

*В.М. Фарбер¹, И.Ю. Пышминцев², А.Б. Арабей³, В.А. Хотинов¹,
Н.В. Лежнин¹, А.М. Мальцева²*

¹ Уральский федеральный университет

² Российский научно-исследовательский институт трубной промышленности

³ ОАО «Газпром»

МОДЕЛЬ ВОЗНИКНОВЕНИЯ И РОСТА РАСЩЕПЛЕНИЙ

Перечислим вытекающие из экспериментальных данных основные моменты, которые должны быть положены в основу модели возникновения и роста расщеплений. Это позволит объяснить их влияние на трещиностойкость сварных труб из малоуглеродистых низколегированных сталей с феррито-бейнитной (мартенситной) структурой.

Установлено [1 – 5], что образование расщеплений (РЩ) в высокочистых трубных сталях практически не связано с неметаллическими включениями, так как их количество на поверхности РЩ мало и они весьма дисперсны (~20 нм). Они возникают в листах, полученных контролируемой прокаткой с температурой окончания деформации ниже температуры рекристаллизации горячеплавленного аустенита или даже ниже A_{c3} , т.е. в двухфазной $\gamma + \alpha$ области. Эксперименты показали полное отсутствие расщеплений в образцах тех же сталей после повторной аустенитизации и неполной закалки на ту же структуру. Это свидетельствует, что низкотемпературная горячая деформация вносит в лист определенные дефекты на мезоуровне, которые трансформируются в очаговые трещины – расщепления, являющиеся также дефектами на мезоуровне, а впоследствии и на макроуровне.

В образцах, вырезанных из труб, расщепления возникают при всех видах механических испытаний: растяжении и ударном изгибе, испытании падающим грузом и на статическую трещиностойкость, а, главное, в стенке трубы после натурных (полигонных) испытаний [2, 6, 7]. Общим для таких испытаний с различными схемами и скоростями нагружения является то, что разрушение (зарождение и распространение магистральной трещины) происходит в области с трехмерным (объемным) напряженным состоянием, испытавшей интенсивную пластическую деформацию. Это характерно исключительно для высокопластичных сталей, у которых в окрестностях магистральной трещины возникает значительная по размеру и степени искажения кристаллической решетки (плотности дислокаций) пластическая зона [8, 9]. На поверхности изломов образцов тех же сталей, разрушившихся еще до достижения больших пластических деформаций, расщепления от-

сутствуют. Следовательно РЩ, как и другие очаговые трещины, возникают в объемно напряженной области, окружающей магистральную трещину, где возникает большая пластическая деформация и, соответственно, большой уровень напряжений, направленных против упругих напряжений, вызывающих распространение магистральной трещины.

Раскрытие трещин происходит под действием растягивающих упругих напряжений, перпендикулярных к плоскости ее распространения. Так как РЩ залегают близко параллельно поверхности листа и вытянуты вдоль направления прокатки, то за их возникновение ответственна растягивающая компонента напряжений σ_z , нормальная к поверхности листа (вдоль z -направления). Следовательно, наличие растягивающей компоненты σ_z в объемно напряженной области является одним из основных условий образования расщеплений (рис. 1, a).

В образце Шарпи такая область с максимальной σ_z формируется в середине волокнистой зоны L_b [1], в образце на растяжение – в центре имеющей эллипсоидное сечение шейки, где и возникают первые наиболее крупные расщепления. При этом σ_z должна превышать некоторую критическую величину ($\sigma_z > \sigma_z^{кр}$).

Образование трещины приводит к радикальному перераспределению упругих напряжений и их релаксации [8]. Поскольку РЩ – это в первую очередь «реакция» на действие σ_z , то возникновение РЩ приводит к глубокой релаксации этой компоненты поля напряжений (в определенной степени и других ее составляющих) и образованию релаксированной зоны вокруг каждой такой очаговой трещины (рис. 1, $b - e$). Чем больше РЩ, тем больше размер релаксационной зоны и более глубокое снятие упругих напряжений в ней. Можно ожидать, как показано на (рис. 1, b, e), контакта релаксированных зон и даже их перекрытия.

В результате при движении в направлении, перпендикулярном плоскости залегания РЩ, от середины (центра) излома образца Шарпи к периферии происходит осцилляция σ_z с постепенным ее угасанием к краю зоны L_b , граничащей с губами среза (рис. 1, e). В областях между расщеплениями, где σ_z приближается к

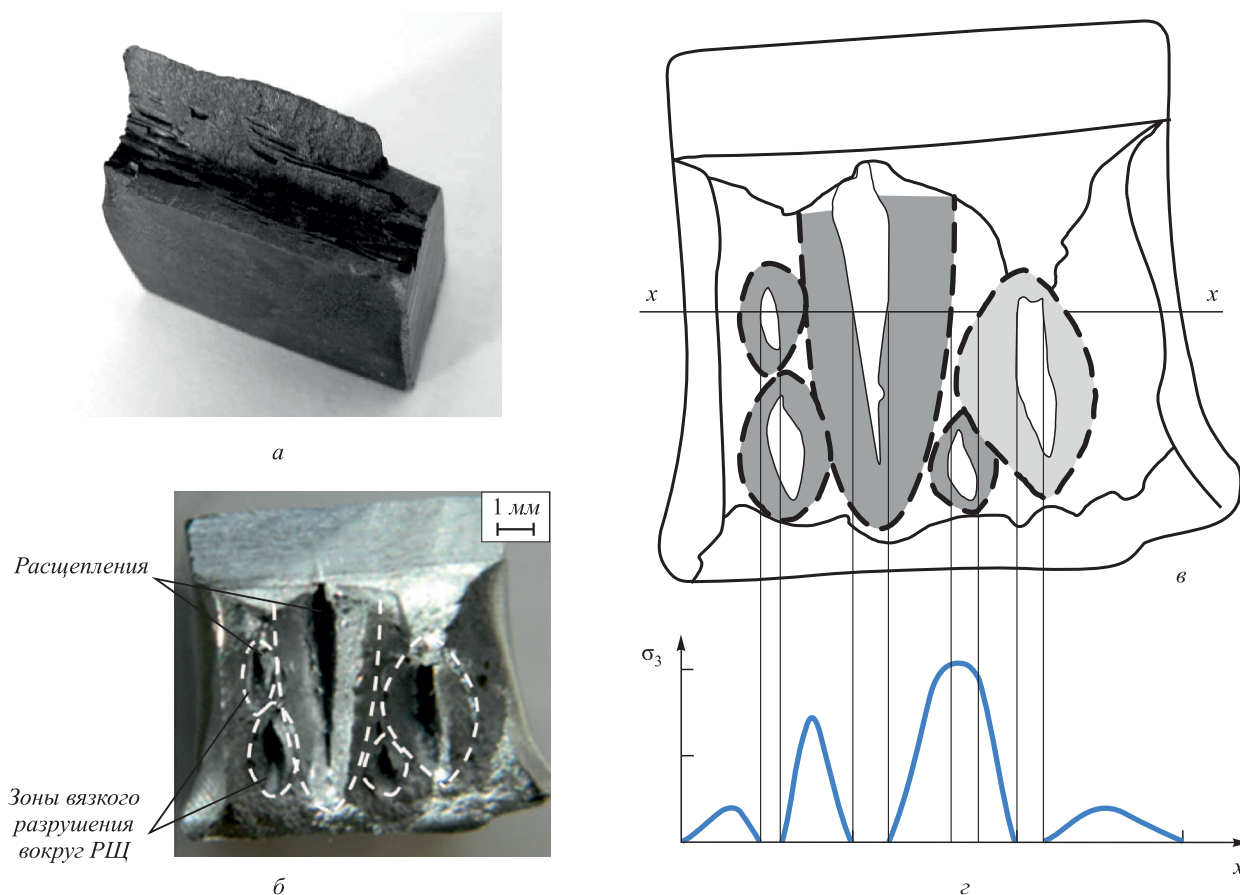


Рис. 1. Расщепления на поверхности разрушения:

a – в стенке трубы после полигонных испытаний (в уменьшенном масштабе); *б* – в образце Шарпи после испытаний на ударный изгиб; *в* – схема РЩ и зон релаксации компоненты σ_3 (вязкого разрушения) вокруг них; *г* – схема распределения компоненты напряжений σ_3 в сечении *x-x* образца Шарпи

нулю, формируется плосконапряженное состояние, характерное для зон, где наблюдается чашечный рельеф (губ среза, долома и др.). В этом плане РЩ способствует сохранению макровязкого разрушения металла.

С общих позиций можно выделить три основных механизма релаксации напряжений в нагруженном теле [10]:

- дислокационная релаксация (ДР), реализующаяся путем генерирования и движения решеточных дислокаций;

- дислокационно-границная релаксация (ДГрР), связанная с возникновением деформационных большеугловых границ (БУГр) при трансляционно-ротационном перемещении слоев в ходе интенсивной пластической деформации;

- трещинообразование, состоящее из зарождения и роста очаговых трещин и магистральной трещины.

При «включении» в ходе пластической деформации последующего механизма релаксации предыдущие механизмы продолжают развиваться. Они контролируют начало действия нового механизма, его интенсивность и масштаб.

Поскольку трещиностойкость – это способность материала сопротивляться возникновению и распростра-

нению трещин, то она определяется глубиной дислокационной и дислокационно-границной релаксаций. Так, вязкое разрушение сопровождается значительной пластической деформацией – продуктом ДР и ДГрР, протекающих как до момента образования трещин (предыстория материала), так и в процессе их возникновения и распространения.

Следовательно трещиностойкость, как и другие релаксационные процессы в металле, контролируется поведением дислокаций, которое будем характеризовать параметром маневренности дислокации (M_d). Величина M_d определяется напряжением трения (напряжением, необходимым для движения дислокации в бездефектном кристалле), легкостью переползания и поперечного скольжения, прочностью дислокационных узлов, т.е. факторами, определяющими подвижность дислокаций [11], а так же факторами упрочнения, препятствующими движению дислокаций: твердорастворное, дисперсионное, дислокационное [12] и, наконец, схемой напряженного состояния нагруженного тела или отдельных его частей [8].

Дислокации в феррите обладают высокой M_d , которая заметно возрастает при легировании стали большим количеством $\geq 1,5$ % (по массе) Mn [12], что

обеспечивает высокую пластичность (способность деформироваться без разрушения) рассматриваемых феррито-бейнитных (мартенситных) сталей. Охрупчивание сравнительно небольшим твердорастворным упрочнением, дозированным дислокационным упрочнением (преимущественно в бейнитных/мартенситных кристаллах) и дисперсионным твердением, связанным с выделением карбонитридов V–Nb и ε -фазы (чистой меди), перекрывается благоприятным влиянием сверхмелкого зерна. Измельчение зерна феррита – единственный среди упрочняющих факторов, который способствует повышению пластичности [13] и, следовательно, трещиностойкости, поскольку границы зерен, испуская или поглощая решеточные дислокации, способны релаксировать напряжения.

Трещинообразование, являющееся одним из релаксационных процессов, контролируется в первую очередь M_d , и грация сталей по трещиностойкости во многом определяется различием в них M_d через глубину проявления релаксационных процессов, так как снятие упругих напряжений уменьшает движущую силу возникновения и распространения трещин.

Через M_d трещиностойкость зависит от температуры и скорости деформации. Термическая активация помогает дислокациям преодолевать препятствия, а снижение температуры, как и увеличение скорости деформации, приводит к резкому подъему напряжения трения. Так, увеличение скорости на порядок эквивалентно понижению температуры на $\sim 15^\circ\text{C}$ [8]. В то же время испытание на ударную вязкость, при котором боек, падающий с высоты 2 м, разрушает стальной образец, является по существу статическим испытанием, поскольку в образце до наступления течения может пройти несколько упругих волн со скоростью распространения ~ 5000 м/с [8].

На поверхности вязкого излома можно выделить зоны преимущественного действия каждого из релаксационных механизмов. Это проявляется при нагружении с различными скоростями и любой схемой напряженного состояния, поскольку вязкий излом вскрывает структуру – итог релаксационных процессов, которая имеется в данной области материала в момент прохождения магистральной трещины. Уместно проиллюстрировать данное положение на примере поверхности разрушения образцов Шарпи, различные зоны которых обсуждались ранее [1].

В уникальной сдвиговой зоне L_c , формирующейся только в высоковязких сталях с максимально высокой M_d , возникает однородный вязкий рельеф в результате, очевидно, трансформации дислокационных ячеек (диаметром ~ 1 мкм) в ямки того же размера на поверхности излома. Крайне высокая M_d в этой зоне связана не только с природой металла – высокой подвижностью дислокаций в марганцовистом феррите, но и с проявлением плосконапряженного состояния [8, 9] (движение дислокаций происходит под действием касательных

напряжений $\tau = (\sigma_1 + \sigma_2)/2$, где σ_1 и σ_2 – нормальные напряжения), что, благодаря широкому масштабу дислокационной релаксации, требует максимально больших энергетических затрат на перемещение магистральной трещины.

Справедливость данных заключений можно подтвердить сопоставлением зоны L_c с зонами утяжки (λ) и долома (L_d), в которых поверхность разрушения имеет аналогичный характер. В зонах λ и L_d даже в сталях с низкой вязкостью, вследствие близости поверхности образца, всегда формируется плосконапряженное состояние и имеется высокая концентрация свободных вакансий, облегчающих переползание дислокаций и разрыв их узлов. Таким образом, в зонах λ и L_d имеет место большой масштаб дислокационной релаксации из-за высокой M_d , но это обусловлено действием инструментальных факторов, а не свойствами кристаллической решетки металла.

С понижением температуры испытания $T_{\text{исп}}$ (снижением M_d) размер зоны L_c уменьшается [1]. По мере продвижения магистральной трещины в зоне L_c происходит постепенное возрастание плотности дислокаций (степени деформации) в окружающей ее пластической области. Это приводит к повышению внутренних напряжений в разрушающемся теле, так как дислокационная релаксация, как кинетический процесс, все больше отстает от роста напряжений от приложенной нагрузки. При этом M_d постепенно падает: дислокациям все более сложно перемещаться в условиях повышающихся плотности дислокаций и внутренних напряжений. Начиная с определенного момента (сочетания критических значений M_d и внутренних напряжений), зона L_c сменяется волокнистой зоной L_b . В изученных трубных сталях в высоковязком состоянии ($KCV \approx 350$ Дж/см²) наибольший размер L_c/B (B – толщина образца в месте надреза) составляет 45 %, а уменьшение величины L_c/B пропорционально снижению уровня KCV [16].

Можно полагать существование связи между волокнистым строением излома и полосовой структурой, образующейся в листах при слоевом течении металла в ходе интенсивной пластической деформации. В такой структуре полосы деформации, сброса, как и переходные полосы, разделены большеугловыми границами (БУГр) деформационного происхождения (рис. 2), которые, вероятно, становятся поверхностями раздела волокон в изломе. Возникновение БУГр (дисклиний), являющихся мощными концентраторами напряжений [11, 14], радикально меняет напряженное состояние от плоского к объемному благодаря появлению поперечной компоненты (σ_z), перпендикулярной к плоскости залегания БУГр (поверхности листа). Теперь пластическое течение металла реализуется не только путем движения решеточных дислокаций, но и трансляционно-ротационным смещением слоев по БУГр при перемещении в них зернограницных дислокаций [11, 14]. Дислокационный механизм релаксации напряжений

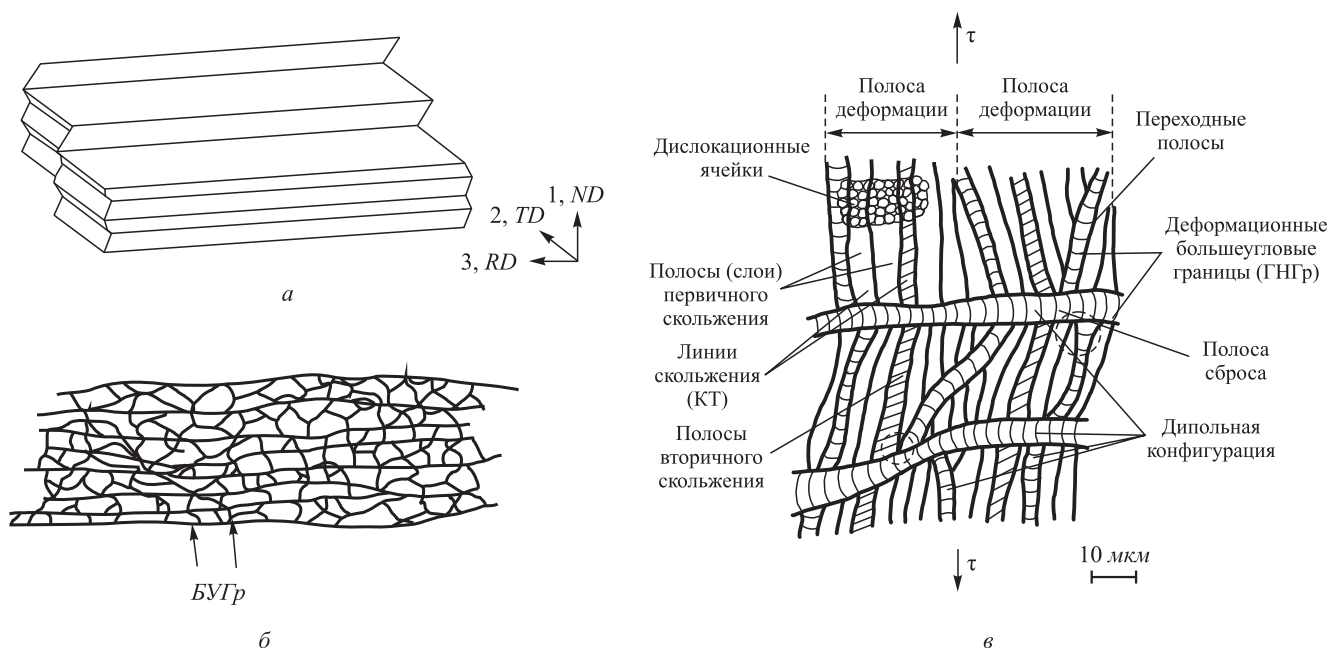


Рис. 2 Схема полосовой структуры в интенсивно деформированном металле:
а – [19], б – [20], в – [15]

меняется на более эффективный дислокационно-границный, скорость и масштаб действия которого также, как и дислокационного, ограничен кинетическими параметрами [10].

Дислокационно-границный механизм релаксации благодаря высокой подвижности зернограницных дислокаций обеспечивает вязкое разрушение конструкционных сталей и, как таковой, не может отвечать за появление расщеплений в волокнистой зоне излома металла сварных труб. Об этом же свидетельствует отсутствие расщеплений в образцах, вырезанных из тех же труб и имеющих подобную феррито-бейнитную (мартенситную) структуру после повторной аустенитизации и закалки.

Следовательно, причина появления расщеплений в стенке труб, разрушенных при натурных испытаниях, а так же в вырезанных из них образцах после испытаний

механических свойств по различным методикам состоит в особенностях структуры, сформированной в стали в результате контролируемой прокатки листа и ускоренного охлаждения.

Окончание горячей деформации листа при температуре ниже температуры рекристаллизации аустенита приводит к формированию вытянутых вдоль направления прокатки полос из зерен феррита, бейнита (мартенсита), разделенных границами бывших аустенитных зерен и/или большеугловыми границами деформационного происхождения ($\uparrow$ на рис. 3). При охлаждении горячекатаного листа со скоростью $V_{\text{охл}} \approx 20^\circ\text{C}/\text{с}$ в интервале температур $600 - 400^\circ\text{C}$ в объеме зерна успевают выделиться частицы карбонитридов V–Nb и ϵ -фазы (если сталь легирована медью) [16]. Несомненно, в диапазоне более высоких температур ($600 - 700^\circ\text{C}$) частицы тех же фаз выделяются по большеугловым границам [17].

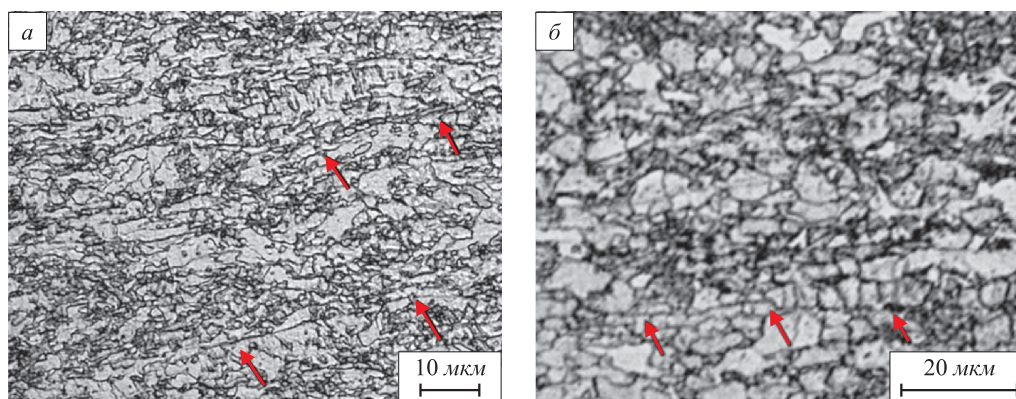


Рис. 3. Микроструктура основного металла трубы из стали типа 07Г2СБТД ($\uparrow$ – протяженные границы, ориентированные вдоль направления прокатки листа)

Следовательно, в изученных сталях в состоянии трубы границы бывших аустенитных зерен и БУГр деформационного происхождения декорированы выделениями дисперсных фаз и атомами углерода (азота), которые не успели выделиться при ускоренном охлаждении листа. При слоевом пластическом течении металла в ходе распространения магистральной трещины в зоне L_b исходные («старые») БУГр, в которых закрепленные зернограницные дислокации (ЗГД) неподвижны, не способны к глубокой релаксации напряжений. Они становятся концентраторами напряжений значительно более мощными, чем новые БУГр, возникающие в пластической области магистральной трещины, так как вследствие неподвижности в них ЗГД не способны трансформировать поступающие в них решеточные дислокации. Переполнение «старых» БУГр решеточными дислокациями приводит, благодаря разрыву многих межатомных связей, к их ослаблению, и под действием растягивающей компоненты σ_3 , перпендикулярной к плоскости залегания границ (поверхности листа), они расщепляются.

Анализ расположения расщеплений и их эволюции показывает, что первые зародышевые трещины (зародыши РЩ) размером ≥ 1 мкм имеют округлую или эллипсовидную форму и сглаженные концы, что свидетельствует о значительной диффузионной компоненте механизма их возникновения (рис. 4, а). Они располагаются в виде строчек на поверхности волокон и растут в длину путем разрыва перемычек (вероятно, со значительной компонентой отрыва) вдоль исходного «старого» БУГр при стоке (оттоке) на эти участки из окружающих объемов решеточных дислокаций. Это обуславливает рост расщепления в глубину и ширину, постепенное превращение в очаговые трещины с острыми вершинами и сильную пластическую деформацию в его окрестностях (дислокационную релаксацию напряжений). Сильная пластическая деформация металла, окружающего РЩ, проявляется в виде искривления слоев, примыкающих к его боковым поверхностям (рис. 4, б). Поверхности раздела слоев, обогащенных бейнитом (мартенситом) или ферритом, являются предпочтительными местами для роста РЩ (рис. 4, б), поскольку из-за несовместимости их течения здесь концентрируются наибольшие напряжения. Очевидно, такой быстрый рост РЩ в сталях с неоднородным распределением упрочняющей фазы в виде отдельных слоев является основной причиной их пониженной трещиностойкости.

Установлено [5], что участки стенок РЩ, примыкающие к поверхности излома, имеют вязкий (чашечный) рельеф, тогда как вблизи дна стенки РЩ имеют хрупкий излом. Так проявляется неразрывная связь всех механизмов релаксации напряжений: дислокационного, дислокационно-границного и трещинообразования.

Возникновение в окрестностях РЩ областей вязкого разрушения способствует сохранению до более низких

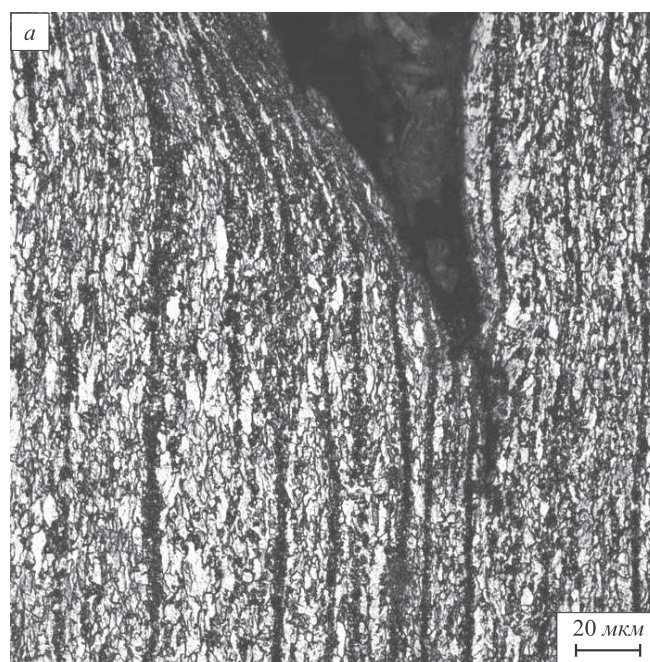
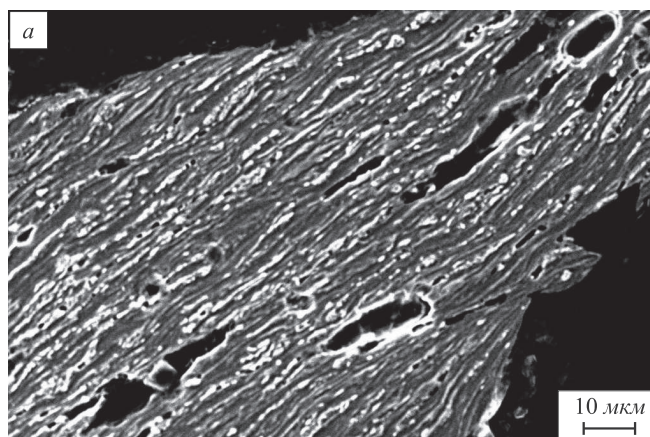


Рис. 4. Микроструктура основного металла вблизи поверхности разрушения стенки трубы из стали 06Г2МБ:
а – растровая электронная микроскопия; б – металлография

температур испытания макровязкого излома металла. Однако уровень KCV падает из-за необходимости меньших энергетических затрат на продвижение магистральной трещины, когда она соприкасается с расщеплением и пластической областью вокруг него. Это видно по скачкам падения нагрузки на диаграммах разрушения по методу статической трещиностойкости [4].

Размер пластических областей, окружающих РЩ, как и все их морфологические характеристики, определяется совокупным действием M_d и эффективных напряжений $\sigma_{эф}$, являющихся суммой внешних напряжений, приложенных к телу, и внутренних, связанных с дислокационными построениями и границами различного происхождения. Маневренность дислокаций M_d через скорость и глубину релаксационных процессов задает уровень действующих напряжений и во многом схему локального напряженного состояния. Так, при максимальных значениях этих параметров (σ_3^{max} в цент-

ре зоны L_b , $M_d^{\max}$ при относительно высокой $T_{\text{исп}}$) расщепления имеют наибольшие размеры: длину во всю зону L_b , ширину до 2 мм [16]. В боковых участках зоны L_b , где уровень σ_3 сравнительно небольшой, возникают лишь несколько мелких и коротких расщеплений.

Таким образом, происхождение расщеплений обусловлено предысторией металла трубы – контролируемой прокаткой листа с ускоренным охлаждением. Когда последние проходы при горячей деформации проводятся при пониженных температурах, особенно в двухфазной ($\alpha + \gamma$) области, в металле происходит формирование текстуры с преобладанием компоненты $\{001\} \langle 110 \rangle$ [5, 6, 18]. Преимущественная ориентировка плоскостей скола $\{001\}$ параллельно оси прокатки способствует, по мнению ряда исследователей, образованию расщеплений, однако такая трактовка не раскрывает ни механизма образования РЩ, ни их свойства. Разработка представления о возникновении расщеплений в результате раскрытия БУГр, унаследованных в структуре листа от низкотемпературной горячей деформации, позволяет детализировать картину, причем текстура и БУГр имеют общее происхождение – слоевое течение металла при интенсивной пластической деформации.

В работах [19, 20] экспериментально и теоретически обосновано, что формирование в металлах при пластической деформации текстуры и ее отдельных компонент связано с преимущественной ориентацией в ходе слоевого течения полос деформации, разделенных БУГр (см. рис. 2, 3). Интенсивность этих явлений нарастает (острота компонентов текстуры, протяженность БУГр и угол разориентировки на них) при снижении температуры деформации и увеличении ее степени. Тогда, исходя из предложенной выше модели вытекает, что текстура влияет на образование РЩ косвенно через возникновение БУГр, разделяющих полосы деформации.

Таким образом, ценность любой модели состоит не только в объяснении известных экспериментальных данных, но и в выработке на ее основе рекомендаций по интенсификации или, наоборот, минимизации действия рассматриваемого явления. Так, среди вышеупомянутых моментов о происхождении расщеплений, особую значимость в потере трещиностойкости имеют возникновение БУГр при контролируемой прокатке листа и закрепление их (зернограницных дислокаций) дисперсными частицами карбонитридов и ϵ -фазы в процессе охлаждения после горячей деформации.

Следовательно, повышение температуры конца прокатки вплоть до самых начальных стадий рекристаллизации горяченаклепанного аустенита, понижение содержания ванадия в стали и даже полное его исключение, как и увеличение скорости последеформационного охлаждения свыше 20 °C/с благоприятствуют возрастанию трещиностойкости. Видимо, к таким режимам, судя по составу и структуре трубы, многие производители листа пришли эмпирически.

Выводы. Предложена модель формирования расщеплений в трубах (листах) из сталей категории прочности X80 (K65): образование расщеплений происходит при раскрытии большеугловых границ, закрепленных выделениями вторых фаз, которые формируются в деформированном аустените в результате контролируемой прокатки и ускоренного охлаждения.

Релаксация поперечных напряжений в окрестностях расщеплений обуславливает в этих микрообъемах чисто вязкое разрушение при общем понижении энергии распространения трещины при разрушении нагруженного образца (стенки трубы).

Исходя из разработанной модели, для уменьшения масштаба проявления расщеплений рекомендуется:

- повышение температуры конца прокатки до самых начальных стадий рекристаллизации горяченаклепанного аустенита;
- увеличение скорости последеформационного охлаждения;
- понижение в стали содержания ванадия, вплоть до его полного исключения, так как выделения карбидов на его основе по границам, сформированным в ходе безрекристаллизационной контролируемой прокатки, способствуют образованию по ним зародышей расщеплений.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Фарбер В.М., Хотинков В.А., Арабей А.Б. и др. Фрактографическая диагностика трещино-стойкости труб группы прочности X80 (K65) по результатам испытаний ударной вязкости // Тр. XVIII Межд. науч.-техн. конф. «Трубы-2010»: Сб. докл. – Челябинск: РосНИТИ, 2010. С. 108 – 116.
2. Manucci G., Demofonti G. Control of ductile fracture propagation in X80 gas linepipe // Int. Pipeline Technology Conf.: thesis proceedings. Beijing, 2010. P. 86 – 115.
3. Орлов В.В., Ильин А.В., Хлусова Е.И. и др. Влияние структурной неоднородности на механические свойства и характеристики работоспособности высокопрочных трубных сталей класса прочности X70-X100 // Тр. XVIII Межд. науч.-техн. конф. «Трубы-2010»: Сб. докл. – Челябинск: РосНИТИ, 2010. С. 67 – 77.
4. Насыбулина Е.Р., Струин А.О., Широков В.В. К вопросу определения трещиностойкости современных трубных сталей класса прочности K65 // Тр. XVIII Межд. науч.-техн. конф. «Трубы-2010»: Сб. докл. Челябинск: РосНИТИ, 2010. С. 122 – 126.
5. Счастливцев В.М., Табатчикова Т.И., Яковлева И.Л., Терещенко Н.А. Эффект повышения ударной вязкости при формировании слоистой структуры в трубных сталях // Тр. науч.-техн. конф. «Проблемы и перспективы развития металлургии и машиностроения с использованием завершённых фундаментальных исследований и НИОКР»: Сб. докл. Т. 2. – Екатеринбург: УрОРАН. 2011. С. 331 – 333.
6. Арабей А.Б., Пышминцев И.Ю., Штрель М.А. и др. // Изв. вуз. Черная металлургия. 2009. № 9 С. 9 – 15.
7. Русакова В.В., Лобанова Т.П., Арабей А.Б. и др. // Наука и техника в газовой промышленности. 2009. № 1. С. 17 – 21.
8. Макклиток Ф., Аргон А. Деформация и разрушение металлов. – М.: Мир, 1970. – 443 с.
9. Ботвина Л.Р. Разрушение: кинетика, механизмы, общие закономерности – М.: Наука, 2008. – 334 с.

10. Фарбер В.М., Селиванова О.В. // Металлы. 2001. № 1. С. 110 – 115.
11. Штремель М.А. Прочность сплавов: Ч. 1. Дефекты решетки. – М.: МИСИС, 1999. – 384 с.
12. Гольдштейн М.И., Литвинов В.С., Бронфин Б.М. Металлофизика высокопрочных сплавов – М.: Металлургия, 1986. – 311 с.
13. Пышминцев И.Ю., Пумпянский Д.А., Фарбер В.М. // Металлы. 2007. № 11. С. 20 – 27.
14. Панин В.Е. и др Физическая мезомеханика и компьютерное конструирование материалов. Т. 1 – Новосибирск: Наука, 1995. – 298 с.
15. Фарбер В.М. Селиванова О.В. Структурные механизмы релаксации напряжений при холодной пластической деформации: Сб. научн. трудов «Проблемы нанокристаллических материалов». – Екатеринбург: УрОРАН, 2002. С. 207 – 223.
16. Фарбер В.М., Арабей А.Б., Пышминцев И.Ю. и др. // Производство проката. 2011. № 11. С. 14 – 21.
17. Гольдштейн М.И., Фарбер В.М. Дисперсное упрочнение стали. – М.: Металлургия, 1979. – 208 с.
18. Hara T., Shinohara Y., Asohi H., Terada Y. Effects of microstructure and texture on DWTT properties for high strength line pipe steels// 6th International Pipeline Conference. 2006. P. 1025.
19. Hughes D.A., Hansen N. // Acta mater. 1997. Vol. 45. No 9. P. 3871 – 3886.
20. Kuhlmann-Wilsdorf D. // Acta mater. 1999. Vol. 47. No 6. P. 1697 – 1712.

© 2012 г. В.М. Фарбер, И.Ю. Пышминцев, А.Б. Арабей,
В.А. Хошинов, Н.В. Лежнин, А.М. Мальцева
Поступила 10 января 2012 г.

УДК 536.7:541.6:669.1

И.И. Гулять, М.М. Леменёв

Московский государственный открытый университет имени В.С. Черномырдина

ИХТ-МОДЕЛЬ ДЛЯ ОПИСАНИЯ ПОЛОЖИТЕЛЬНЫХ ОТКЛОНЕНИЙ ОТ ИДЕАЛЬНОСТИ

В предыдущих работах [1 – 3] была показана высокая эффективность применения модели ИХТ («Идеальная Химическая Теория») для описания термодинамических свойств бинарных металлических расплавов с отрицательными и знакопеременными отклонениями от идеальности. Предмет настоящего исследования – анализ возможности применения ИХТ-модели для описания положительных отклонений от идеальности в бинарных металлических расплавах, сохраняя основные положения и математический аппарат ИХТ, изначально созданные для описания только отрицательных отклонений от идеальности. Это особенно важно для единого описания тройных и многокомпонентных систем на основе двойных со всеми видами отклонений от идеальности.

Описание особенностей модели с процедурой «обращения». В работе [1] было показано, что расчет величин z (z – молярная доля мономера – основа для расчетов по ИХТ) для систем с положительными отклонениями от идеальности приводит к исходно неприемлемому результату: $\sum z_i$ оказывается больше единицы. Выходом из этой ситуации является математическая процедура «обращения» системы, которая для расчета превращается в систему с отрицательными отклонениями от идеальности.

Процедура «обращения» состоит в том, в расчете используются вместо исходных экспериментальных величин коэффициента активности $\gamma_{\text{экс}}$ (все значения которых в системах с положительными отклонениями от идеальности равны или больше единицы) ве-

личины «обращенного коэффициента активности» $(\gamma_{\text{экс}})^{\text{обр}} = 1/\gamma_{\text{экс}}$. Естественно, что все $(\gamma_{\text{экс}})^{\text{обр}}$ тогда будут меньше (или равны) единицы и, следовательно, выполняется требуемое условие: $\sum z_i = 1$.

Вся остальная схема расчета по модели ИХТ, очень подробно рассмотренная в работе [1], остается без изменения. Кратко опишем ее по ступеням применительно к разбираемому варианту – расчету с «обращенными» экспериментальными данными, т.е. с величинами $(\gamma_{\text{экс}})^{\text{обр}}$.

Ступень I. «Обращение» экспериментальных величин коэффициентов активности компонентов системы $A-B$:

$$(\gamma_{\text{экс}})^{\text{обр}}_A = 1/(\gamma_{\text{экс}})_A; \quad (\gamma_{\text{экс}})^{\text{обр}}_B = 1/(\gamma_{\text{экс}})_B. \quad (1)$$

Ступень II. Определение величины экспериментальной «обращенной молярной доли мономера» $(z_{\text{экс}})^{\text{обр}}_i$ для соответствующей x_i (x_i – атомная доля компонента i). Напомним, что коэффициенты активности мономеров, α_i , равны единице [1], поэтому

$$(z_{\text{экс}})^{\text{обр}}_A = x_A (\gamma_{\text{экс}})^{\text{обр}}_A; \quad (z_{\text{экс}})^{\text{обр}}_B = x_B (\gamma_{\text{экс}})^{\text{обр}}_B. \quad (2)$$

Ступень III. Подбор набора соединений, обеспечивающий математически адекватное описание термодинамических свойств системы. Для простоты в данном случае ограничимся одним – « $A_s B_q$ ». Формула соединения взята в кавычки, поскольку это гипотетическое, расчетное соединение, ибо практически все системы с положительными отклонениями от идеальности –