для заданої концентрації вуглецю ПМП починається не відразу після переходу через точку T_0 , а в точці T_H , яка розташована значно нижче T_0 (для сталі ця різниця близько 200 °). Завершується ПМП при температурі T_K . Температура оптимальної гартування T_3 при ПМП обирається експериментально, і повинна задовольняти умові $T_H < T_3 = Ac_3 + (30 \dots 50)^\circ \text{C}$, де температура визначається по діаграмі залізо - вуглець.

У процесі загартування атоми решітки відчувають в кожен момент часу певні зміщення, так звані теплові коливання. У квантовій теорії для опису таких зсувів використовується поняття фонона, що характеризується як

квазічастинка, яка володіє певною енергією $\varepsilon = \hbar\omega$ і квазіімпульсом $\vec{p} = \hbar\vec{k}$, де ω, \vec{k} - частота і хвильове число класичної хвилі.

Розглянемо тепер наслідки зниження температури вуглецевої сталі. В цьому випадку фонони, що поширюються по кристалічній решітці, придбають енергію, порівнянну енергетичним бар'єром фазового переходу. Вплив таких фононів на кристалічну решітку вуглецевої сталі буде ініціювати переходи елементарних осередків як зі стану М у А, так і зі стану А в М. Такі переходи є індукованими, тому що викликані зовнішнім впливом (зниженням температури). Позначимо ймовірність індукованих переходів зі стану А в М величиною w_{AM} , а в зворотному напрямку - w_{MA} . Зрозуміло, що ймовірність індукованих процесів пропорційна кількості фононів:

$$w_{AM} = \hat{w}_{AM}N; w_{MA} = \hat{w}_{MA}N, \quad (2.2)$$

де $\hat{w}_{AM}, \hat{w}_{MA}$ - коефіцієнти пропорційності, N - число фононів.

Індуковані процеси змінять вигляд рівнянь (2.1), тому що в них необхідно врахувати спад числа частинок з рівня М на рівень А, і прибуття їх з рівня А на рівень М:

$$\frac{dn_M}{dt} = -(\mu_{MA} + \hat{w}_{MA}N)n_M + \hat{w}_{AM}Nn_A = -\frac{dn_A}{dt}. \quad (2.3)$$

Співвідношення між вірогідністю переходів встановимо, слідуючи запропонованим А. Ейнштейном міркуванням [47].

Фононний газ підпорядковується статистиці Бозе - Ейнштейна [47]. Тому в тепловій рівновазі середнє число фононів визначається функцією:

$$N = \left(e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1 \right)^{-1}. \quad (2.4)$$

де \hbar - постійна Планка.

З іншого боку, в статичній рівновазі $\frac{dn_M}{dt} = 0$, $an_M = Ce^{-\frac{\varepsilon_M}{kT}}$ й $n_A = Ce^{-\frac{\varepsilon_A}{kT}}$, де T, k - температура і постійна Больцмана відповідно.

Рівняння (2.3) в цьому випадку призводить до співвідношення:

$$N = \mu_{MA} \left(\widehat{w}_{AM} e^{\frac{\varepsilon_M - \varepsilon_A}{kT}} - \widehat{w}_{MA} \right)^{-1}. \quad (2.5)$$

де $\varepsilon_M - \varepsilon_A = \hbar\omega$

Оскільки вирази (2.4) і (2.5) справедливі при будь-яких температурах, то в (2.5) необхідно покласти:

$$\mu_{MA} = \widehat{w}_{MA} = \widehat{w}_{AM} \quad (2.6)$$

При взаємодії з дворівневою системою число фононів змінюється. Зменшення кількості елементарних осередків фази М призводить до такого ж збільшення кількості фононів (випромінювання фононів), а збільшення - до такого ж зменшення кількості фононів (поглинання фононів). На підставі вищевикладеного, рівняння зміни кількості фононів з урахуванням (2.6) можна представити у вигляді:

$$\frac{dN}{dt} = \mu_{MA}(1 + N)n_M - \mu_{MA}Nn_A. \quad (2.7)$$

Повна система рівнянь, що описує ПМП у вуглецевій сталі має вигляд:

$$\begin{aligned} \frac{dn_M}{dt} &= -\mu_{MA}(1 + N)n_M + \mu_{MA}Nn_A = -\mu_{MA}n_M + \mu_{MA}(n_A - n_M)N, \\ \frac{dn_A}{dt} &= -\frac{dn_M}{dt} = \mu_{MA}n_M - \mu_{MA}(n_A - n_M)N, \\ \frac{dN}{dt} &= \mu_{MA}(1 + N)n_M - \mu_{MA}Nn_A = \mu_{MA}n_M - \mu_{MA}(n_A - n_M)N. \end{aligned} \quad (2.8)$$

Атермічне ПМП вуглецевої сталі

Розглянемо атермічне ПМП, яке відбувається при зниженні температури $T(t)$ в діапазоні $T_K \leq T(t) \leq T_H^*$, де T_H^* - початкова температура дослідження $T_K \leq T_H^* \leq T_H$.

Умовно представимо залежність температури $T(t)$ від часу t у вигляді:

$$T(t) = T_H^* - \frac{T_H^* - T_K}{t_{AM}} t \quad (2.9)$$

де t_{AM} - характерний час зміни температури при ПМП.

Через зміни температури в часі невідомі n_M, n_A, N , і ймовірність індукованих переходів μ_{MA} в рівняннях (2.8) повинні залежати також від температури. Повна похідна за часом при цьому перетворюється в такий спосіб:

$$\frac{d...}{dt} = \frac{\partial...}{\partial t} - \gamma \frac{\partial...}{\partial T} \quad (2.10)$$

$$\text{де } \gamma = \frac{(T_H^* - T_K)}{t_{AM}}.$$

Таким чином, врахування зміни температури вуглецевої сталі при ПМП перетворює систему рівнянь (2.8) до вигляду:

$$\begin{aligned} \frac{\partial n_M}{\partial t} - \gamma \frac{\partial n_M}{\partial T} &= -\mu_{MA}(T)(n_M - (n_A - n_M)N), \\ \frac{\partial n_A}{\partial t} - \gamma \frac{\partial n_A}{\partial T} &= \mu_{MA}(T)(n_M - (n_A - n_M)N), \\ \frac{\partial N}{\partial t} - \gamma \frac{\partial N}{\partial T} &= \mu_{MA}(T)(n_M - (n_A - n_M)N). \end{aligned} \quad (2.11)$$

Якщо в рівняннях (2.11) покласти кількість фононів досить великим, тобто вважати що $N \gg n_A, n_M$, то вони приймають більш простий вигляд:

$$\begin{aligned} \frac{\partial n_M}{\partial t} - \gamma \frac{\partial n_M}{\partial T} &= \mu_{MA}(T)(n_A - n_M)N, \\ \frac{\partial n_A}{\partial t} - \gamma \frac{\partial n_A}{\partial T} &= -\mu_{MA}(T)(n_A - n_M)N, \\ \frac{\partial N}{\partial t} - \gamma \frac{\partial N}{\partial T} &= -\mu_{MA}(T)(n_A - n_M)N. \end{aligned} \quad (2.12)$$

Модельні спрощення і розв'язок рівнянь для ПМП.

Для вирішення системи (2.12) необхідно задати залежність ймовірності індукованих переходів від температури. Для простоти розгляду будемо вважати, що ПМП здійснюється методом загартування в одному охолоджувачі [5]. При цьому методі гартування зразки металу, нагріті до

температури гарту, занурюють в гартівну рідину (вода, масло і т. д.), в якій вони перебувають до повного охолодження.

В [3, 52] відзначено, що з пониженням температури спостерігається збільшення швидкості ПМП фази А в фазу М до максимального значення, а потім вона зменшується до нуля. Таку залежність швидкості ПМП від температури можна якісно пояснити виходячи з першого рівняння (2.12). Швидкість ПМП визначається його правою частиною. Збільшення швидкості ПМП з пониженням температури можна інтерпретувати як збільшення ймовірності індукованих переходів $\mu_{MA}(T)$. На початку процесу співмножник $(n_A - n_M)$ в цьому рівнянні є досить великим, і не впливає на швидкість ПМП. Однак, у міру зрівнювання кількості елементарних осередків фази А і фази М співмножник $(n_A - n_M)$ наближується до нуля. Через це швидкість ПМП зменшується, і, як зазначено вище, наближується до нуля.

На підставі наведених вище міркувань подамо залежність ймовірності індукованих переходів від температури в модельному вигляді:

$$\mu_{MA}(T) = \mu(T_H^*) \left(1 - \left(1 - \beta k \left(\frac{T_H^* - T}{T_H^* - T_K} \right)^k \right) \exp \left[- \left(\frac{T_H^* - T}{T_H^* - T_K} \right)^k \right] \right). \quad (2.13)$$

де $\mu(T_H^*) > 0$ - залежна від T_H^* амплітуда ймовірності індукованих переходів, $\beta, k > 0$ - константи, величина яких визначається експериментально.

Вираз (2.13) при початковій температурі ПМП $T = T_H^*$ задає ймовірність індукованих переходів рівною нулю: $\mu_{MA}(T_H^*) = 0$. Звідси випливає, що при температурі T_H^* процес ПМП відсутній.

Зі зниженням температури ймовірність індукованих переходів збільшується, і при температурі мартенситної точки $T = T_K$ досягає значення: $\mu_{MA}(T_K) = \mu(T_H^*)(1 - (1 - \beta k)e^{-1})$. Причому, для добутку параметрів $\beta k > 1$ виконується співвідношення $\mu_{MA}(T_K) > \mu(T_H^*)$.

Введемо в рівняннях (2.12), з урахуванням думки (2.13), нову змінну:

$$\xi(t, T) = t + F(T, T_H^*), \quad (2.14)$$

$$\text{де } F(T, T_H^*) = \frac{1}{\gamma} \int_{T_H^*}^T \left\{ 1 - \left(1 - \left(1 - \beta k \left(\frac{T_H^* - x}{T_H^* - T_K} \right)^k \right) \exp \left[- \left(\frac{T_H^* - x}{T_H^* - T_K} \right)^k \right] \right\} dx.$$

Оскільки при початковій температурі ПМП, рівній T_H^* , виконується рівність $F(T_H^*, T_H^*) = 0$, то зі зміною часу в інтервалі $0 \leq t < \infty$ нова змінна ξ також змінюється в інтервалі $0 \leq \xi < \infty$.

В результаті переходу до нової змінної рівняння (2.12) спрощуються:

$$\begin{aligned} \frac{dn_M}{d\xi} &= \mu(T_H^*)(n_A - n_M)N, \\ \frac{dn_A}{d\xi} &= -\mu(T_H^*)(n_A - n_M)N, \\ \frac{dN}{d\xi} &= -\mu(T_H^*)(n_A - n_M)N, \end{aligned} \quad (2.15)$$

Рішення системи рівнянь (2.15) визначаються виразами:

$$\begin{aligned} N(\xi) &= \frac{N_{eq}}{1 - \frac{n_{A0} - n_{M0}}{2N_0} \exp(-2\mu' N_{eq} \xi)}, \\ n_M(\xi) &= \frac{\frac{n_{M0} + n_{A0}}{2} - \left(1 + \frac{n_{M0}}{N_0}\right) \frac{n_{A0} - n_{M0}}{2} \exp(-2\mu' N_{eq} \xi)}{1 - \frac{n_{A0} - n_{M0}}{2N_0} \exp(-2\mu' N_{eq} \xi)}, \end{aligned} \quad (2.16)$$

$$n_A(\xi) = n_{M0} + n_{A0} - \frac{\frac{n_{M0} + n_{A0}}{2} - \left(1 + \frac{n_{M0}}{N_0}\right) \frac{n_{A0} - n_{M0}}{2} \exp(-2\mu' N_{eq} \xi)}{1 - \frac{n_{A0} - n_{M0}}{2N_0} \exp(-2\mu' N_{eq} \xi)},$$

де $n_{M0} = n_M(0)$, $n_{A0} = n_A(0)$, $N_0 = N(0)$, $N_{eq} = N_0 - \frac{n_{A0} - n_{M0}}{2}$, $\mu' = \mu(T_H^*)$.

З урахування використаної раніше умови про велику кількість фонових $N_0 \gg n_{A0}, n_{M0} \gg 1$, а також $N(\xi) \approx N_{eq}$, розв'язок (2.16) перетворюються до вигляду

$$n_M(\xi) \approx \frac{n_{M0} + n_{A0}}{2} \left(1 - \frac{n_{A0} - n_{M0}}{n_{M0} + n_{A0}} \exp(-2\mu' N_{eq} \xi) \right), \quad (2.17)$$

$$n_A(\xi) \approx \frac{n_{M0} + n_{A0}}{2} \left(1 + \frac{n_{A0} - n_{M0}}{n_{M0} + n_{A0}} \exp(-2\mu' N_{eq} \xi) \right). \quad (2.18)$$

При аналізі отриманих рішень в області високих температур необхідно враховувати той експериментальний факт, що характерний час процесу охолодження t_{AM} завжди значно більший за час індукованих процесів, тобто справедливим є співвідношення $\mu' t_{AM} \gg 1$.

Таким чином, зважаючи на велику кількість фононів $N_0 \gg 1$, справедливим є співвідношення $2N_{eq}\mu' t_{AM} \gg 1$, що підтверджує досить великий час ПМП.

З (2.17), (2.18) випливає, що кількість елементарних осередків фази А і фази М зі збільшенням параметра ξ від 0 до ∞ змінюється від початкових n_{A0} і n_{M0} до рівної кількості $n_M(\xi)|_{\xi \rightarrow \infty} = n_A(\xi)|_{\xi \rightarrow \infty} = 0.5(n_{A0} + n_{M0})$ для обох фаз. Цей висновок, здавалося б, ставить кількісну межу для ПМП фази А в фазу М. Однак це не відповідає експериментальним даним, які говорять про практично повний перехід фази А в фазу М.

Цю невідповідність може бути усунуто, виходячи з таких міркувань.

З огляду на швидкоплинність процесу ПМП, розіб'ємо його на ланцюжок послідовних подій, час скоєння яких Δt великий у порівнянні з характерним часом ПМП $\Delta\tau \sim (2N_{eq}\mu')^{-1}$, але малий у порівнянні з характерним часом процесу охолодження t_{AM} : $\Delta\tau \ll \Delta t \ll t_{AM}$.

За час Δt протягом дуже короткого інтервалу часу $\Delta\tau \sim (2N_0\mu')^{-1} \ll \Delta t$ в дворівневій системі відбувається ПМП. При цьому, згідно з (2.17), ПМП в дворівневій системі починається при початковій кількості фононів $N = N_0$, і початковій кількості елементарних осередків фази А - n_{A0} і фази М - n_{M0} , а завершується за час порядку $\Delta\tau$ з рівним населенням рівнів: $n_M = n_A = 0.5(n_{A0} + n_{M0})$ і приблизно такою ж кількістю фононів $N_{eq} \approx N_0$.

Після встановлення рівноваги, в цьому ж часовому проміжку Δt з-за зниження температури на рівні A' (див. Рис. 2.5.) спостерігається перехід старої дворівневої системи AM в нову дворівневу систему $A'M$, яка характеризується іншими початковими параметрами: кількість фази М - $n'_{M0} = 0$; кількість фази A' - $n'_{A0} = 0.5(n_{A0} + n_{M0})$; кількість фононів - $N \approx$

N_{eq} . Процес ПМП в дворівневій системі $A'M$, згідно (2.17), завершується також з приблизною кількістю фононів $N = N_{eq} \approx N_0$, і з рівною населеністю рівнів: $n'_M = 0.25(n_{A0} + n_{M0}), n'_A = 0.25(n_{A0} + n_{M0})$.

Далі, у міру охолодження, процес ПМП повторюється в новій дворівневій системі, яка на Рис. 2.5. позначена як $A''M$.

В результаті двох переходів дворівневої системи ($AM \rightarrow A'M$) загальна, яка визначається як $(n_M + n'_M)$, кількість перетвореної фази А дорівнює:

$$n_M + n'_M = 0.5(n_{A0} + n_{M0}) + 0.25(n_{A0} + n_{M0}) \quad (2.19)$$

Процес переходів дворівневої системи з одного стану в інший за час схематично зображено на Рис. 2.2.

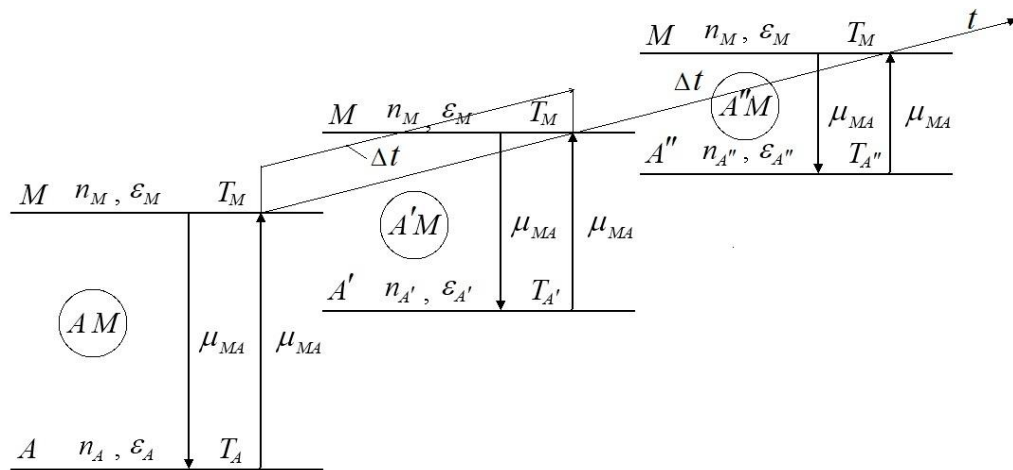


Рис. 2.2. Схема переходів з дворівневої системи AM в дворівневу систему $A'M$ і т.д. за час Δt , які обумовлені зниженням температури: $T_A \rightarrow$

$$T_{A'} \rightarrow T_{A''}$$

Зображений на Рис. 2.2 ланцюжок послідовних переходів дворівневих систем одна в іншу від початку ПМП до його завершення можна описати наступною моделлю.

Розіб'ємо інтервал зміни температури $T_K \leq T(t) \leq T_H^*$ на велике ціле число L ($L \gg 1$) інтервалів так, що в кожному інтервалі розбиття температура постійна, тобто описується ступеневою функцією виду:

$$T_i = T_H^* - i\Delta T \quad (2.20)$$

де $i = 1, 2, \dots, L$, $\Delta T = \frac{(T_H^* - T_K)}{L}$. При цьому проміжок часу Δt можна представити у вигляді $\Delta t = \frac{t_{AM}}{L}$.

На Рис. 2.3. схематично зображено ступеневу зміну температури (2.9), що описується виразом (2.20).

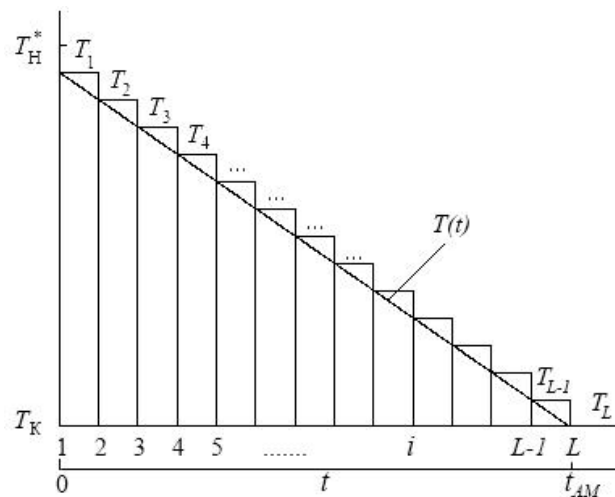


Рис.2.3. Схема ступеневої зміни температури при ПМП

Таке уявлення зміни температури $T(t)$ справедливо, тому що зі збільшенням числа розбиття L ступінчаста функція з хорошою точністю описує задану залежність.

Як зазначено вище, вважаємо, що на p -му кроці ітерацій початкова кількість елементарних осередків фази М дорівнює нулю, а початкова кількість фази А - $2^{-p}(n_{M0} + n_{A0})$.

Розглянемо процес ПМП на кожному кроці ітерацій, починаючи від першого.

Кількість елементарних осередків фази М на першому кроці ітерацій при температурі T_1 визначається виразом (2.17):

$$n_{M1}(\xi) = n_M(\xi(t, T_1)) \quad (2.21)$$

Оскільки при $N_{eq} \approx L$ співвідношення $2N_{eq}\mu'\Delta t \approx 2\mu'\frac{t_{AM}N_0}{L} \gg 1$ переходить в $t_{AM}\mu' \gg 1$, то процес ПМП відбувається досить швидко. Тому формальна заміна змінної $\xi(t, T_1)$ на змінну $\xi(t, T)$ не змінить кількість елементарних осередків фази М в вираженні (2.21):

$$n_{M1}(\xi) = n_M(\xi(t, T)) \quad (2.22)$$

На другому кроці ітерацій, при температурі T_2 , кількість, що перейшла з рівня А на рівень М елементарних комірок визначається вже виразом:

$$n_{M2}(\xi) = \frac{1}{2}n_M(\xi(t, T_2)) \quad (2.23)$$

де в (2.13) температуру T_H^* в вираженні $F(T, T_H^*)$ необхідно замінити на T_1 .

Неважко показати, що для досить великого числа розбиття L змінну $\xi(t, T_2)$ можна замінити на $\xi(t, T_1)$. Дійсно, розкладемо $\xi(t, T_2)$ в ряд поблизу точки T_1 : $\xi(t, T_2) \approx \xi(t, T_1) + \frac{d\xi(t, T_1)}{dT} \Delta T$, де $\Delta T = \frac{(T_H^* - T_K)}{L}$. Для $L \gg 1$ справедлива заміна $\xi(t, T_2) \approx \xi(t, T_1)$, і (2.23) може бути записано у вигляді:

$$n_{M2}(\xi) = \frac{1}{2}n_M(\xi(t, T_1)), \quad (2.24)$$

або з урахуванням (2.22):

$$n_{M2}(\xi) = \frac{1}{2}n_M(\xi(t, T)), \quad (2.25)$$

На p - му кроці ітерацій, при температурі T_p , число доданих елементарних комірок фази М дорівнює:

$$n_{Mp}(\xi) = 2^{-p} \cdot n_M(\xi(t, T)) \quad (2.26)$$

Загальна кількість елементарних комірок n_{MS} , які перейшли з рівня А на рівень М, буде визначатися сумою елементарних комірок, що перейшли на кожному кроці ітерацій:

$$\begin{aligned}
 n_{MS} &= \sum_{p=1}^L n_{Mp}(\xi) = (n_{A0} + n_{M0})n_M(\xi(t, T)) \sum_{p=1}^L 2^{-p} \\
 &= (n_{A0} + n_{M0}) \left(1 - \exp\left(-2\mu' N_{eq} \xi(t, T)\right) \right).
 \end{aligned} \tag{2.27}$$

З (2.27) випливає, що для досить великих значень змінної ξ загальна кількість елементарних осередків фази М прагне до $(n_{A0} + n_{M0})$.

Кількість елементарних комірок фази А визначається з умови збереження загальної кількості частинок:

$$n_{AS} = (n_{A0} + n_{M0}) \exp\left(-2\mu' N_{eq} \xi(t, T)\right). \tag{2.28}$$

Таким чином, на підставі запропонованої автором моделі можна зробити висновок, що зі зниженням температури від початкової $T = T_H^* \leq T_H$ до $T = T_K$ в легованій сталі відбувається ПМП, в результаті якого елементарні кристалічні комірки фази А практично повністю переходять у фазу М.

2.2. Ізотермічне ПМП

Для опису ізотермічного ПМП вуглецевої сталі використовуємо отриманий раніше розв'язок для атермічного ПМП. При цьому характерний час атермічного ПМП t_{AM} необхідно замінити на характерний час ізотермічного ПМП t_{AM}^* , величина якого значно перевищує перше ($t_{AM}^* \gg t_{AM}$). В цьому випадку, при заданій температурі дослідження T_H^* , розв'язок (27) може бути перетворений до виду:

$$\begin{aligned}
 n_{MS} &= (n_{A0} + n_{M0}) \left(1 \right. \\
 &\quad \left. - \exp\left(-2\mu' N_{eq} t \left(1 - \exp\left(-\beta \left(\frac{t}{t_{AM}^*}\right)^k\right)\right)\right)\right)
 \end{aligned} \tag{2.29}$$

Використовуємо отриманий розв'язок (2.29) для підтвердження відповідності запропонованої моделі для опису мартенситних перетворень у сталях (вуглецеве 0.04%С залізо з хромом і нікелем $Fe + 7\%Cr + 2\%Ni$), які, поряд з експериментальними даними прямих мартенситних перетворень для інших видів легованих сталей, наведені в [3, 4].

В [4] вивчення кінетики ізотермічного ПМП легованого заліза проводилося на магнітометрі системи Акулова з фотореєстрацією. Циліндричні зразки діаметром 3,0 мм і довжиною 25 мм нагрівалися в печі з повітряним середовищем при температурі 950 ° протягом 3 хв. Після цього піч зміщала, а на жорстко з'єднаний з системою дзеркал зразок насувалася олов'яна ванна, нагріта до температури дослідження. Температура ванни підтримувалася з точністю ± 2 ° С. Критичні точки визначалися дилатометричними вимірами при швидкості нагріву і охолодження 3 ° С/хв. Для вуглецевої сталі критичні точки $Fe + 7\%Cr + 2\%Ni$ мають наступні значення: температура $A_{c3} = 830^{\circ}C$, температура початку ПМП (мартенситна точка) $T_H = M_H = 455^{\circ}C$.

Дослідження кінетики ізотермічного ПМП цієї марки сталі в дослідженні [4] показало, що при загартуванні з гетерогенної області температур A_{c3} швидкість ПМП спочатку зростає від нуля, досягає максимуму при температурі близько 700 ° С, а потім зменшується, і при температурі нижче 550 ° С приймає дуже мале значення [5].

Важливим питанням в [4,5] є методика вимірювання кількості перетвореної фази при ізотермічному ПМП.

Але спочатку необхідно зазначити, що при охолодженні доєвтектоїдної сталі від області гетерогенної температури $T_3 = A_{c3} + (30\dots 50)^{\circ}C$ [39] (припускаємо, що швидкість охолодження більше критичної) до температури дослідження T_H^* , в інтервалі температур $T_H^* \leq T(t) \leq T_H$ має спостерігатися поява деякої кількості мартенситу.

Так, наприклад, в [4] початок ПМП визначалося появою феромагнітної складової, тобто появою фази М. При різкому охолодженні, наприклад, в

простих вуглецевих сталях з дуже низьким вмістом вуглецю (близько 0.1% і менше), незважаючи на порівняно високу температуру T_H початку перетворення $A \rightarrow M$ (близько 500 °С), вдається отримати фазу M [5].

Згідно запропонованої автором новітньої моделі ПМП, наявність початкової кількості фази M при подальшому зниженні температури (нижче T_H^*) необхідно враховувати при визначенні кількості перетвореного аустеніту.

Для вуглецевої сталі $Fe + 7\%Cr + 2\%Ni$ початкова кількість фази M - n_{M0} пов'язана з швидким охолодженням від T_H до T_H^* .

Розрахунок кількості перетвореної фази A необхідно проводити від початкової кількості фази A , що дорівнює n_{A0} . Згідно (2.19), після першого кроку ітерацій кількість елементарних комірок фази A дорівнює $0.5(n_{A0} + n_{M0})$, тобто зменшується на $0.5(n_{A0} - n_{M0})$ від початкового n_{A0} : $n_{A0} - 0.5(n_{A0} - n_{M0}) = 0.5(n_{A0} + n_{M0})$. Далі, при послідовних переходах від однієї ДС до іншої (див. Рис. 2.3.), ця кількість наближається до нуля (2.28).

Порівняння отриманих теоретичних залежностей ізотермічного ПМП легованої сталі з експериментальними даними [4] проведемо, використовуючи отриману з (2.29) залежність процентного вмісту кількості перетвореної фази A від часу:

$$\begin{aligned} \frac{n_{AS}}{n_{A0}} &= \left(1 + \frac{n_{M0}}{n_{A0}}\right) \cdot 100 \cdot \left(1 - \exp\left(-2\mu'N_{eq}\xi(t, T)\right)\right) \\ &= A \cdot 100 \cdot \left(1 - \exp\left(-Bt \left(1 - \exp(-Ct^k)\right)\right)\right), \end{aligned} \quad (2.30)$$

де $A = 1 + \frac{n_{M0}}{n_{A0}}$, $B = 2\mu'N_{eq}$, $C = (t_{AM}^*)^{-k}$.

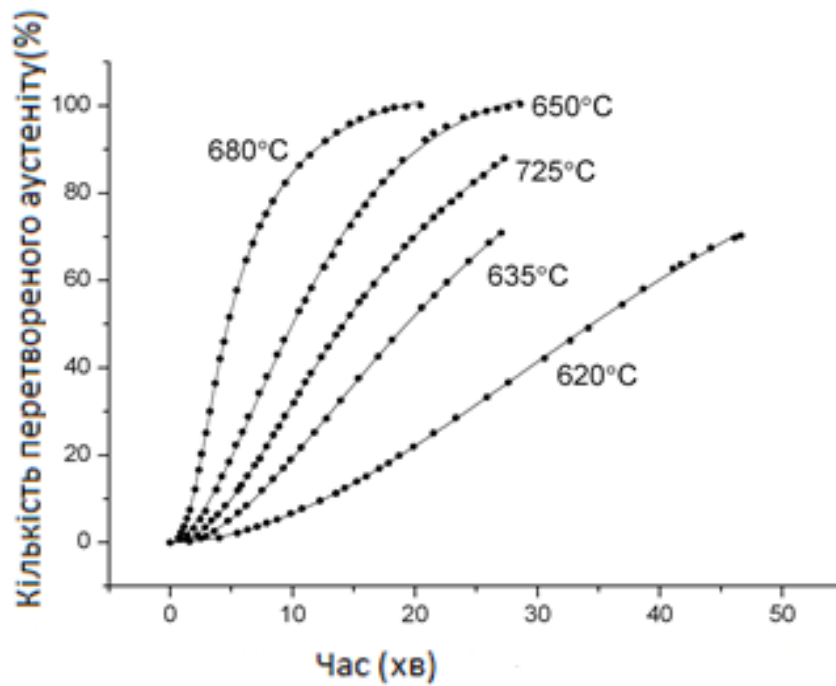
Відповідно до методологічного принципу, що має назву бритва Оккама, вплив коефіцієнта β в виразі (29) виключимо з розгляду, тобто вважаємо його рівним одиниці.

Результати порівняння оцифрованих експериментальних кривих [3] і аналітичного розв'язку (2.30) для нікелевої сталі наведені на Рис. 2.4. а), б) і таблиці 2.1.

Таблиця 2.1.

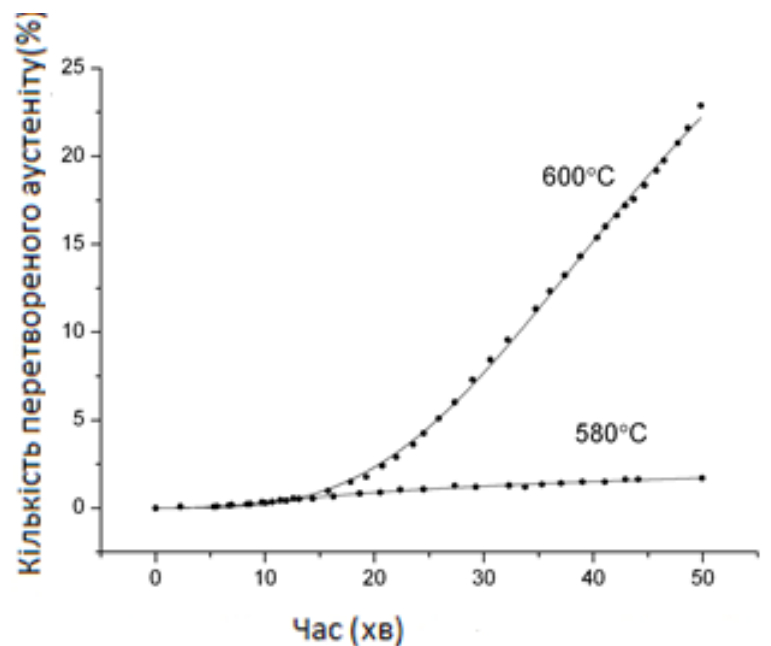
Значення параметрів кривих , що описують експериментальні дані
нікелевої сталі [3].

°C	580	600	620	635	650	680	725
<i>A</i>	2.51163	525.61394	104.406	167.5109	106.0727	104.3042	130.939
<i>B</i>	0.0227	9.2989E-4	0.44776	0.02168	0.14735	0.16748	0.04159
<i>C</i>	0.0168	1.5202E-4	0.002	0.05163	0.08818	0.15926	0.06849
<i>k</i>	1.73072	2.50219	0.86837	1.21282	0.80822	1.53915	1.2088
t_{AM}^*	10.602	33.566	$1.283 \cdot 10^3$	11.514	20.178	3.299	9.189



a)

Продовження рис.2.4.



б

Рис. 2.4. Порівняння оцифрованих експериментальних даних (темні кружки) з аналітичними розв'язками (2.30) (суцільні лінії) для різних температур ізотермічного ПМП сталі

Аналітичні залежності ізотермічного ПМП легованих сталей в області високих температур ($T_K \leq T(t) \leq T_H^*$) при великому числі фонів ($N_0 \gg n_{A0}, n_{M0} \gg 1$) визначають чотири постійних коефіцієнта, величина яких залежить від температури перетворення, і задається експериментально. Порівняння аналітичних залежностей, що описують ізотермічний ПМП, з експериментальними даними такого ж процесу для одного з видів легованої сталі показує гарну кількісну відповідність. Зазначена відповідність вказує на можливість використання заснованої на принципі детальної рівноваги моделі ПМП для опису процесів ПМП легованих сталей в області високих температур.

Проаналізуємо розв'язок ПМП вуглецевої сталі в області низьких температур $T_{\text{Кім}} \leq T(t) \leq T_H^* \leq T_K$, за малої кількості фононів $N_0 > \frac{(n_{A0} - n_{M0})}{2} \gg 1$.

Експерименти [4] показують, що при зменшенні температури від мартенситної T_K до кімнатної $T_{\text{Кім}}$ спостерігається ПМП, в результаті якого кількість перетвореного аустеніту зростає від 5% при $T_H^* = 450^\circ\text{C}$ до 95% при $T_H^* = 300^\circ\text{C}$. При цьому характерний час ПМП, яке позначимо t_{AM}^{**} , практично однаково для всього діапазону температур, і мало в порівнянні з характерним часом ПМП в області високих температур t_{AM}^* , тому що становить величину порядку 1 хв.

Уявімо залежність температури $T(t)$ від часу t при атермічному ПМП у вигляді:

$$T(t) = T_H^* - \frac{T_H^* - T_{\text{Кім}}}{\tilde{t}_{AM}} t \quad (2.31)$$

де \tilde{t}_{AM} - характерний час зміни температури при ПМП в області низьких температур.

Задамо також залежність ймовірності індукованих переходів від температури в модельному вигляді (2.12), де необхідно замінити T_K на $T_{\text{Кім}}$, невідомі константи $\beta, k > 0$ - на $\tilde{\beta}, \tilde{k} > 0$ відповідно, а амплітуду ймовірності індукованих переходів μ' в (2.15) - на іншу величину $\mu'' > \mu'$.

Після зазначених вище замін розв'язки (2.15) можуть бути застосовні для опису атермічного ПМП в діапазоні температур $T_{\text{Кім}} \leq T(t) \leq T_H^* \leq T_K$. При цьому, на відміну від випадку ПМП в області високих температур, розв'язки (2.15) не піддаються спрощенню.

З огляду на те, що число фононів досить велике в порівнянні з кількостями елементарних комірок фази А і фази М, процес атермічної ПМП також може бути представлений у вигляді великого числа переходів однієї дворівневої системи в іншу.

Для переходу до опису ізотермічного ПМП вуглецевої сталі використовуємо розв'язки для атермічного ПМП зі змінною в часі температурою (2.31).

Таким чином, для загальної, з урахуванням ПМП в високотемпературній області, кількості перетвореного аустеніту маємо вираз:

$$n_M^{tot}(t) = \frac{\frac{(n_{A0} + n_{M0})}{2} \left(1 - \left(1 + \frac{n_{M0}}{N_0} \right) \frac{(n_{A0} - n_{M0})}{(n_{A0} + n_{M0})} \exp \left(-2\mu'' N_{eq} t \left(1 - \exp \left(-\tilde{\beta} \left(\frac{t}{\tilde{t}_{AM}} \right)^{\tilde{k}} \right) \right) \right)}{1 - \frac{n_{A0} - n_{M0}}{2N_0} \exp \left(-2\mu'' N_{eq} t \left(1 - \exp \left(-\tilde{\beta} \left(\frac{t}{\tilde{t}_{AM}} \right)^{\tilde{k}} \right) \right) \right)} \quad (2.32)$$

Оскільки $t \gg \tilde{t}_{AM}$, то другою експонентою в (2.32) можна знехтувати. Тому в початковій ДС кількість перетвореного аустеніту дорівнює:

$$n_M^{tot}(t) \approx \frac{\frac{(n_{A0} + n_{M0})}{2} \left(1 - \left(1 + \frac{n_{M0}}{N_0} \right) \frac{(n_{A0} - n_{M0})}{(n_{A0} + n_{M0})} \exp(-2\mu'' N_{eq} t) \right)}{1 - \frac{n_{A0} - n_{M0}}{2N_0} \exp(-2\mu'' N_{eq} t)} \quad (2.33)$$

Якщо в (2.33) виключити мартенсит, утворений у високотемпературній області, то кількість перетвореного аустеніту в низькотемпературній області дорівнюватиме:

$$n_M(t) = n_M^{tot}(t) - n_{M0} = \frac{\frac{(n_{A0} - n_{M0})}{2} (1 - \exp(-2\mu'' N_{eq} t))}{1 - \frac{n_{A0} - n_{M0}}{2N_0} \exp(-2\mu'' N_{eq} t)} \quad (2.34)$$

З огляду на швидкоплинність елементарного акту перетворення застосуємо схему переходів дворівневої системи АМ в дворівневу систему А'М, яка приведена на Рис. 2.2, де вже $\Delta\tau \sim (2N_{eq}\mu'')^{-1} \ll \Delta t$ - час, за який в дворівневій системі АМ відбувається ПМП в низькотемпературній області.

Відповідно до цієї схеми, за час Δt протягом дуже короткого інтервалу часу в дворівневій системі відбувається ПМП. При цьому, згідно з (2.17),

ПМП в дворівневій системі починається при початковій кількості фононів $N = N_0 \gg 1$, і початковій кількості елементарних комірок фази А - n_{A0} і фази М - n_{M0} , а завершується за час порядку Δt з рівними населення рівнів: $n_M = n_A = 0.5(n_{A0} - n_{M0})$ і кількістю фононів $N = N_{eq} < N_0$.

Після встановлення рівноваги, в цьому ж часовому проміжку з-за зниження температури на рівні A' (див. Рис. 2.2.) спостерігається перехід старої дворівневої системи AM в нову дворівневу систему $A'M$, яка характеризується іншими початковими параметрами: кількість фази М - $n'_{M0} = 0$; кількість фази А'- $n'_{A0} = 0.5(n_{A0} - n_{M0})$; кількість фононів - $N = N_{eq}$. Процес ПМП в дворівневій системі $A'M$, згідно (2.17), завершується з кількістю фононів $N' = N_{eq} - \frac{0.5(n_{A0} - n_{M0}) - 0}{2} = N_0 - 0.5(n_{A0} - n_{M0}) - 0.25(n_{A0} - n_{M0})$, і з рівною населеністю рівнів: $n'_M = 0.25(n_{A0} - n_{M0})$, $n'_A = 0.25(n_{A0} - n_{M0})$.

Таким чином, при переході дворівневої системи AM в дворівневу систему $A'M$ кількість перетвореної фази А і кількість залишилися фононів визначаються виразами:

$$\begin{aligned} n_M + n'_{M0} &= 0.5(n_{A0} - n_{M0}) + 0.25(n_{A0} - n_{M0}), \\ N' &= N_0 - 0.5(n_{A0} - n_{M0}) - 0.25(n_{A0} - n_{M0}). \end{aligned} \quad (2.35)$$

де n'_{M0} - кількість мартенситу, утвореного в інтервалі температур $T_H^* \leq T(t) \leq T_K$, розташованому до температури початку ізотермічного ПМП - T_H^* .

Далі, по мірі охолодження, процес ПМП повторюється в наступній дворівневій системі, яка на Рис. 2.5. позначена як $A''M$.

Загальна кількість перетвореного аустеніту складається з перетворень аустеніту в кожній дворівневій системі, і, з урахуванням (2.34), (2.35), може бути представлено у вигляді суми:

$$\begin{aligned}
& n_{MS}(t) \\
& = (n_{A0} \\
& - n_{M0}) \sum_{k=1}^P \frac{\left(1 - \exp\left(-2\mu'' t N_0 (1 - \hat{N} S_1(k))\right)\right)}{2^k - \hat{N} \left(1 - \hat{N} S_2(k)\right)^{-1} \exp\left(-2\mu'' t N_0 (1 - \hat{N} S_1(k))\right)}, \quad (2.36)
\end{aligned}$$

де $P \gg 1$, $\hat{N} = \frac{(n_{A0} - n_{M0})}{N_0} < 2$ позитивне число, що визначає відношення початкової різниці кількості елементарних комірок фаз до початкової кількості фононів в низькотемпературній області ПМП, $S_1(k) = \sum_{i=1}^k 2^{-i}$, $S_2(k) = \begin{cases} 0, & k=1 \\ S_1(k-1), & k \geq 2 \end{cases}$.

У відсотковому вимірі залежність кількості перетвореної фази А від часу має вигляд:

$$\begin{aligned}
& \frac{n_{MS}(t)}{n_{A0}} \\
& = 100 \left(1 - \frac{n_{M0}}{n_{A0}} \sum_{k=1}^P \frac{\left(1 - \exp\left(-2\mu'' t N_0 (1 - \hat{N} S_1(k))\right)\right)}{2^k - \hat{N} \left(1 - \hat{N} S_2(k)\right)^{-1} \exp\left(-2\mu'' t N_0 (1 - \hat{N} S_1(k))\right)} \right) \quad (2.37) \\
& - 100 \frac{n'_{M0}}{n_{A0}},
\end{aligned}$$

Суму в правій частині (2.37) можна наближено представити у вигляді двох доданків: один доданок містить експоненту, в показнику ступеню якої присутній співмножник порядку одиниці $(1 - \hat{N} S_1(\bar{k}_1)) < 1$, друге - експоненту, в показнику ступеню якої присутній малий співмножник $(1 - \hat{N} S_1(\bar{k}_2)) \ll 1$, де $\bar{k}_1 < \bar{k}_2$. Так, наприклад, при $\hat{N} \approx 1$ маємо $(1 - \hat{N} S_1(1)) = 1 - 0.5 < 1$, а $(1 - \hat{N} S_1(3)) = 0.125 \ll 1$.

Таким чином, суму в (2.37) можна представити у вигляді:

$$\sum_{k=1}^P \frac{\left(1 - \exp\left(-2\mu'' t N_0 (1 - \widehat{N} S_1(k))\right)\right)}{2^k - \widehat{N} (1 - \widehat{N} S_2(k))^{-1} \exp\left(-2\mu'' t N_0 (1 - \widehat{N} S_1(k))\right)} \quad (2.38)$$

$$\approx A(1 - \exp(-Bx)) + C(1 - \exp(-Dx)).$$

Константи A і B пов'язані співвідношенням $A + B = 1$, яке виходить з (2.38) при $t \rightarrow \infty$.

При $\widehat{N} = 0.5$ права частина рівності (2.38) з досить хорошою точністю описується виразом $0.7(1 - \exp(-1 \cdot x)) + 0.3(1 - \exp(-0.4 \cdot x))$, а при $\widehat{N} = 1$ - виразом $0.35(1 - \exp(-1.35 \cdot x)) + 0.65(1 - \exp(-0.25 \cdot x))$, де $x = 2\mu'' t N_0$.

На Рис. 2.5. наведено графіки, що демонструють відповідність правої частини рівності (2.38), зображеної суцільною лінією, його лівій частині, зображеної маркерами, для різних значень параметра \widehat{N} .

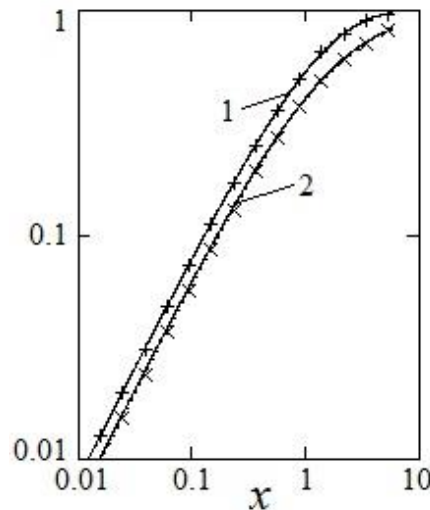


Рис. 2.5. Графіки відповідності правої і лівій частин рівності (38): 1-
 $\widehat{N} = 0.5$; 2- $\widehat{N} = 1$.

Таким чином, залежність кількості перетвореної фази A від часу (2.37) може бути представлена у вигляді:

$$\frac{n_{MS}(t)}{n_{A0}} = 100 \left(1 - \frac{n_{M0}}{n_{A0}}\right) \left(A(1 - \exp(-Bt)) + C(1 - \exp(-Dt))\right) - 100 \frac{n'_{M0}}{n_{A0}} = \quad (2.39)$$

$$= A' - B' \exp(-Bt) - C' \exp(-Dt),$$

$$\text{де } A' = 100 \left(1 - \frac{n_{M0}}{n_{A0}} - \frac{n'_{M0}}{n_{A0}}\right), B' = 100 \left(1 - \frac{n_{M0}}{n_{A0}}\right) A, C' = 100 \left(1 - \frac{n_{M0}}{n_{A0}}\right) C.$$

Вираз (2.39), який був отриманий базуючись на новій моделі ПМП, що була запропонована автором цієї роботи використовуємо для опису експериментальних даних, наведених в [5] для ПМП в області низьких температур.

На Рис. 2.6. маркерами показані точки, отримані шляхом оцифровки експериментальних даних. Суцільними лініями на Рис. 2.6. зображені відповідні їм криві, отримані з (2.39) для значень параметрів Таблиці 2.2.

Таблиця 2.2.

Значення параметрів кривих в (2.37), що описують експериментальні дані [5].

°C	A'	B'	B	C'	D
415	10.39448	12.54669	1.67272	0	0
400	32.02108	6.86054	0.93142	59.43278	6.12407
375	50.19302	85.35374	6.10650	11.05937	0.83587

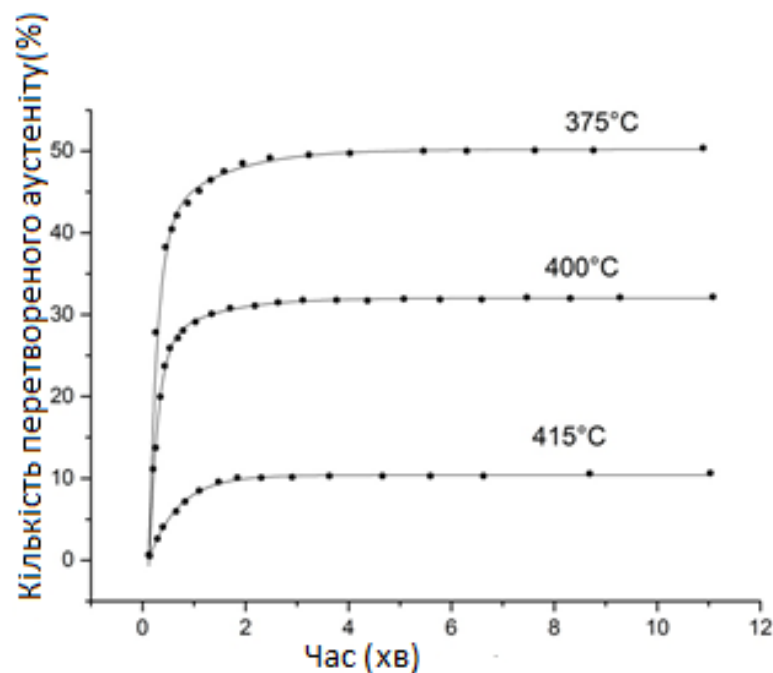


Рис. 2.6. Ізотермічне ПМП в області низьких температур

Ралежність (2.39), що описує ізотермічне МП за моделлю, представленою автором цієї роботи, демонструє ідеальне співвідношення з експериментальними даними [5] в області низьких температур. Запропонована модель ПМП, заснована на принципі детальної рівноваги, можна використовувати для опису процесів ПМП в області низьких температур.

2.2. Пряме мартенситне перетворення у марганцевих сталях.

Для підтвердження доцільності використання запропонованої моделі для опису фазових перетворень сталей було вирішено перевірити аналітичні розв'язки шляхом опису мартенситних перетворень у марганцевих сталях.

Для порівняння було взято результати експериментальних даних з роботи [3], у якій була показана залежність відсоткового змісту мартенситу від часу для марганцевої сталі ($Fe + 0,7\% C + 6,5\% Mn$).

Новітня модель запропонована автором у роботі [30] має продемонструвати кількісну відповідність і у марганцевих сталях. Аналітичні розв'язки, отримані з вихідних рівнянь, включають чотири постійні коефіцієнти, значення яких залежить від температури перетворення та визначаються експериментально.

Порівняємо теоретичні залежності ізотермічної ПМП вуглецевої та марганцевої сталей з експериментальними даними, використовуючи залежність відсоткового вмісту кількості перетвореної фази А від часу в області високих температур:

$$\begin{aligned} \frac{n_{AS}}{n_{A0}} &= \left(1 + \frac{n_{M0}}{n_{A0}}\right) \cdot 100 \cdot \left(1 - \exp\left(-2\mu' N_{eq} \xi(t, T)\right)\right) \\ &= A \cdot 100 \cdot \left(1 - \exp\left(-Bt \left(1 - \exp(-Ct^k)\right)\right)\right), \end{aligned} \quad (2.31)$$

де $A = 1 + \frac{n_{M0}}{n_{A0}}$, $B = 2\mu' N_{eq}$, $C = (t_{AM}^*)^{-k}$.

Основним показником дієвості отриманого аналітичного розв'язання є

результати порівняння оцифрованих експериментальних кривих [3] і аналітичного розв'язання (2.31) для марганцевої сталі в області низьких температур, що наведені на Рис. 2.7. і таблиці 2.3.

Нижче наведено графічний матеріал, який підтверджує справедливість запропонованої моделі в області високих температур і великої кількості фононів.

Таблиця 2.3.

Значення параметрів кривих , що описують експериментальні дані марганцевої сталі в області низьких температур [5]

°C	A'	B'	B	C'	D
-165	97.39448	35.54669	0.00567272	50.3	0.0492
-183	80.4158	44.6179	0.00961965	33.3	0.03952
-195	72.4158	68.6179	0.00861965	5.33455	0.8852

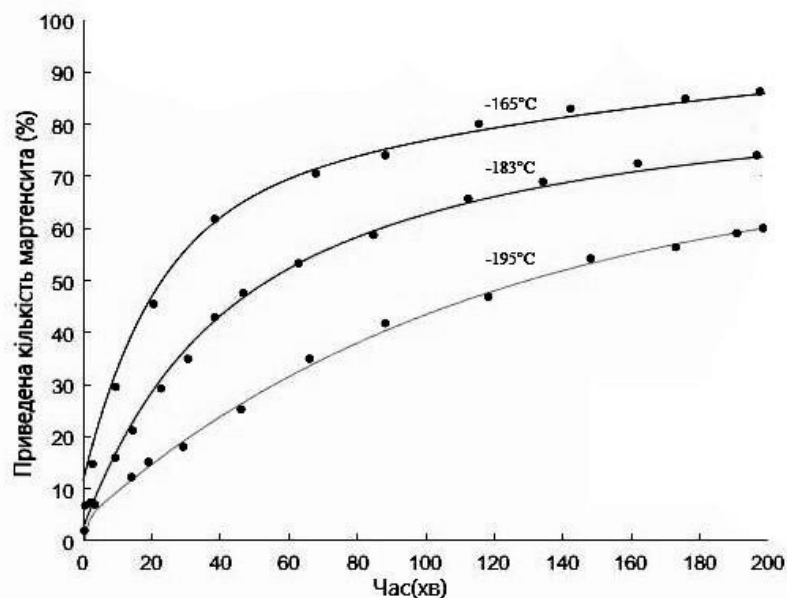


Рис. 2.7. Ізотермічне ПМП в області низьких температур для марганцевої сталі

За невеликої кількості фононів ($N_0 > \frac{(n_{A0} - n_{M0})}{2} \gg 1$) в області низьких

температур $T_{\text{Ком}} \leq T(t) \leq T_H^* \leq T_K$ аналітичні залежності ізотермічного ПМП легованих сталей можуть бути представлені у вигляді суми трьох доданків: постійний доданок і дві експоненти, що убивають в часі, кожна з яких має свій постійний множник, і своє значення характерного часу.

Для порівняння експериментальних даних, наведених в [5] для ПМП в області низьких температур використаємо вираз:

$$\begin{aligned} \frac{n_{MS}(t)}{n_{A0}} &= 100 \left(1 - \frac{n_{M0}}{n_{A0}} \right) \left(A(1 - \exp(-Bt)) + C(1 - \exp(-Dt)) \right) - \\ 100 \frac{n'_{M0}}{n_{A0}} &= \end{aligned} \quad (2.30)$$

$$= A' - B' \exp(-Bt) - C' \exp(-Dt),$$

$$\text{де } A' = 100 \left(1 - \frac{n_{M0}}{n_{A0}} - \frac{n'_{M0}}{n_{A0}} \right), B' = 100 \left(1 - \frac{n_{M0}}{n_{A0}} \right) A, C' = 100 \left(1 - \frac{n_{M0}}{n_{A0}} \right) C.$$

Основним показником дієвості отриманого аналітичного розв'язку є результати порівняння оцифрованих експериментальних кривих [3] і аналітичного розв'язку (2.31) для марганцевої сталі в області низьких температур, що наведені на Рис. 2.8. і таблиці 2.4.

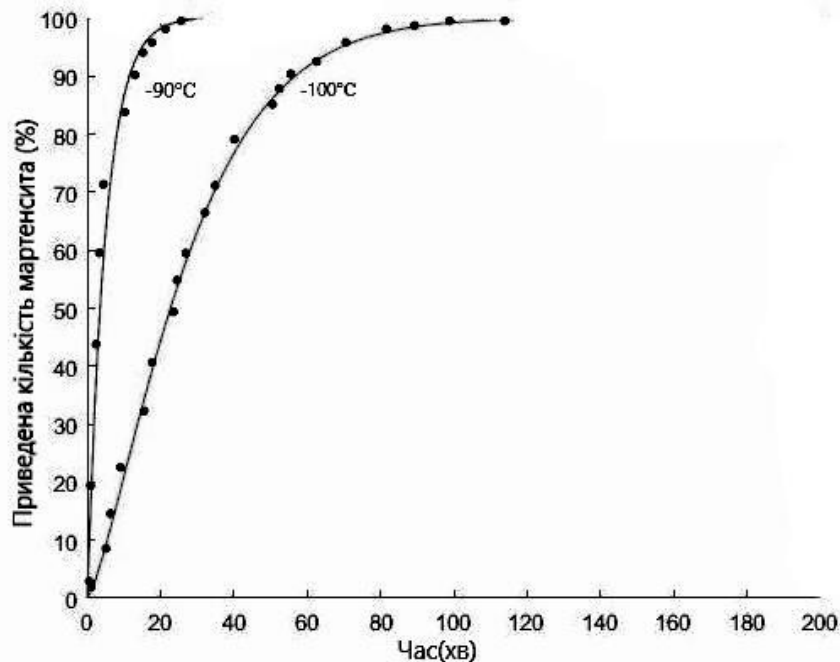


Рис. 2.8. Ізотермічне ПМП в області високих температур для марганцевої сталі

Таблиця 2.4.

**Значення параметрів кривих , що описують експериментальні дані
марганцевої сталі в області високих температур[4]**

°C	<i>A</i>	<i>B</i>	<i>C</i>	<i>t_a</i>	<i>k</i>
-90	1.001101	0.198880	0.440417	0.255	0.6001
-103	1.000791	0.194365	17.27953	3809.098	0.3456

Таким чином, аналітична залежність згідно запропонованої автором цієї роботи новітньої моделі, що описує ізотермічне пряме мартенситне перетворення збігається з експериментальними даними [3,4] цього ж процесу для марганцевої сталі сталі, як в області низьких, так і високих температур.

Висновки до розділу 2

1. Отримана система рівнянь, що описує як атермічні, так і ізотермічні прямі мартенситні перетворення вуглецевих сталей, яка базується на моделі індукованих переходів квазічастинок між енергетичними рівнями, що розвинута А. Ейнштейном.

2. Опрацьована аналітична модель використовується для опису ізотермічних ПМП маловуглецевих нікелевої сталі ($Fe + 7\%Cr + 2\%Ni$) і марганцевої сталі ($Fe + 0,7\% C + 6,5\% Mn$). Отримані з вихідних рівнянь аналітичні залежності включають в себе чотири постійні коефіцієнта, величина яких залежить від температури перетворення, і визначається експериментально.

3. Врахована залежність кількості фононів для різних температурних областей, що призвело для різних аналітичних моделей для високих і низьких температур.

4. Порівняння аналітичних залежностей, що описують ізотермічний ПМП двох видів легованої сталі, з експериментальними даними в області і високих і низьких температур показують гарну кількісну відповідність. Така відповідність вказує на можливість використання заснованої на принципі детальної рівноваги моделі ПМП для опису процесів ПМП легованих сталей.

Слід зазначити, що розраховані криві ПМП є однаковим в області низьких температур для нікелевих і марганцевих сталей, але відрізняється для різних сталей в області високих температур, що може бути пояснено різною кількістю початкового аустеніту в різних сталях, що впливає на швидкість його переходу в іншу фазу.

РОЗДІЛ 3.

ЗАДАЧА СТЕФАНА І НОВИЙ ПІДХІД ДЛЯ ОПИСУ РУХУ МІЖФАЗНОГО КОРДОНУ

Ще одним прикладом фазового перетворення у твердому тілі є задача Стефана. З математичної точки зору, задача Стефана являє собою крайову задачу для диференціального рівняння у частинних похідних, яка описує переміщення межі розділу двох фаз з часом. Ця задача є критично важливою у багатьох наукових та практичних областях завдяки її значенню для розуміння процесів теплопередачі та теплового випромінювання.

У сучасному світі, де питання сталого розвитку енергетики та ефективного використання ресурсів набувають все більшої актуальності, розуміння механізмів теплопередачі та випромінювання стає ключовим для створення більш ефективних та енергозберігаючих систем опалення, охолодження та виробництва електроенергії. Вивчення задачі Стефана має важливе значення для розробки технологій відновлюваної енергії, таких як сонячні батареї та термоелектричні пристрої. Глибоке розуміння процесів теплопередачі сприяє підвищенню ефективності перетворення тепла в електричну енергію.

Розв'язок задачі Стефана, яка виникає в контексті термодинамічних перетворень у речовинах, таких як плавлення та замерзання, є надзвичайно складним через нелінійний характер рівнянь теплопровідності та інших рівнянь, що описують ці процеси. Нелінійні властивості рівнянь ускладнюються неоднорідністю розподілу температури та інших параметрів під час фазових перетворень. Розв'язання задачі Стефана вимагає глибоких знань з фізики теплопровідності, математичного аналізу та числових методів.

Методи розв'язку задачі Стефана

Сучасні числові методи, такі як метод скінченних елементів (Finite Element Method, FEM) та метод скінченних різниць (Finite Difference Method, FDM), дозволяють розв'язувати рівняння теплопровідності та обчислювати розподіл температури та випромінювальну потужність у складних

геометричних конфігураціях. Ці методи використовують обчислювальні алгоритми для апроксимації диференціальних рівнянь та моделювання теплових процесів. Проте, деякі числові методи можуть бути дуже обчислювально витратними, особливо для складних геометрій та високої роздільної здатності. Невірно побудована обчислювальна сітка може призводити до значних неточностей.

У науковій літературі розглянуто та порівняно кілька ефективних числових методів для розв'язання задач Стефана в одновимірному випадку [58]. Серед них:

1. Метод ентальпії, що базується на рівнянні збереження енергії і використовує ентальпію для опису фазового переходу. Головна ідея полягає у врахуванні різниці між ентальпіями фаз для побудови рівняння, що описує рух границі фаз.

2. Метод іммобілізації на границі, що передбачає включення рухомої границі в область дифузії та використання техніки іммобілізації границі для числової інтеграції рівняння у часі.

3. Метод збурень, в якому розв'язок шукається у вигляді ряду за малим параметром, що представляє величину збурення фронту. Підставляючи цей ряд у рівняння, знаходять відповідні коефіцієнти.

4. Вузловий інтегральний метод, що використовує вузлові інтегральні рівняння для апроксимації рівняння з фронтом зміцнення/плавлення. Фронт розбивається на вузли, а інтегральне рівняння апроксимується через ці вузли.

5. Метод теплового балансу інтегралу, базується на тепловому балансі на фронті. Швидкість зміни розміру фронту визначається через вхідну та вихідну теплову потужність.

Ці методи застосовуються до різних тестових задач, таких як плавлення на півплощині, радіальна циліндрична та сферична солідація. Жоден з методів не є універсальним, і вибір методу залежить від конкретної задачі та початкових умов. Всі ці методи мають свої переваги та недоліки, які слід враховувати при їх використанні[58].

У дослідженні [62] надано всебічний огляд розширеного методу скінченних елементів та його застосування для моделювання фазових переходів першого порядку. Проведено детальні числові дослідження, зокрема для одновимірного випадку, де розглянуто просторові та часові дискретизації, різні числові техніки для забезпечення умов на інтерфейсі, а також підходи до обробки злиття елементів. Також розроблено та порівняно підхід кінцевих елементів із вбудованим розривом із розширеним методом кінцевих елементів, щоб надати більш чітке розуміння останнього. Представлені числові приклади танення/замерзання в площинній, циліндричній та сферичній симетриях, і результати порівняно з аналітичними розв'язками.

Стаття [62] досліджує математичні та обчислювальні аспекти задачі Стефана, яка описує фазові переходи першого порядку, спричинені зміною температури в матеріалах. Початково сформульована у контексті формування та танення льоду, математична структура цієї проблеми має широкі застосування в різних наукових та технологічних галузях. Стаття зосереджується на числовому вирішенні проблеми, зокрема у контексті переходу від твердої до рідкої фази, наприклад, замерзання рідини. При цьому вирішуються дві ключові задачі: опис еволюції фазової межі та дискретизація температурного поля, зокрема врахування розриву градієнта температури на межі фаз[62].

Два основних підходи розглядаються: явні та неявні методи. У явних методах застосовується лагранжівський підхід, де деякі точки-маркери на фазовій межі відстежуються явно. Наприклад, у разі використання методу скінченних елементів для дискретизації температурного поля, сітка генерується на початковому етапі так, щоб границя елементів лежала на фазовій межі. Вузли скінчених елементів на межі використовуються як точки-маркери, і на кожному кроці часу вони переміщуються залежно від розв'язку задачі теплопередачі у кожній фазі. З часом початкова сітка скінчених елементів може стати занадто спотвореною, і необхідно

згенерувати нову сітку в областях твердої і рідкої фаз.

З неявними методами, навпаки, обчислювальна сітка зазвичай залишається незмінною, а позицію межі визначають непрямим шляхом за допомогою полів, визначених на всій області, які адекватно дискретизовані. Прикладами неявних методів є метод ентальпії, метод поля фази та метод рівня поверхні[62].

Було проведено детальне числове дослідження похибок та порівняльний аналіз. Хоча підхід на основі штрафних функцій може бути застосований на практиці, метод множників Лагранжа дозволяє точно застосувати обмеження та не вимагає налаштування нереалістичного коефіцієнта штрафу. Метод множників Лагранжа може бути застосований безпосередньо до дискретизованих обмежень. Однак у випадках вищих розмірностей слід звернути увагу на вибір простору множників Лагранжа для досягнення стійкості. Також було обговорено інтерполяцію для елементів змішання. Висновок, що без застосування збагачення в цих елементах покращується точність без особливих недоліків, повинен також застосовуватися у випадках вищих розмірностей.

Різноманіття методів дослідження задачі Стефана не гарантує її вирішення, тому існує необхідність пошуку нових теоретичних моделей розв'язку з метою спрощення розрахунків та зменшення кількості методів для її розв'язання. Це відкриває нові можливості для подальших досліджень у цій галузі, сприяючи розвитку більш ефективних та точних числових методів для вирішення задач фазових переходів у різних матеріалах та умовах.

3.1. Модифікована умова для вирішення Задачі Стефана.

Задача Стефана (ЗС) виникла в результаті досліджень танення полярної крижаної шапки Землі [68,69]. З математичної точки зору ЗС є крайовим завданням для диференціального рівняння в приватних похідних, яка описує переміщення з часом межі розділу двох фаз. Кордон розділу між фазами рухається внаслідок зовнішнього теплового впливу, що супроводжується зміною фазового станів речовини (розчинення чи кристалізація) з одного

боку кордону. Швидкість руху міжфазного кордону (МК) задається різницею дифузійних потоків з одного та іншого її боку[68,69].

Крім завдання танення льоду зі зміщеною межею між водою і льодом, прикладами фізичних процесів з переміщенням межі розділу фаз є, наприклад, завдання плавлення твердої речовини з невідомою межею між твердою і рідкою фазами, завдання перерозподілу концентрації в результаті взаємної дифузії в металевих сплавах з рухомим кордоном поділу фаз різного хімічного складу[70,71].

Вперше дослідження руху межі розділу фаз однорідна рідина-тверде тіло проведено у роботі [72]. Така постановка завдання обумовлена пошуком фізичних моделей, що описують формування земної кори. У роботі було встановлено, що товщина твердої фази, що утворюється при охолодженні однорідної рідини, збільшується з часом пропорційно \sqrt{t} , где t – час розвитку процесу.

У роботі [73] розглянуті деякі питання теплопровідності в призмі льоду, схильної до танення, і, як додаток, розподіл температури в стрижні з різними термічними постійними при негативних і позитивних температурах. У цій роботі показано, що, як і в задачі Лами, Клайперона, межа температурного перепаду зміщується пропорційно \sqrt{t} .

З часу першої публікації з дослідження руху кордону розділу фаз виконано велику кількість робіт, присвячених цій тематиці, яка згодом отримала назву завдання Стефана. Вони присвячені вирішенню задачі Стефана з рухомим і вільним кордоном (M-FBP) для рівняння дифузії (H-DE) як у теоретичному, так і в прикладному розгляді [74,75].

У цій роботі, як приклад, зупинимося на аналізі одного із завдань Стефана з рухомим і вільним кордоном (M-FBP) для рівняння дифузії (H-DE)[76,77].

Дифузійне фазове перетворення у твердих тілах часто моделюють у рамках двофазної моделі Стефана [78,79]. У цьому випадку математична постановка завдання набуває вигляду двох диференціальних рівнянь у

приватних похідних (з відповідними крайовими умовами), що описують дифузію в обох фазах, та рівняння матеріального балансу на межі розділу. Завдання двофазної моделі Стефана вирішується аналітичними методами за умови, що коефіцієнти дифузії постійні, а граничне значення та початкові умови залишаються незмінними.

У роботі [80] запропоновано аналітичний метод вирішення одновимірної двофазної ЗС дифузійної взаємодії в бінарній металевій системі, в якому запропоновано новий метод формулювання граничної умови на рухомому кордоні.

3.1.1. Одновимірна двофазна ЗС в напівобмеженій області з модифікованим рухомим міжфазним кордоном

Розглянемо процес дифузійної взаємодії у бінарній металевій системі А - В з фазами $i = \alpha, \beta$, які є регулярні тверді розчини. На схематичному зображенні геометрії дифузійної взаємодії у площині (N, x) позначимо через $s(t)$ положення рухомого міжфазного кордону (див. рис. 3.1.), де $N(x, t)$ – концентрація бінарної двофазної системи, x – координата, $t > 0$ – час. На Рис. 3.1 α – фаза розташована в області $0 \leq x < s(t)$, а відповідно β – фаза розташована в інтервалі $s(t) < x < \infty$, $N^i(x, t)$ – концентрація i – ої фази. Для простоти розрахунків вважаємо, що далеко від міжфазного кордону концентрація фаз постійна, тобто $N^\alpha(0, t) = N_\alpha$, $N^\beta(\infty, t \rightarrow 0) = N_\beta$.

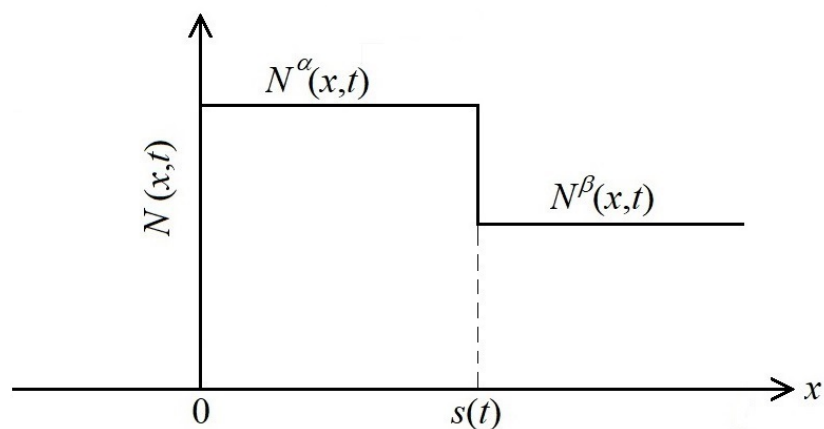


Рис. 3.1. Схема розподілу концентрацій у бінарній металевій системі

Рівняння зміни концентрації фаз одновимірної двофазної ЗС запишемо в узагальненому вигляді:

$$\frac{\partial}{\partial t} N(x, t) = \frac{\partial}{\partial x} \left(D(x, t) \frac{\partial}{\partial x} N(x, t) \right), \quad (3.1)$$

де $D(x, t)$ - залежить від координати коефіцієнт дифузії.

Як умови на межах області поставимо такі:

$$N(0, t) = N_\alpha, \quad (3.2)$$

$$N(\infty, t) = N_\beta, \quad (3.3)$$

$$N(s(t), t) = N_s. \quad (3.4)$$

де $N_\alpha > N_s > N_\beta$.

Рівняння (3.1) має бути доповнено рівнянням руху міжфазного кордону. У літературі це рівняння відомо як умовою Стефана [70,71]. З фізичних міркувань зрозуміло, що рух кордону відбувається тоді, коли є різниця потоків частинок з однієї фази в іншу. Тому рушійна сила переміщення міжфазного кордону міститься у початкових умовах (3.2). У класичній постановці ЗС для опису дифузії тепла між водою та льодом ця умова має вигляд:

$$\left. \begin{array}{l} T_2(x) = T_1(x) = 0 \\ K_2 \frac{\partial T_2}{\partial x} - K_1 \frac{\partial T_1}{\partial x} = L\rho \frac{\partial s(t)}{\partial t} \end{array} \right\} \text{при } x = s(t), \quad (3.5)$$

де K_i – коефіцієнти теплопровідності фаз, $T_i(x)$ – температура фаз, ρ – густина фаз, L - прихована теплота, необхідна танення льоду.

Остання з умов (3.5) отримано виходячи з балансу кількості тепла, що надійшов на міжфазний кордон із води, та кількості тепла, що пішло в лід, за умови відсутності джерел тепла на кордоні[80].

Знайдемо розв'язок рівняння (3.1) із граничними умовами (3.2) – (3.4). Оскільки коефіцієнти дифузії $D(x, t)$ далеко від міжфазного кордону є постійними величинами, то розв'язок (3.1) у цих областях можна подати у вигляді [82]:

$$\begin{aligned}
 N^\alpha(x, t) &= N_1^\alpha - N_2^\alpha \operatorname{erf}\left(\frac{x}{2\sqrt{tD^\alpha}}\right), \\
 N^\beta(x, t) &= N_1^\beta + N_2^\beta \operatorname{erfc}\left(\frac{x}{2\sqrt{tD^\beta}}\right),
 \end{aligned}
 \tag{3.6}$$

де $N_1^\alpha, N_2^\alpha, N_1^\beta, N_2^\beta$ – константи, визначені з умов (3.2) – (3.4),
 $\operatorname{erf}(z) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^z e^{-\xi^2} d\xi$ – інтеграл помилок, $\operatorname{erfc}(z) = 1 - \operatorname{erf}(z)$.

$$\operatorname{erf} x = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-\xi^2} d\xi \quad A \operatorname{erf} \frac{x}{2(\kappa t)^{\frac{1}{2}}},$$

$$\operatorname{erf} 0 = 0, \quad \operatorname{erf} \infty = 1, \quad \operatorname{erf}(-x) = -\operatorname{erf} x.$$

$$\operatorname{erfc} x = 1 - \operatorname{erf} x,$$

Зі значення концентрацій на межах області (3.2), (3.3) визначимо константи N_1^α, N_2^α :

$$N_1^\alpha = N_\alpha, N_1^\beta = N_\beta.
 \tag{3.7}$$

Константи N_2^α, N_2^β визначимо умови на міжфазному кордоні (3.4):

$$\begin{aligned}
 N_2^\alpha &= \frac{N_\alpha - N_s}{\operatorname{erf}\left(\frac{s(t)}{2\sqrt{tD^\alpha}}\right)}, \\
 N_2^\beta &= \frac{N_s - N_\beta}{\operatorname{erfc}\left(\frac{s(t)}{2\sqrt{tD^\beta}}\right)}.
 \end{aligned}
 \tag{3.8}$$

З (3.8) неявно випливає рівність $s(t) = A\sqrt{t}$, де A – константа.

Таким чином (3.8) випливає відомий результат завдання Стефана про залежність зміщення міжфазного кордону від часу. [72, 80,83].

3.1.2. Модифікована умова Стефана на міжфазному кордоні

У цій роботі автором запропоновано нову, модифіковану, умову Стефана. Ця умова отримана з рівняння (3.1) методом інтегрування за тонким перехідним шаром завтовшки $\varepsilon \ll l$ по обидва боки межі розділу фаз: $s(t) - \varepsilon \leq x \leq s(t) + \varepsilon$. Після операції інтегрування товщина шару прямує до нуля. ($\varepsilon \rightarrow 0$). Для спрощення процедури інтегрування за тонким перехідним

шаром вважаємо, що коефіцієнти дифузії $D(x, t)$ далеко від міжфазного кордону є постійними величинами:

$$D(x \leq s(t) - \varepsilon, t) = D^\alpha = \text{const}_1, \quad D(x \geq s(t) + \varepsilon, t) = D^\beta = \text{const}_2.$$

При цьому представимо коефіцієнт дифузії $D(x, t)$ у модельному вигляді - сумою функцій Хевісайду:

$$D(x, t) = D^\alpha \theta(s(t) - x + \varepsilon) + D^\beta \theta(x - s(t) + \varepsilon), \quad (3.9)$$

де $\theta(x)$ – асиметрична одинична функція, що задовольняє умови $\theta(x) = 1$ при $x \geq 0$ і $\theta(x) = 0$ при $x < 0$.

Графік залежності коефіцієнта дифузії середовища $D(x - s(t), t)$ від координати x для кордону між фазами $x = s(t)$ наведений на Рис. 3.2.

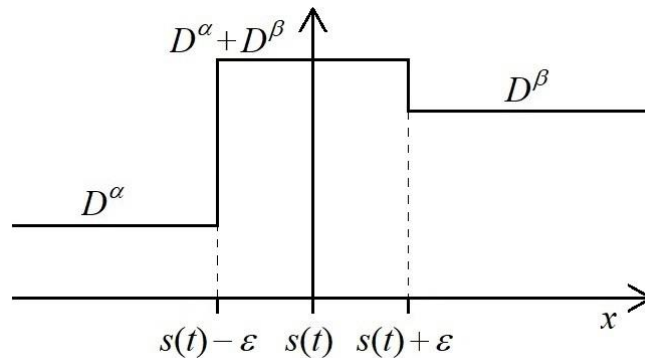


Рис. 3.2. Модельна залежність коефіцієнта дифузії середовища $D(x, t)$ від координати x і кордону розділа фаз $x = s(t)$

Підсумовування коефіцієнтів дифузії фаз у перехідному шарі (3.9) пов'язане з припущенням, що накладення дифузійного руху частинок не призводить до їх погашення, а навпаки, інтенсифікує його, тобто призводить до збільшення коефіцієнта дифузії. Припущення про підсумовування характерних параметрів у перехідному шарі, наприклад в'язкості рідких середовищ, що стикаються, виявилось продуктивним при описі нестійкості Кельвіна-Гельмгольца (КГ) [81,82]. Використання такого підходу дозволило знизити теоретичну межу граничної швидкості початку нестійкості КГ до експериментального. Однак для коефіцієнтів поверхневого натягу двох контактуючих рідин цей підхід не застосовується. Коефіцієнти поверхневого

натягу в перехідному шарі віднімаються, згідно з правилом Антонова [84,85,86], що експериментально підтверджується.

Проінтегруємо функцію, що дорівнює нулю $G(x, t) = \frac{\partial}{\partial t} N(x, t) - \frac{\partial}{\partial x} \left(D(x, t) \frac{\partial}{\partial x} N(x, t) \right) = 0$ у нескінченних межах:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} G(x, t) dx &= \int_{-\infty}^{+\infty} \left[\frac{\partial}{\partial t} N(x, t) - \frac{\partial}{\partial x} \left(D(x, t) \frac{\partial}{\partial x} N(x, t) \right) \right] dx = \\ \int_{-\infty}^{+\infty} \left[\frac{\partial}{\partial t} N(x, t) - \left(\frac{\partial}{\partial x} D(x, t) \right) \left(\frac{\partial}{\partial x} N(x, t) \right) - D(x, t) \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial}{\partial x} N(x, t) \right] dx &= 0. \end{aligned} \quad (3.10)$$

Обчислимо перший та третій інтеграли (3.10).

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial}{\partial t} N(x, t) dx - \int_{-\infty}^{\infty} D(x, t) \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial}{\partial x} N(x, t) dx &= \\ = \int_{-\infty}^{\infty} \left[\frac{\partial}{\partial t} N(x, t) - D(x, t) \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial}{\partial x} N(x, t) \right] dx &= \\ \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left(\int_{-\infty}^{s(t)-\varepsilon} \left[\frac{\partial}{\partial t} N(x, t) - D(x, t) \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial}{\partial x} N(x, t) \right] dx + \right. \\ \int_{s(t)-\varepsilon}^{s(t)+\varepsilon} \left[\frac{\partial}{\partial t} N(x, t) - D(x, t) \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial}{\partial x} N(x, t) \right] dx \\ \left. + \int_{s(t)+\varepsilon}^{\infty} \left[\frac{\partial}{\partial t} N(x, t) - D(x, t) \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial}{\partial x} N(x, t) \right] dx \right) = \\ \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left(\int_{-\infty}^{s(t)-\varepsilon} \left[\frac{\partial}{\partial t} N^{\alpha}(x, t) - D^{\alpha}(x, t) \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial}{\partial x} N^{\alpha}(x, t) \right] dx + \right. \\ \int_{s(t)-\varepsilon}^{s(t)+\varepsilon} \left[\frac{\partial}{\partial t} N(x, t) - D(x, t) \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial}{\partial x} N(x, t) \right] dx \\ \left. + \int_{s(t)+\varepsilon}^{\infty} \left[\frac{\partial}{\partial t} N^{\beta}(x, t) - D^{\beta}(x, t) \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial}{\partial x} N^{\beta}(x, t) \right] dx \right) = \\ \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} (0 + \int_{s(t)-\varepsilon}^{s(t)+\varepsilon} \left[\frac{\partial}{\partial t} N(x, t) - D(x, t) \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial}{\partial x} N(x, t) \right] dx + 0) \Rightarrow \end{aligned}$$

Розкладемо $N(x, t)$ у ряд Тейлора на околиці $x = s(t)$

$$N(x, t) = N(s(t), t) + \frac{\partial}{\partial x} N(s(t), t)(x - s(t)) + \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial}{\partial x} N(s(t), t)(x -$$

$$s(t))^2 + \dots$$

При цьому справедлива нерівність $x - s(t) = \delta \ll l$

$$\begin{aligned}
& \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left(\int_{s(t)-\varepsilon}^{s(t)+\varepsilon} \left(\frac{\partial}{\partial t} N(s(t), t) + \frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial}{\partial x} N(s(t), t) (x - s(t)) + \dots \right) dx \right) \approx \\
& \approx \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left(\int_{s(t)-\varepsilon}^{s(t)+\varepsilon} \frac{\partial}{\partial t} N(s(t), t) dx \right. \\
& \left. + \frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial}{\partial x} N(s(t), t) \int_{s(t)-\varepsilon}^{s(t)+\varepsilon} (x - s(t)) dx + \dots \right) \approx \\
& \approx \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left(\int_{s(t)-\varepsilon}^{s(t)+\varepsilon} \frac{\partial}{\partial t} N(s(t), t) dx + \frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial}{\partial x} N(s(t), t) \frac{(x - s(t))^2}{2} \Big|_{s(t)-\varepsilon}^{s(t)+\varepsilon} \right. \\
& \left. + \dots \right) \\
& \approx \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left(\int_{s(t)-\varepsilon}^{s(t)+\varepsilon} \frac{\partial}{\partial t} N(s(t), t) dx \right) + \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left(\frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial}{\partial x} N(s(t), t) \frac{(\varepsilon)^2}{2} \right) \\
& - \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left(\frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial}{\partial x} N(s(t), t) \frac{(-\varepsilon)^2}{2} \right) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left(\int_{s(t)-\varepsilon}^{s(t)+\varepsilon} \frac{\partial}{\partial t} N(s(t), t) dx \right) = \\
& = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left(\int_{s(t)-\varepsilon}^{s(t)+\varepsilon} \left(\frac{\partial}{\partial t} N(s(t), t) + \frac{\partial}{\partial x} N(s(t), t) \frac{\partial s(t)}{\partial t} \right) dx \right) = \\
& = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left(\int_{s(t)-\varepsilon}^{s(t)+\varepsilon} \left(\frac{\partial}{\partial t} N(s(t), t) + \frac{\partial}{\partial x} N(s(t), t) \frac{\partial s(t)}{\partial t} \right) dx \right) \Rightarrow \\
& \text{У другому інтегралі можна замінити } N(s(t), t) \text{ на} \\
& N(x, t), \text{ тому що раніше було відзначено, що } x \approx s(t) \Rightarrow \\
& \Rightarrow \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left(\frac{\partial}{\partial t} N(s(t), t) \Big|_{s(t)-\varepsilon}^{s(t)+\varepsilon} + \frac{\partial s(t)}{\partial t} \int_{s(t)-\varepsilon}^{s(t)+\varepsilon} \frac{\partial}{\partial x} N(x, t) dx \right) = \\
& = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left(\frac{\partial}{\partial t} N(s(t), t) \cdot 2\varepsilon + \frac{\partial s(t)}{\partial t} N(x, t) \Big|_{s(t)-\varepsilon}^{s(t)+\varepsilon} \right) = \\
& = \frac{\partial s(t)}{\partial t} \left(N^\beta(s(t), t) - N^\alpha(s(t), t) \right) \tag{3.11}
\end{aligned}$$

Обчислимо другий інтеграл (3.10):

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{\partial}{\partial x} D(x, t) \right) \left(\frac{\partial}{\partial x} N(x, t) \right) dx &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{+\infty} \left(D^\beta \delta(x - s(t) + \varepsilon) - D^\alpha \delta(x - s(t) - \varepsilon) \right) \frac{\partial}{\partial x} N(x, t) dx = \\ &= D^\beta \frac{\partial}{\partial x} N^\alpha(s(t), t) - D^\alpha \frac{\partial}{\partial x} N^\beta(s(t), t) \end{aligned} \quad (3.12)$$

Таким чином, загальний вираз (3.10) набуває вигляду:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} G(x, t) dx &= \frac{\partial s(t)}{\partial t} \left(N^\beta(s(t), t) - N^\alpha(s(t), t) \right) - \\ - D^\beta \frac{\partial}{\partial x} N^\alpha(s(t), t) + D^\alpha \frac{\partial}{\partial x} N^\beta(s(t), t) &= 0. \end{aligned} \quad (3.13)$$

Швидкість переміщення міжфазного кордону в модифікованому поданні дорівнює:

$$\begin{aligned} N^\alpha(x, t) &= N_1^\alpha - N_2^\alpha \operatorname{erf} \left(\frac{x}{2\sqrt{tD^\alpha}} \right), \\ N^\beta(x, t) &= N_1^\beta + N_2^\beta \operatorname{erfc} \left(\frac{x}{2\sqrt{tD^\beta}} \right), \end{aligned} \quad (3.6)$$

$$\frac{\partial s(t)}{\partial t} = \frac{D^\beta \frac{\partial}{\partial x} N^\alpha(s(t), t) - D^\alpha \frac{\partial}{\partial x} N^\beta(s(t), t)}{N^\beta(s(t), t) - N^\alpha(s(t), t)} \quad (3.14)$$

У [87] умова Стефана полягає в тому, що коефіцієнт дифузії β/α фази множиться на похідну концентрацію за координатою β/α фази. Відмінність умови Стефана від (3.14) полягає у перехресному розташуванні похідних концентрацій по координаті. Під перехресним розташуванням похідних концентрацій по координаті слід розуміти збільшення коефіцієнта дифузії $\beta(\alpha)$ на похідну концентрацію за координатою $\alpha(\beta)$ [68,83,88].

З виразів (3.7), (3.8), (3.14) впливає модифікована умова Стефана:

$$\frac{\partial s(t)}{\partial t} = \frac{-D^\beta N_2^\alpha \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{\sqrt{tD^\alpha}} e^{-\frac{(s(t))^2}{4tD^\alpha}} - D^\alpha N_2^\beta \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{\sqrt{tD^\beta}} e^{-\frac{(s(t))^2}{4tD^\beta}}}{N^\beta - N^\alpha + N_2^\alpha \operatorname{erf} \left(\frac{x}{2\sqrt{tD^\alpha}} \right) + N_2^\beta \operatorname{erfc} \left(\frac{x}{2\sqrt{tD^\beta}} \right)}. \quad (3.15)$$

Виконавши у (3.15) підстановку $s(t) = A\sqrt{t}$ отримаємо трансцендентне рівняння для визначення A :

$$A = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \frac{-D^\beta N_2^\alpha \frac{1}{\sqrt{D^\alpha}} e^{-\frac{A^2}{4D^\alpha}} - D^\alpha N_2^\beta \frac{1}{\sqrt{D^\beta}} e^{-\frac{A^2}{4D^\beta}}}{N^\beta - N^\alpha + N_2^\alpha \operatorname{erf}\left(\frac{A}{2\sqrt{D^\alpha}}\right) + N_2^\beta \operatorname{erfc}\left(\frac{A}{2\sqrt{D^\beta}}\right)}. \quad (3.16)$$

Перепишемо (3.16) у більш зручному для застосування до експериментальних даних вигляді, виконавши наступні заміни: $y = A/2\sqrt{D^\beta}$, $\lambda_{\alpha\beta} = D^\alpha/D^\beta$

$$\frac{N_2^\alpha}{N^\alpha} = \frac{(N_\alpha - N_s)}{N^\alpha \operatorname{erf}(\sqrt{\lambda_{\beta\alpha}y})},$$

$$\frac{N_2^\beta}{N^\alpha} = \frac{(N_s - N_\beta)}{N^\alpha \operatorname{erfc}(y)}.$$

$$\begin{aligned} \frac{A}{2\sqrt{D^\beta}} &= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{-N_2^\alpha \frac{\sqrt{D^\beta}}{\sqrt{D^\alpha}} e^{-\frac{A^2}{4D^\alpha}} - N_2^\beta \frac{D^\alpha}{D^\beta} e^{-\frac{A^2}{4D^\beta}}}{N^\beta - N^\alpha} \\ y &= \frac{1}{\sqrt{\pi}\sqrt{\lambda_{\alpha\beta}}} \frac{-\frac{(N_\alpha - N_s)}{N^\alpha \operatorname{erf}(\sqrt{\lambda_{\beta\alpha}y})} \sqrt{\lambda_{\beta\alpha}} e^{-\frac{A^2}{4D^\alpha}} - \frac{(N_s - N_\beta)}{N^\alpha \operatorname{erfc}(y)} \lambda_{\alpha\beta} e^{-\frac{A^2}{4D^\beta}}}{-1 + \frac{N^\beta}{N^\alpha} + \frac{N_2^\alpha}{N^\alpha} \operatorname{erf}\left(\frac{A}{2\sqrt{D^\alpha}}\right) + \frac{N_2^\beta}{N^\alpha} \operatorname{erfc}\left(\frac{A}{2\sqrt{D^\beta}}\right)} \end{aligned} \quad (3.17)$$

$$y = \frac{1}{\sqrt{\pi}\sqrt{\lambda_{\alpha\beta}}} \frac{\frac{(N_\alpha - N_s)}{N^\alpha \operatorname{erf}(\sqrt{\lambda_{\beta\alpha}y})} \sqrt{\lambda_{\beta\alpha}} e^{-\frac{A^2}{4D^\alpha}} + \frac{(N_s - N_\beta)}{N^\alpha \operatorname{erfc}(y)} \lambda_{\alpha\beta} e^{-\frac{A^2}{4D^\beta}}}{1 - \frac{N^\beta}{N^\alpha} - \frac{N_2^\alpha}{N^\alpha} \operatorname{erf}\left(\frac{A}{2\sqrt{D^\alpha}}\right) - \frac{N_2^\beta}{N^\alpha} \operatorname{erfc}\left(\frac{A}{2\sqrt{D^\beta}}\right)}$$

y

$$\begin{aligned}
 &= \frac{\lambda_{\alpha\beta}}{\sqrt{\pi}\sqrt{\lambda_{\alpha\beta}}} \frac{\frac{\left(1 - \frac{N_s}{N^\alpha}\right) \sqrt{\lambda_{\beta\alpha}}}{\operatorname{erf}(\sqrt{\lambda_{\beta\alpha}}y)} e^{-\lambda_{\beta\alpha}y^2} + \frac{\left(\frac{N_s}{N^\alpha} - \frac{N_\beta}{N^\alpha}\right)}{\operatorname{erfc}(y)} e^{-y^2}}{1 - \frac{N_\beta}{N^\alpha} - \frac{\left(1 - \frac{N_s}{N^\alpha}\right)}{\operatorname{erf}(\sqrt{\lambda_{\beta\alpha}}y)} \operatorname{erf}\left(\frac{A}{2\sqrt{D^\alpha}}\right) - \frac{\left(\frac{N_\beta}{N^\alpha} - \frac{N_s}{N^\alpha}\right)}{\operatorname{erfc}(y)} \operatorname{erfc}\left(\frac{A}{2\sqrt{D^\beta}}\right)} \\
 y &= \frac{\lambda_{\alpha\beta}}{\sqrt{\pi}\sqrt{\lambda_{\alpha\beta}}} \frac{\frac{\left(1 - \frac{N_s}{N^\alpha}\right) \sqrt{\lambda_{\beta\alpha}}}{\operatorname{erf}(\sqrt{\lambda_{\beta\alpha}}y)} e^{-\lambda_{\beta\alpha}y^2} + \frac{\left(\frac{N_s}{N^\alpha} - \frac{N_\beta}{N^\alpha}\right)}{\operatorname{erfc}(y)} e^{-y^2}}{1 - \frac{N_\beta}{N^\alpha} - \frac{\left(1 - \frac{N_s}{N^\alpha}\right)}{\operatorname{erf}(\sqrt{\lambda_{\beta\alpha}}y)} \operatorname{erf}(\sqrt{\lambda_{\beta\alpha}}y) - \frac{\left(\frac{N_\beta}{N^\alpha} - \frac{N_s}{N^\alpha}\right)}{\operatorname{erfc}(y)} \operatorname{erfc}(y)}
 \end{aligned}$$

де $\lambda_{\alpha\beta} = 1/\lambda_{\beta\alpha}$, $N^\alpha > N^\beta$.

Рівняння (3.17) повинно мати нульову швидкість міжфазного кордону за умови, що з обох боків кордону середовища належать одній фазі. Справді, вважаючи, $\lambda_{\alpha\beta} \rightarrow 1$, $\xi = \frac{N^\beta}{N^\alpha}$, $\zeta = \frac{N^s}{N^\beta}$ отримаємо:

$$\begin{aligned}
 y &= \lim_{\xi \rightarrow 1} \lim_{\zeta \rightarrow 1} \left(\frac{e^{-y^2}}{\sqrt{\pi} \operatorname{erf}(y)} \frac{(1 - \zeta \cdot \xi) + \xi(\zeta - 1)}{1 - \xi - (1 - \zeta \cdot \xi) - (\xi - \zeta \cdot \xi)} \right) \\
 &= \lim_{\xi \rightarrow 1} \lim_{\zeta \rightarrow 1} \left(\frac{e^{-y^2}}{\sqrt{\pi} \operatorname{erf}(y)} \frac{(1 - \xi)}{\sqrt{\pi} \operatorname{erf}(y) - 2\xi + 2\zeta \cdot \xi} \right) = \\
 &= \lim_{\xi \rightarrow 1} \lim_{\zeta \rightarrow 1} \left(\frac{e^{-y^2}}{\sqrt{\pi} \operatorname{erf}(y)} \frac{(1 - \xi)}{\sqrt{\pi} \operatorname{erf}(y) - 2\xi(1 - \zeta)} \right)
 \end{aligned} \tag{3.18}$$

Вважаємо $A/\sqrt{D^\beta} \ll 1$, $\lambda_{\alpha\beta} \ll 1$

$$\begin{aligned}
 \operatorname{erf}\left(\frac{y}{\sqrt{\lambda_{\alpha\beta}}}\right) &= \frac{2}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{y}{\sqrt{\lambda_{\alpha\beta}}} - \frac{1}{3} \left(\frac{y}{\sqrt{\lambda_{\alpha\beta}}}\right)^3 + \dots \right) \\
 \operatorname{erf}(y) &= \frac{2}{\sqrt{\pi}} \left(y - \frac{1}{3} (y)^3 + \dots \right)
 \end{aligned}$$

До того ж справедливі розкладання:

$$e^{-\frac{y^2}{\lambda_{\alpha\beta}}} = 1 - \frac{y^2}{\lambda_{\alpha\beta}} + \frac{1}{2} \left(\frac{y^2}{\lambda_{\alpha\beta}} \right)^2 - \dots$$

$$e^{-y^2} = 1 - y^2 + \frac{1}{2} (y^2)^2 - \dots$$

Вважаємо, що $A/\sqrt{D^\beta} \ll 1, \lambda_{\alpha\beta} \ll 1$, і знайдемо розв'язок (3.17) для випадку $y \ll 1$ [85,89].

У цьому граничному випадку з рівняння (3.17) отримаємо значення коефіцієнта A :

y

$$\approx \frac{\sqrt{\lambda_{\alpha\beta}}}{\sqrt{\pi}} \frac{\frac{(1 - \frac{N_s}{N^\alpha})}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{y}{\sqrt{\lambda_{\alpha\beta}}} - \frac{1}{3} \left(\frac{y}{\sqrt{\lambda_{\alpha\beta}}} \right)^3 + \dots \right) (\lambda_{\beta\alpha})^{\frac{3}{2}} + \frac{\frac{N_s}{N^\alpha} - \frac{N_\beta}{N^\alpha}}{\sqrt{\pi}} \left(y - \frac{1}{3} (y)^3 + \dots \right)}{1 - \frac{N^\beta}{N^\alpha}}$$

$$y \approx \frac{\sqrt{\lambda_{\alpha\beta}}}{2y} \frac{\left(1 - \frac{N_s}{N^\alpha}\right) \sqrt{\lambda_{\alpha\beta}} (\lambda_{\beta\alpha})^{\frac{3}{2}} + \frac{N_s}{N^\alpha} - \frac{N_\beta}{N^\alpha}}{1 - \frac{N^\beta}{N^\alpha}}$$

$$\lambda_{\alpha\beta} \lambda_{\beta\alpha} = 1 \tag{3.19}$$

$$y \approx \frac{\sqrt{\lambda_{\alpha\beta}}}{2y} \frac{\left(1 - \frac{N_s}{N^\alpha}\right) \lambda_{\beta\alpha} + \frac{N_s}{N^\alpha} - \frac{N_\beta}{N^\alpha}}{1 - \frac{N^\beta}{N^\alpha}}$$

$$y^2 \approx \frac{\sqrt{\lambda_{\beta\alpha}}}{2} \frac{1 - \frac{N_s}{N^\alpha}}{1 - \frac{N^\beta}{N^\alpha}}$$

$$A \approx 2\sqrt{D^\beta} \sqrt{\frac{\sqrt{\lambda_{\beta\alpha}}}{2} \frac{1 - \frac{N_s}{N^\alpha}}{1 - \frac{N^\beta}{N^\alpha}}}$$

Щоб перевірити розв'язання модифікованої Умови Стефана та відповідність отриманого значення коефіцієнта (3.19) на експериментальних результатах переміщення кордону Cu/Sn при дифузійному з'єднанні в

результаті ізотермічного відпалу при температурах 433 – 473 К, наведені у [90]. У роботі [91] показано, що внаслідок відпалу на кордоні Cu/Sn формуються складові шари (компаунди), що складаються з Cu_3Sn і Cu_6Sn_5 . Межі між Cu/ Cu_3Sn / Cu_6Sn_5 /Sn переміщуються пропорційно t^n , де показник ступеня n залежно від температури 433 К, 453 К, 473 К дорівнює 0.37, 0.43, 0.5 відповідно.

Для перевірки відповідності результатів теоретичної моделі з експериментом виберемо дані для відпалу зразків при температурі 473 К масляній ванні з силіконовим маслом[89,90]. Вибір даних при такій температурі відпалу пов'язаний з тим, що в цьому випадку виключається дифузія по межах зерен, а існує лише об'ємна дифузія, розгляду якої присвячена пропонована модель. З експериментів випливає, що усунення міжфазної межі сумарної товщини двох шарів компаунду l монотонно збільшується із збільшенням часу відпалу t за законом $l = k(t/t_0)^{0.5}$, де $t_0 = 1$ с – одиниця часу, k – константа, має розмірність довжини СІ - м. При цьому шари компаундів переміщуються згодом за одним законом[92].

Для розрахунку константи A , яка в [87] позначена k , задаємо значення коефіцієнтів дифузії з обох боків перехідного шару. Позначимо D^α коефіцієнт дифузії на кордоні Cu/ Cu_3Sn [93]: $D^\alpha = D_{\text{Cu}/\text{Cu}_3\text{Sn}}^* = 3.53 \cdot 10^{-17}$ м²/с, а D^β - коефіцієнт дифузії на кордоні Sn/ Cu_6Sn_5 : $D^\beta = D_{\text{Sn}/\text{Cu}_6\text{Sn}_5}^* = 2.37 \cdot 10^{-16}$ м²/с. Відношення концентрацій N^β/N^α визначається ставленням щільностей: $N^\beta/N^\alpha = 7.3/8.94 = 0.82$.

Підстановка (3.16) значень коефіцієнтів дифузії D^α и D^β дає величину коефіцієнта A :

$$\begin{aligned}
 A &= 2\sqrt{D^\beta} \sqrt{\frac{\sqrt{\lambda_{\beta\alpha}} \frac{1 - \frac{N_s}{N^\alpha}}{2}}{1 - \frac{N^\beta}{N^\alpha}}} = \sqrt{D^\beta} \sqrt{\lambda_{\beta\alpha}} \sqrt{2 \frac{1 - \frac{N_s}{N^\alpha}}{1 - \frac{N^\beta}{N^\alpha}}} = \frac{\sqrt{2.37 \cdot 10^{-16}}}{\sqrt{0.353/2.37}} \sqrt{2 \frac{1 - \frac{N_s}{N^\alpha}}{1 - \frac{N^\beta}{N^\alpha}}} \\
 &= \frac{2.37 \cdot 10^{-8}}{\sqrt{0.353}} \sqrt{\frac{2 \cdot \left(1 - \frac{N_s}{N^\alpha}\right)}{0.18}} = \frac{2.37 \cdot 10^{-8}}{\sqrt{0.353}} \sqrt{\frac{2 \cdot \left(1 - \frac{N_s}{N^\alpha}\right)}{0.18}}
 \end{aligned}$$

$$= 3.98 \cdot 10^{-8} \cdot \sqrt{\frac{\left(1 - \frac{N_s}{N^\alpha}\right)}{0.09}} \quad (3.20)$$

З експериментальних даних [94] випливає, що сумарної загальної товщини компаунда безрозмірна константа k/k_0 , де $k_0 = 1$ м - одиниця довжини 1 м, визначається величиною $k = 1.69 \cdot 10^{-8}$. З (3.19) випливає, що з відношення констант порядку $N_s/N^\alpha \approx 0.985$ значення константи A близько до експериментального значення k .

У той же час підстановка експериментальних даних [95, 96] у стандартну (не модифіковану) умову Стефана дає негативний коефіцієнт:

$$A = \frac{2^{-D^\beta \frac{(N_\beta - N_s)}{N^\alpha \operatorname{erf}(y)} \frac{1}{\sqrt{D^\beta}} e^{-\frac{A^2}{4D^\beta}} + D^\alpha \frac{(N_\alpha - N_s)}{N^\alpha \operatorname{erf}(\sqrt{\lambda_{\beta\alpha}y})} \frac{1}{\sqrt{D^\alpha}} e^{-\frac{A^2}{4D^\alpha}}}}{\sqrt{\pi} \frac{N^\beta}{N^\alpha} - 1} =$$

$$= \frac{2^{D^\beta \frac{(N_s - N_\beta)}{N^\alpha \operatorname{erf}(y)} \frac{1}{\sqrt{D^\beta}} e^{-\frac{A^2}{4D^\beta}} + D^\alpha \frac{(N_\alpha - N_s)}{N^\alpha \operatorname{erf}(\sqrt{\lambda_{\beta\alpha}y})} \frac{1}{\sqrt{D^\alpha}} e^{-\frac{A^2}{4D^\alpha}}}}{\sqrt{\pi} \frac{N^\beta}{N^\alpha} - 1} < 0. \quad (3.21)$$

Звідси випливає, що МК рухається у напрямку протилежному тому, що спостерігається в експерименті [97,98,99].

Таким чином, проведене порівняння теоретичного розгляду задачі Стефана з використанням нового підходу в описі руху міжфазного кордону з експериментальними даними, вказує на справедливість запропонованого автором цієї роботи способу одержання умови Стефана. Цей висновок заснований на відповідності теоретично розрахованої відстані переміщення міжфазного кордону з експериментальним.

Цей висновок свідчить про необхідність під час вирішення ЗС використання модифікованого умови Стефана, що описує рух МК у задачах теплопровідності чи дифузії.

Висновки до розділу 3.

1. Зроблено припущення, що у перехідному шарі коефіцієнти дифузії обох фаз підсумовуються, і методом інтегрування отримано модифіковану

умову Стефана. Показано, що, як і в стандартному завданні Стефана, переміщення міжфазного кордону пропорційне квадратному кореню з часу. У стандартній задачі Стефана за умови Стефана для рухомого кордону коефіцієнти дифузії $\alpha(\beta)$ фаз множаться на похідну концентрацію за координатою $\alpha(\beta)$ фаз.

2. Показано, що підсумовування коефіцієнтів дифузії у перехідному шарі призводить до модифікованої умови Стефана. Модифікована умова Стефана полягає в тому, що коефіцієнт дифузії $\beta(\alpha)$ фази множаться на похідну концентрації за протилежною координатою $\alpha(\beta)$ фази.

3. Модифіковані умови Стефана були перевірені з використанням експериментальних результатів щодо зміщення межі розділу Cu/Sn під час дифузійного з'єднання в результаті ізотермічного відпалу, було отримано хорошу кількісну узгодженість між модельними та експериментальними наборами даних.

4. Порівняння зміщення міжфазного кордону, що впливає зі стандартної задачі Стефана, з експериментальними даними дає суперечливий результат: теоретично розраховане зміщення міжфазного кордону спрямоване в протилежний бік експериментально, що спостерігається.

Висновки

Дослідження мартенситних перетворень у маловуглецевих сталях відіграє важливу роль у розумінні їхніх структурних і механічних властивостей, що відкриває нові перспективи для застосування цих матеріалів у різних галузях промисловості. У результаті проведених досліджень вдалося визначити ключові фактори, що впливають на процеси мартенситного перетворення, а також розробити більш точні моделі для прогнозування поведінки сталей під різними умовами.

1. Розвинуто методологічний підхід до опису атермічних та ізотермічних прямих мартенситних перетворень вуглецевих сталей, що ґрунтується на моделі індукованих переходів квазічастинок між енергетичними рівнями, розвинутої А. Ейнштейном. Особливістю підходу є система рівнянь, яка враховує вплив фононів на кристалічну решітку вуглецевої сталі, що ініціює переходи елементарних осередків як зі стану М у А, так і навпаки. Тому вперше в подібній системі рівнянь буде враховано ймовірність індукованих переходів.

2. З використанням розробленої аналітичної моделі описано ізотермічні ПМП маловуглецевої нікелевої сталі ($Fe + 7\%Cr + 2\%Ni$) і марганцевої сталі ($Fe + 0,7\%C + 6,5\%Mn$). Отримані з вихідних рівнянь аналітичні залежності включають в себе чотири постійні коефіцієнта, величина яких визначається експериментально і залежить від температури перетворення, початкової кількості наночасток М і А і максимально наближено показує залежність мартенситного перетворення від часу.

3. Порівняння аналітичних залежностей, що описують ізотермічний ПМП двох видів легованої сталі, з експериментальними даними в області і високих і низьких температур показують статистично достовірну кількісну відповідність. Така відповідність вказує на можливість використання заснованої на принципі детальної рівноваги моделі ПМП для опису процесів ПМП легованих сталей. Встановлено, що патерн розрахованих кривих ПМП є однаковим в області низьких температур для нікелевих і марганцевих

сталей, але відрізняється для різних сталей в області високих температур, що може бути пояснено різною кількістю початкового аустеніту в різних сталях, що впливає на швидкість його переходу в іншу фазу.

4. Перевірка модифікованих умов Стефана за допомогою експериментальних даних про зміщення межі розділу Cu/Sn під час дифузійного з'єднання в результаті ізотермічного відпалу виявила добру кількісну відповідність між модельними та експериментальними даними, що свідчить про перспективу використання даних умов в розрахунках динаміки фазових переходів у рідинах.

5. Встановлена протилежна кореляція між зміщенням міжфазної межі, отриманого зі стандартної задачі Стефана, та експериментально розрахованими даними. Зроблено припущення, що в основі цих розбіжностей може лежати той факт, що були обрані експериментальні дані, при яких виключається дифузія по межах зерен, а існує лише об'ємна дифузія, розгляду якої і присвячена запропонована модель. Саме перегляд цих розбіжностей може стати об'єктом подальших досліджень.

СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

1. Ландау Л.Д. К теории фазовых переходов / Л.Д. Ландау // ЖЭТФ. – 1937. – Т. 7. – С. 19 – 32.
2. R. Peierls. *Helv. Phys. Acta*, VII, Suppl. II, 1936 p. 81
3. Курдюмов Г.В. Явления закалки и отпуска стали. Москва. «Металлургия» 1960 год.
4. Кристиан Дж. Теория превращений в металлах и сплавах / Дж. Кристиан. – Ч. 1. – М.: Мир, 1978. – 806 с.
5. Гуляев А.П. *Металловедение. Учебник для вузов.* 6-е изд., перераб. и доп. - М.: *Металлургия.* - 1986. 544 с.
6. F. E. Werner, B. L. Averbach, M. Cohen. *Trans A. S. M.* 1937, 49, 823.
7. N. J. Petch. *Journal Iron Steel Inst.*, 1943, 147, 221.
8. L. Kaufman, M. Cohen *Journ. of Met.*, 1956, 8, p. 1393.
9. K. D. Heidenreich, L. Sturkey, H. L. Woods. *Journ. Appl. Phys.*, 1946, 17, 127
10. Н.С.Фастов. Проблемы металловедения и физики металлов 1955 с. 219.
11. Darwish S. M. *Analysis of weld-bonded dissimilar materials// Intern. J. of Adhesion & Adhesives.* - 2004. - №24. - P. 347-354.
12. R.H. Bradley, B. Rand. A comparison of the adsorption behaviour of nitrogen, alcohols and water towards active carbons // *Carbon.* 1991, v. 29, p. 1165- 1172
13. Kahraman N., Gulenc B., Findik F. Corrosion and mechanical- microstructural aspects of dissimilar joints of Ti-6Al-4V and Al plates. // *Intern. J. of Impact Engineering.* - 2007. - № 34. - P. 1423-1432.
14. Махненко В. И. Ресурс безопасной эксплуатации сварных соединений и узлов современных конструкций. - Киев: *Наук. думка*, 2010. - 618 с
15. Furrer D., Fecht H. (1999) Ni-Based Superalloys for Turbine Discs. *JOM*, 1, 14–17
16. Li, W., Vairis, A., Preuss, M., Ma, T. Linear and rotary friction welding review. *International Materials Reviews*, (2016) 61, 2, 91–100. DOI:

- 10.1080/09506608.2015.1109214.
17. Xu, Q, Chaturvedi, MC, Richards, NL. The role of phase transformation in electron-beam welding of TiAl based alloys. *Metallurgical and Materials Transactions, A*, (1999) 30A, pp. 1717–1726
18. Liu, J., Dahmen, M., Ventzke, V. et al. The effect of heat treatment on crack control and grain refinement in laser beam welded beta-solidifying TiAl-based alloy. *Intermetallics*, (2013) p. 40,
19. Seo J.S., Kim H.J., Ryoo H.S. Microstructure parameter controlling weld metal cold cracking. *J. of Achievements in Materials and Manufacturing Engineering*, (2008) 27, pp. 199–202.
20. Grigorenko, G.M., Kostin V.A., Orlovsky V.Yu. Current capabilities of simulation of austenite transformations in low-alloyed steel welds. *The Paton Welding J.* (2008), 3, pp. 22–24
21. Kuchuk-Yatsenko S.I., Grigorenko G.M., Novikova D.P et al. Effect of energy input on ductile properties of flash butt welded joints in steel X70. *The Paton Welding J.*, (2007) 6, pp. 2–6
22. Грабский М. В. Структурная сверхпластичность металлов. М.: *Металлургия*, 1975. 270 с.
23. Yin-Yu Chang, Bao-Yu Chang, Chi-Sheng Chen Effect of CrN addition on the mechanical and tribological performances of multilayered AlTiN/CrN/ZrN hard coatings. *Surface and Coatings Technology*. 2022. Vol.433. P. 128107.
24. Пикеринг Ф. *Металловедение и разработка сталей*. М.: *Металлургия*, 1982. 181 с.
25. Ziebert C., Ulrich S. Hard multilayer coatings containing TiN and/or ZrN: A review and recent progress in their nanoscale characterization. *Journal of Vacuum Science & Technology*. 2006. Vol. 24. P. 554.
26. В. В. Кокорин, *Мартенситные превращения в неоднородных твердых растворах* (Киев: Наукова думка: 1987) с.66
27. Y. Sutou, R. Kainuma, and K. Ishida, *Mater. Sci. Eng. A*, p. 375 (1999).

28. Y. Sutou, T. Omori, R. Kainuma, and K. Ishida, *J. Phys. IV*, 112: p. 511 (2003)
29. Курдюмов Г. В., Утевский Л. М., Энтин Р. М. Превращения в железе и стали. М.: Наука, 1979. 237 с.
30. Коваль Ю.Н., Лободюк В.А. Деформационные и релаксационные явления при превращениях мартенситного типа. - К.: Наукова Думка, 2010, 288 с.
31. Эстрин Э.И. Устойчивость решетки и мартенситные превращения // В кн. Мартенситные превращения. - К.: Наук. думка, 1980. - 29 с.
32. K.S.W. Sing, D.H. Everett, R.A.W. Haul, L. Moscou, R.A. Pierotti, J. Rouquerol, T. Siemieniowska. Reporting physisorption data for gas/solid systems // *Pure and Applied Chemistry*. 1985, v. 57(4), p. 603-619
33. Morito S, Yoshida H, Maki T, Huang X. Effect of block size on the strength of lath martensite in low carbon steels. // *Mat. Sci. and Eng. A*, 2006, v. 438440, pp. 237-240.
34. J. Zhang, F. Yin, R. Wang, N. Gu, and X. Song, *Shape Memory Materials-94— Proceedings of the International Symposium on Shape Memory Materials 94*(Eds. H. Chu and H. Tu) (International Academic Publishers: 1994) pp. 432-435
35. Jin B., Chen W. Boundary knot method based on geodesic distance for anisotropic problems // *Journal of Computational Physics*. 2006. Vol. 215, No. 2. P. 614-629. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2005.11.032>
36. E. Shekari, M.R. Shishesaz, Gh. Rashed, M. Farzam, and E. Khayer. Failure Investigation of Hydrogen Blistering on Low-strength Carbon Steel. Iranian // *Journal of oil and Gas Science and Technology*. 2013, v. 2, N 2, p. 65-76
37. Колмогоров А.Н. К статистической теории кристаллизации металлов / А.Н. Колмогоров // *Изв. АН СССР. Сер. матем.* – 1937. – Т. 1. – Вып 3. – С. 355 –359
38. Goler F. und Sachs G., *Zeitschr. f. Physik*, 77, 281, 1932
39. Коган Л.И., Энтин Р.И. О кинетике полиморфного превращения

- легированного железа: в сб. «Проблемы металловедения и физики металлов». – М.: Metallurgiya, 1951. – № 2, с. 204–216.
40. В. А. Лободюк, Э. И. Эстрин, «Изотермическое мартенситное превращение», УФН, 175:7 (2005), 745–765
41. Kikuchi T, Kajwara S, in Proc. of the Intern. Conf. on Martensitic Transformations, (Nara: The Japan Institute of Metals, 1987) p. 192
42. Firstov G., Koval Yu., Timoshevskii A., Yablonovskii S., Van Humbeeck J., Chemical bonding and crystal structure of Zr-based intermetallic high-temperature shape memory alloys // Chemistry of Metals and Alloys – 2013. – 6 - P. 205-208
43. Тітов П.В., Хандрос Л.Г. Термопружні та залишкові кристали мартенситної b-фази в сплаві Cu-Sn // УФЖ, 1963, т.8, №1, с.109-115
44. Коваль Ю.М., Пономарьова С.О., Оніщенко М.Б. Деякі особливості фазового перетворення в церії // Металофізика та новітні технології, 2010, т.32, № 5, с.705-715
45. Любков Б.Я., Ройтбурд А.Л. О скорости зарождения центров новой фазы в однокомпонентных системах: в сб. «Проблемы металловедения и физики металлов». – М.: Metallurgizdat, 1958. – №5, с. 91–124.
46. Apple C. A, Caron R.N, Krauss G. Packet Microstructure in Fe-0.2 pct C Martensite // Met. Trans, 1974, v. 5, pp. 593-599
47. Мирзаев Д.А., Окишев К.Ю., Счастливец В.М., Мирзоев А.А., Яковлева И.Л., Карзунов С.Е. ПРЕВРАЩЕНИЕ АУСТЕНИТА В ФЕРРИТ В “КЛАССИЧЕСКОМ” СПЛАВЕ Fe-9 %Cr. I. АНАЛИЗ ЛИТЕРАТУРНЫХ ДАННЫХ // Известия Челябинского научного центра, 1998, вып. 2, с. 27-29
48. В.М.У. Scherzer. Sputtering by Particle Bombardment II, Springer, Berlin / R. Behrisch (Ed.), 1983, p. 271-355.
49. Hillert M. Diffusion and Interface Control of Reactions in Alloys. – Met. Trans., 1975, v. 6A, No. 1, pp. 8–18
50. Kirchner G., Nishizawa T., Uhrenius B. The Distribution of Chromium

- Between Ferrite and Austenite and the Thermodynamics of α/γ Equilibrium in the Fe-Cr and Fe Mn System. – *Met. Trans.*, 1973, v. 4, No. 1, pp. 167–172
- 51.R. Kohlhaas, M. Braun. Die thermodynamischen Funktionen des reinen Eisens, Wärmeinhalt und spezifische Wärme austenitischer Eisenlegierungen und Stähle. – *Arch. Eisenhüttenwesen*, 1963, B. 34, No. 5, pp. 391–399
- 52.Carola Celada-Casero, Jilt Sietsma, Maria Jesus Santofimia. The role of the austenite grain size in the martensitic transformation in low carbon steels // 4TU.Centre for Research Data 2019 pp. 4-7 doi: 10.4121/uuid:bb8859ef-e101-4043-afe7-a910bd1184a6
- 53.M. Koyama, Z. Zhang, M.Wang, D. Ponge, D. Raabe, K. Tsuzaki, et al., Bone-like crack resistance in hierarchical metastable nanolaminate steels, *Science* 355 (2017) pp.1055–1057.
- 54.F.G. Caballero, H.K.D.H. Bhadeshia, Very strong bainite, *Curr. Opin. Solid State Mater. Sci.* 8 (2004) pp. 251–257
- 55.J.W. Christian, in: G.B. Olson, M. Cohen (Eds.), *Thermodynamics and Kinetics of Martensite*, ICOMAT. MIT, Boston, MA 1979, pp. 145–154.
- 56.H.K.D.H. Bhadeshia, Developments in martensitic and bainitic steels: role of the shape deformation, *Mater. Sci. Eng. A* 378 (2004) pp. 34-39.
- 57.S. Ramesh Babu, D. Ivanov, D. Porter, Influence of microsegregation on the onset of the martensitic transformation, *ISIJ Int.* 59 (2018) pp. 69–175.
- 58.James Caldwell, Yuen-Yick Kwan. A BRIEF REVIEW OF SEVERAL NUMERICAL METHODS FOR ONE-DIMENSIONAL STEFAN PROBLEMS // *THERMAL SCIENCE: Vol. 13* (2009), No. 2, pp. 68 -72 doi: 10.2298/TSCI0902061C
- 59.Date, A. W., Novel Strongly Implicit Enthalpy Formulation for Multi-Dimensional Stefan problems, *Numerical Heat Transfer B*, 21 (1992), 2, pp. 231-251
- 60.Pedroso, R. I., Domoto, G. A., Perturbation Solutions for Spherical Solidification of Saturated Liquids, *Journal of Heat Transfer*, 95 (1973), 1,

- pp. 42-46
61. Caldwell, J., Chiu, C.-K., Numerical Solution of One-Phase Stefan Problems by the Heat Balance Integral Method, Part I – Cylindrical and Spherical Geometries, Communications in Numerical Methods in Engineering, 16 (2000), 8, pp. 569-583
 62. Luca Salvatori, Niccolò Tosi. Stefan Problem through Extended Finite Elements: Review and Further Investigations // MDPI Algorithms 2009, 2, pp. 1197-1205 doi:10.3390/a2031177
 63. Dolbow, J.; Fried, E.; Ji, H. Chemically induced swelling of hydrogels. Journal of the Mechanics and Physics of Solids 2004, 52, pp. 51-84
 64. Mackenzie, J. A.; Robertson, M. L. A moving mesh method for the solution of the onedimensional phase field equations. Journal of Computational Physics 2002, 181, pp. 526-544
 65. Бєлих Д.Г., Скоромна С.Ф., Ткаченко В.І. Прямі мартенситні перетворення вуглецевих сталей // Вісник херсонського національного технічного університету №3 том 2, 2018 р., Херсон, 2018. С. 177-182.
 66. Bielykh D.G., Skoromnaya S.F., Tkachenko V.I. DIRECT MARTENSITIC TRANSFORMATIONS OF LOW-CARBON STEELS. Problems of Atomic Science and Technology. 2023. №. 2. P. 37-41.
 67. Бєлих Д. Г., Ткаченко В. І. Моделі опису мартенситних перетворень низьковуглецевих легованих сталей//Студентська наукова конференція з прикладної фізики «Актуальні проблеми сучасної фізики»-Харків: ФТФ - 2017.- с. 13-15.
 68. Aliabadi MH & Ortiz EL, “Numerical treatment of moving and free boundary value problems with the Tau method”, Computers & Mathematics with Applications, Vol.35, No.8, (1998), pp.53-61
 69. Kanaka DDP, Naidu VG & Koneru SR, “Finite Difference Method for One-dimensional Stefan Problem”, Journal of Advanced Research in Dynamical and Control Systems, No.3, (2018), pp.1245-1252
 70. Villalobos Antúnez, JV (2017). Karl R. Popper, Heráclito y la invención del

- logos. Un contexto para la Filosofía de las Ciencias Sociales. Opción
Vol. 33, Núm. 84pp.5-11
71. Vulik C. Some historical notes about the Stefan problem. – 1993. – Nieuw
Archief voor Wiskunde. – 4e Serie, 11 (2). – p. 157 – 167.
72. J.R. Cannon, The one-dimensional heat equation, Addison Wesley, Reading,
(1984) pp. 4-11.
73. G. Lamé, B.P. Clapeyron, Mémoire sur la solidification par refroidissement
d'un globe liquid. Annales Chimie Physique, 47 (1831), p. 250 – 256.
74. Stefan J. Über einige Probleme der Theorie der Wärmeleitung /
Sitzungsberichte der Akademie der Wissenschaften mathematisch-
naturwissenschaftliche Klasse. – 1889. – 98 (2a). – P. 471 – 484.
75. Tarzia D.A. A Bibliography on Moving-Free Boundary Problems for the
Heat-Diffusion Equation. The Stefan and Related Problems. 2000.MAT.
Serie A: Conferencias, Seminarios y Trabajos de Matemática, 2. – p. 1 –
297.
76. Ahmad N., "Numerical simulation of transport processes in multicomponent
systems related to solidification problems", École Pol.F.Lausanne, Lausanne
(1995) pp. 5-17
77. Pawlow I., "Analysis and control of evolution multi-phase problems with
free boundaries", Polska Akademia Nauk, Warszawa (1987) pp. 21-25.
78. Lombardi A., "Soluciones autosemejantes en problemas de tipo Stefan en
medios porosos", Univ.Nac.Rosario, Rosario (1998) pp. 22-33.
79. Alifanov O.M., "Inverse heat transfer problems", Springer Verlag, Berlin
(1994) pp. 10-14.
80. Bielykh D.G., Skoromnaya S.F., Tkachenko V.I. MODIFIED STEFAN
CONDITION IN STEFAN PROBLEM. Problems of Atomic Science and
Technology. 2023. №. 5. P. 21-26
81. Lyubov B. Ya. Diffusion Processes in Heterogeneous Solid Bodies. –
Nauka. – M.: 1985. – 307 p.
82. Carslaw H. S., Jaeger J. C. Conduction of Heat in Solids / Oxford

- University Press. – Oxford: 1959. – 484 p.
83. Андреева О. Л. Гідродинамічна стійкість стратифікованих в'язких середовищ : монографія / О. Л. Андреева, В. І. Ткаченко. – Харків: ХНУ імені В. Н. Каразіна, 2020. – 204 с.
84. V.A. Pint, K.A. Terrani, M.P. Brady, et al. High temperature oxidation of fuel cladding candidate materials in steam–hydrogen environments // *J. Nucl. Mater.* 2013, v. 440, p. 420-427
85. Y.-J. Kim. Effect of Variations in Simulated BWR Water Chemistry on ECP and Electrochemistry of Structural Materials. EPRI FRP WG-4 Meeting, Freeport, ME, July 26, 2006
86. L.A. Bulavin, V.I. Tkachenko. Dissipative Rayleigh-Taylor Instability and its Contribution to the Formation of an Interface between Biomaterials at their Electric Welding // *Ukr. J. Phys.* 2018, v. 63, N 8, p. 747-753
87. Айвазов Б.В. Практикум по химии поверхностных явлений и адсорбции. Учеб. Пособие для институтов. М.: Высшая школа. 1973. – 208 с.
88. Crank J. *Free and Moving Boundary Problems.* – Oxford: Clarendon Press, 1984. – 425 p.
89. K.S.W. Sing, D.H. Everett, R.A.W. Haul, L. Moscou, R.A. Pierotti, J. Rouquerol, T. Siemieniowska. Reporting physisorption data for gas/solid systems // *Pure and Applied Chemistry.* 1985, v. 57(4), p. 603-619
90. Takenaka T., Kano S., Kajihara M., Kurokawa N., Sakamoto K. Growth behavior of compound layers in diffusion couples during annealing at 433–473 K / *Materials Science and Engineering.* – 2005. – A 396. – p. 115–123.
91. T. B. Massalski, H. Okamoto, P. R. Subramanian and L. Каспрзак: *Binary Alloy Phase Diagram* (ASM International, Materials Park, OH, 1990) vol. 1, p. 12.
92. R. Wagner, R. Kampmann and P. W. Voorhees: in *Phase Transformations in Materials*, ed. G. Kostorz (Wiley-Vch Verlag GmbH, Weinheim, 2001), pp. 370–373

93. P. Villars, A. Prince and H. Okamoto: Handbook of Ternary Alloy Phase Diagrams (ASM International, Materials Park, OH, 1995) vol. 3, p. 2170.
94. Paul A., Ghosh C., Boettinger W.J. Diffusion Parameters and Growth Mechanism of Phases in the Cu-Sn System / Metallurgical and Materials Transactions A. – 2011. – V. 42 A, p. 952 – 963.
95. D.R. Frear and P.T. Vianco: Metall. Mater. Trans. A, 1994, vol. 25A, pp. 1509–1523.
96. D.B. Butrymowicz: International Copper Research Association, Diffusion Rate Data and Mass Transport Phenomena for Copper Systems—Part II, INCRA Monograph Series V (International Copper Research Association), Diffusion in Metals Data Center, National Bureau of Standards, Washington, DC, 1981, pp. 398–475.
97. Z. Mei, A.J. Sunwoo, and J.W. Morris: Metall. Trans. A, 1992, vol. 23A, pp. 857–864
98. R.J. Schaeffer, F.S. Biancaniello, and R.D. Jiggetts: in The Metal Science of Joining, M.J. Cieslak, J.H. Perpezko, S. Kang, and M.E. Glicksman, eds., TMS-AIME, Warrendale, PA, 1992, pp. 175–81.
99. P. Villars and L.D. Calvert. Pearson's Handbook of Crystallographic Data for Intermetallic Phases, ASM, Metals Park OH, 1985, p. 2030.

ДОДАТОК А

СПИСОК ПУБЛІКАЦІЙ ЗДОБУВАЧА ЗА ТЕМОЮ ДИСЕРТАЦІЇ

Наукові праці, в яких опубліковані основні наукові результати дисертації:

Публікації у наукових фахових виданнях України, які входять до міжнародних наукометричних баз Scopus:

1. Bielykh D.G., Skoromnaya S.F., Tkachenko V.I. DIRECT

MARTENSITIC TRANSFORMATIONS OF LOW-CARBON STEELS.

Problems of Atomic Science and Technology. 2023. № 2. P. 37-41.

DOI:<https://doi.org/10.46813/2023-144-037> (Q3)

URL: [https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-](https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0.85158120960&doi=10.46813%2f2023-144037&partnerID=40&md5=aa7d274f5f05b37c4d7dace7f42a7c6a)

[s2.0.85158120960&doi=10.46813%2f2023-](https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0.85158120960&doi=10.46813%2f2023-144037&partnerID=40&md5=aa7d274f5f05b37c4d7dace7f42a7c6a)

[144037&partnerID=40&md5=aa7d274f5f05b37c4d7dace7f42a7c6a](https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0.85158120960&doi=10.46813%2f2023-144037&partnerID=40&md5=aa7d274f5f05b37c4d7dace7f42a7c6a)

Key words: martensite, austenite, phase transformations, carbon steels, phonon.

(Особистий внесок здобувача: здійснив оцифровку відомих експериментальних даних минулих досліджень; провів розрахунки для констант, що відповідають сталям; переніс отримані результати на графіки, що описують аналітичну модель, врахував ймовірність спонтанного переходу індукованих частинок, опрацював аналітичну модель, що використовується для опису ізотермічних прямих мартенситних перетворень маловуглецевої нікелевої сталі (Fe + 7%Cr + 2%Ni). Особистий внесок Skoromnaya S.F.: отримала систему рівнянь, що описує як атермічні, так і ізотермічні прямі мартенситні перетворення вуглецевих сталей, яка базується на моделі індукованих переходів квазічастинок між енергетичними рівнями; опрацювала аналітичну модель, що використовується для опису ізотермічних прямих мартенситних перетворень маловуглецевої марганцевої сталі (Fe + 0,7% C + 6,5% Mn)

Особистий внесок Tkachenko V.I.: порівняв отримані результати для

аналітичної моделі ПМП для нікелевої сталі ($Fe+7\%Cr+2\%Ni$) з результатами отриманими для марганцевої сталі ($Fe + 0,7\% C + 6,5\% Mn$))

2. Bielykh D.G, Skoromnaya S.F., Tkachenko V.I. MODIFIED STEFAN CONDITION IN STEFAN PROBLEM. Problems of Atomic Science and Technology. 2023. № 5. P. 21-26 DOI: <https://doi.org/10.46813/2023-147-021> (Q3)

URL: <https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-85174536940&doi=10.46813%2f2023-147-021&partnerID=40&md5=e9f09a32a293354796596e6da3a36e7f>

Key words: Stefan's problem, interphase boundary, diffusion, martensite, austenite, phase transformation.

(Особистий внесок здобувача: провів аналіз існуючих досліджень за темою вирішення задачі Стефана; запропонував новий метод формулювання граничної умови на рухомому кордоні; порівняв зміщення міжфазного кордону, що впливає зі стандартної задачі Стефана, з експериментальними даними; перевірів модифіковані умови Стефана з використанням експериментальних результатів щодо зміщення межі розділу Cu/Sn під час дифузійного з'єднання.

Особистий внесок Skoromnaya S.F.: методом інтегрування отримала модифіковану умову Стефана, що полягає в тому, що коефіцієнт дифузії фази множаться на похідну концентрації за протилежною координатою фази; отримала хорошу кількісну узгодженість між модельними та експериментальними наборами даних під час дифузійного з'єднання в результаті ізотермічного відпалу.

Особистий внесок Tkachenko V.I.: встановив протилежну кореляцію між зміщенням міжфазної межі, отриманого зі стандартної задачі Стефана, та експериментально розрахованими даними; зробив припущення, що в основі цих розбіжностей може лежати той факт, що були обрані експериментальні дані, при яких виключається дифузія

по межах зерен, а існує лише об'ємна дифузія, розгляду якої і присвячена запропонована модель)

Наукові праці, які засвідчують апробацію матеріалів дисертації:

3. Белих Д.Г., Скоромна С.Ф., Ткаченко В.І. Прямі мартенситні перетворення вуглецевих сталей // Вісник херсонського національного технічного університету №3 том 2, 2018 р., Херсон, 2018. С. 177-18

(Особистий внесок здобувача: здійснив оцифровку відомих експериментальних даних минулих досліджень; провів розрахунки для констант, що відповідають сталям; переніс отримані результати на графіки, що описують аналітичну модель, врахував ймовірність спонтанного переходу індукованих частинок, опрацював аналітичну модель, що використовується для опису ізотермічних прямих мартенситних перетворень маловуглецевої нікелевої сталі (Fe + 7%Cr + 2%Ni) в області низьких температур.

Особистий внесок Скоромної С.Ф.: отримала систему рівнянь, що описує як атермічні, так і ізотермічні прямі мартенситні перетворення вуглецевих сталей, яка базується на моделі індукованих переходів квазічастинок між енергетичними рівнями; опрацювали аналітичну модель, що використовується для опису ізотермічних прямих мартенситних перетворень маловуглецевої нікелевої сталі (Fe+7%Cr+2%Ni) в області високих температур.

Особистий внесок Ткаченка В.І.: розвинув методологічний підхід до опису атермічних та ізотермічних прямих мартенситних перетворень вуглецевих сталей, що ґрунтується на моделі індукованих переходів квазічастинок між енергетичними рівнями; запропонував подальше використання аналітичної моделі для інших сталей)

Онлайн сервіс створення та перевірки кваліфікованого та удосконаленого електронного підпису

ПРОТОКОЛ

створення та перевірки кваліфікованого та удосконаленого електронного підпису

Дата та час: 12:46:09 13.06.2024

Назва файлу з підписом: Bielykh_diss.pdf.asice

Розмір файлу з підписом: 1.7 МБ

Перевірені файли:

Назва файлу без підпису: Bielykh_diss.pdf

Розмір файлу без підпису: 2.0 МБ

Результат перевірки підпису: Підпис створено та перевірено успішно. Цілісність даних підтверджено

Підписувач: Белих Дмитро Геннадійович

П.І.Б.: Белих Дмитро Геннадійович

Країна: Україна

РНОКПП: 3574406715

Час підпису (підтверджено кваліфікованою позначкою часу для підпису від Надавача): 12:46:05 13.06.2024

Сертифікат виданий: "Дія". Кваліфікований надавач електронних довірчих послуг

Серійний номер: 382367105294AF97040000000AF30601900B7702

Тип носія особистого ключа: ЗНКІ криптомодуль ІІТ Гряда-301

Алгоритм підпису: ДСТУ 4145

Тип підпису: Кваліфікований

Тип контейнера: Підпис та дані в архіві (розширений) (ASiC-E)

Формат підпису: З повними даними ЦСК для перевірки (CAdES-X Long)

Сертифікат: Кваліфікований

Версія від: 2024.04.15 13:00