

Д.Н. Тогобицкая, В.П. Пиптиюк, И.Н. Логозинский, Б.А. Левин,  
А.С. Козачёк, О.В. Кукса, Ю.М. Лихачёв

**СИСТЕМНЫЙ ПОДХОД К ВЫБОРУ ОПТИМАЛЬНОГО  
ЭЛЕМЕНТНОГО СОСТАВА СТАЛИ,  
ОБЕСПЕЧИВАЮЩЕГО ТРЕБУЕМЫЙ УРОВЕНЬ  
МЕХАНИЧЕСКИХ СВОЙСТВ**

*Аннотация. На примере стали марки 14Х17Н2 показана методика определения оптимального элементного состава с использованием параметров межатомного взаимодействия. Получены закономерности, позволяющие выполнить оценку влияния примесно-микролегирующей подсистемы на механические свойства стали и внести соответствующие корректировки за счет элементов матричной подсистемы и изменения режима термообработки.*

*Ключевые слова: состав, свойства, параметры межатомного взаимодействия, прогнозирование.*

**Введение.** В последнее время в литературе все больше обсуждаются возможности и целесообразность замены стали другими конструктивными материалами – алюминий, сплавы, керамика, пластмассы, различные композиты и др. Подводя итоги 2014 г., президент НАН Украины Б.Е. Патон, в числе важнейших фундаментальных исследований, имеющих мировой уровень в области материаловедения, отметил успехи в создании материалов принципиально нового класса – высокоэнтропийных сплавов, имеющих уникальную высокотемпературную прочность, недосягаемую для обычных сталей и сплавов, что позволяет ожидать создание нового поколения жаропрочных и жаростойких материалов для турбинных лопаток, сварочных материалов и др.

В то же время авторы работы «Сталь и альтернативные материалы: анализ и прогноз» [1,2], рассматривая проблемы замены стали альтернативными материалами в обозримом периоде, приходят к вы-

воду – экономически оправданной заменой обычной стали является только один материал – сталь более высокого качества.

Способы воздействия на процессы структурообразования стали и сплавов непрерывно совершенствуются, и их роль в комплексном подходе к решению проблемы только возрастает. Однако определение оптимального химического состава и запрограммированных в нем потенциальных возможностей сталей и сплавов, как конструкционных материалов, было и остается актуальной задачей.

**Результаты исследований.** В настоящей работе на примере стали 14Х17Н2 описан подход к комплексному решению задач оптимизации химического состава сталей, который базируется на накопленном в ИЧМ НАНУ опыте моделирования структуры и свойств металлических расплавов [3]. Реализация выполнена совместно со специалистами ПАО «Днепропретсталль» (г. Запорожье) в реальных промышленных условиях в рамках стратегии развития информационно-математического обеспечения системы контроля и управления качеством продукции. Соблюдение четких правил паспортизации данных, включающей всю полноту информации без каких-либо предварительных обработок и «сглаживаний», а также наличие прикладного сервиса обработки данных (средства прикладной статистики, сервис разнопланового проектирования данных и поиск скрытых закономерностей) позволяют выполнить многоплановый поиск и анализ данных [4].

Систематизация полученной информации позволяет реализовать по принципу «матрешки» последовательный анализ технологии и производимого сортамента для каждого из цехов.

Механические свойства металлопродукции и химический состав стали обычно имеют широкую колеблемость, зашумленность и зачастую неполноту данных. В связи с этим принята концепция оценки достоверности данных путем поэтапного анализа исходной информации путем внутренней согласованности данных.

В соответствии с ГОСТом 5632-72 на сталь 14Х17Н2 регламентирован следующий химический состав С,% - 0,11-0,17; Si,% <0,8; Mn,% <0,8; Cr,% 16,0-18,0; Ni,% 1,5-2,5; S,% ≤0,025; P,% ≤0,03. Фактические значения механических характеристик от общего объема производимой продукции из этой стали за 2009-2014г.г. варьируются в пределах:  $\sigma_b$  ( кгс/мм<sup>2</sup>) - (111-125; 92 % значений),  $\sigma_t$

( $\text{кгс}/\text{мм}^2$ ) - (86-104; 95 %),  $\delta$  (%) - (14 -24; 99 %),  $\psi$  (%) - (48-67; 95 %),  $\text{KCU}$  ( $\text{кгс м}/\text{см}^2$ ) – (5-11; 80%).

В соответствии с разработанной Э.В. Приходько концепцией направленной химической связи [3] основными параметрами, характеризующими элементарные процессы формирования состава, структуры и свойств расплавов и продуктов кристаллизации являются:  $Z^Y$  (e) – параметр межатомного взаимодействия для данного химического состава, характеризующий зарядовое состояние системы:  $d$  ( $10^{-1}\text{нм}$ ) – параметр структурного состояния,  $tga$ - параметр, который характеризует изменение электронной плотности атомов в зависимости от радиуса. Для расчета интегральных и парциальных параметров, характеризующих межатомное взаимодействие в расплаве как единой физико-химической системы, использован алгоритм и соответствующее программное обеспечение информационно-аналитической системы “Металл”[4].

Кодировка в модельных терминах информации о составе растворов и расплавов и существующих в них фазах обеспечивает:

- а) комплексный учет характеристик межатомного взаимодействия между всеми реальными и гипотетическими парами атомов;
- б) свертку информации о составе многокомпонентных материалов, что позволяет понизить размерность и повысить точность описательных моделей, связывающих их состав и свойства (табл. 1, 2).

На примере круга диаметром заготовки 158 мм показано влияние зарядового  $Z^Y$  и структурных параметров  $d$  и  $tga$ , характеризующих изменение электронной плотности атомов в зависимости от радиуса, на ударную вязкость и предел прочности соответственно (рис.1).

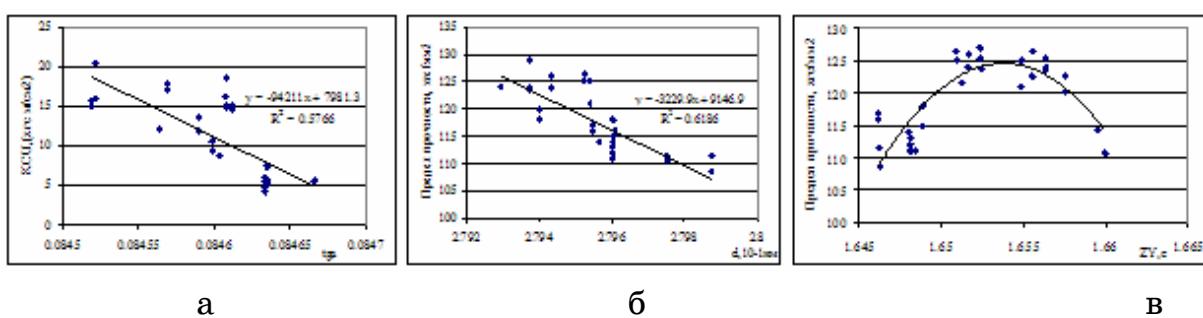


Рисунок 1 Зависимость механических свойств металлопродукции из стали марки 14Х17Н2 от параметров межатомного взаимодействия для круга диаметром 158 (ТО 3.1020°C-40'm.O.350°C -1ч. воздух)

Для анализа влияния элементного состава следствий локализации процессов, результатом которых является формирование структуры и свойств стали, нами используется подход разделения общего состава на подсистемы [5]: общую, матричную, легирующую, микролегирующую и примесную. Основанием для отнесения элементов к той или иной подсистеме являются предварительные результаты анализа как корреляционной матрицы, так и факторного анализа. Выбор оптимальных соотношений элементов матричной [C, Mn, Si] и легирующей [Cr, Ni] подсистем осуществляется на основе метода многокритериальной оптимизации путем построения соответствующих картограмм в заданных координатных сечениях.

Таблица 1

Выборочный химический состав стали марки 14Х17Н2

№	C, %	Mn, %	Si, %	P, %	S, %	Cr, %	Ni, %
1	0,13	0,35	0,28	0,027	0,006	17,06	1,57
2	0,13	0,34	0,32	0,03	0,014	17,18	1,53
3	0,13	0,29	0,3	0,027	0,012	17,29	1,53
4	0,12	0,33	0,32	0,03	0,018	17,31	1,67
5	0,12	0,45	0,37	0,03	0,005	17,42	1,54

W-(0,02-0,25);V(0,02/0,08) ;Mo(0,04/0,21);Nb(0,010/0,026)

Таблица 2

Интегральные параметры и механические свойства  
стали выборочных плавок

№	$Z^Y, e$	$d, \text{нм}^{-10}$	$tga$	$Z^Y_{(W,V,Nb, Mo), e}$	$d_{(W,V,Nb, Mo), 10}$	$\sigma_b, \text{кгс}/\text{мм}^2$	$\sigma_t, \text{кгс}/\text{мм}^2$	$\delta, \%$	$\Psi, \%$	KCU, $\text{кгс}/\text{мм}^2$
1	1,647	2,795	0,0846	2,717	3,107	115	90	19	60	6,2
2	1,650	2,795	0,0845	2,614	3,088	113,0	88	20	64,0	8,6
3	1,651	2,794	0,0845	2,724	3,104	116,0	91	18	61,5	7,3
4	1,655	2,796	0,0846	2,672	3,097	118,0	93	23	64,0	10,5
5	1,658	2,795	0,0845	2,727	3,102	114,0	89	20	64,0	10,3

Как следует из картограмм (рис.2), в областях ограничений (заштрихованных) обеспечивается следующий уровень свойств: предел прочности – 119-123 ( $\text{кгс}/\text{мм}^2$ ), предел текучести -89-97 ( $\text{кгс}/\text{мм}^2$ ), ударная вязкость -8-14 ( $\text{кгс м}/\text{см}^2$ ), относительное удлинение (%) – 20-23, относительное сужение (%) -61-67.

Таким образом, решение задачи оптимизации потребительских свойств стали сводится к обеспечению заданного сочетания модельных параметров для разных подсистем ее химического состава.

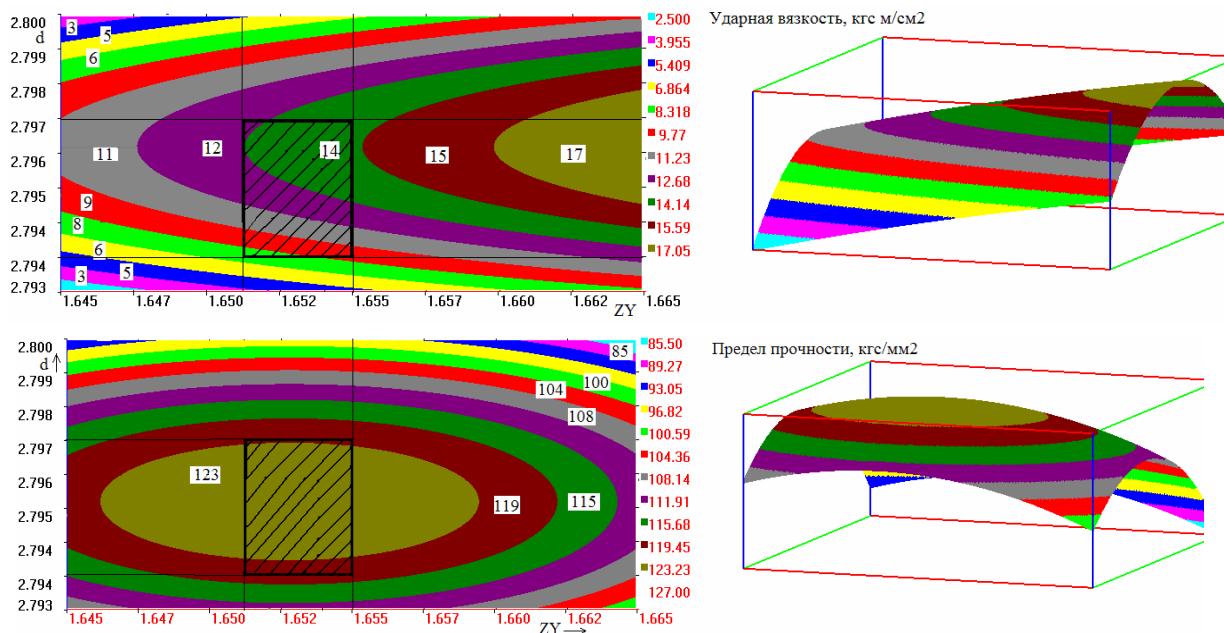


Рисунок 2 - Зависимость механических свойств металлопродукции из стали 14Х17Н2 для сортамента 20-78 мм диаметром, от параметров межатомного взаимодействия  $Z^Y$  (e) зарядового и структурного  $d(10^{-1}\text{нм})$  состояния

Учитывая высокую информативность интегральных параметров примесно-микролегирующей подсистемы зарядового и структурного состояния [ $r_{xy} \geq -0,6$ ], особое внимание уделено исследованию влияния именно этой подсистемы (табл.3). На рисунке 3 показано влияние параметра зарядового состояния этой подсистемы на ударную вязкость. Чем меньше значения  $Z^Y_{(W,V,Nb,Mo)}$ , тем выше показатели ударной вязкости и прочностных свойств.

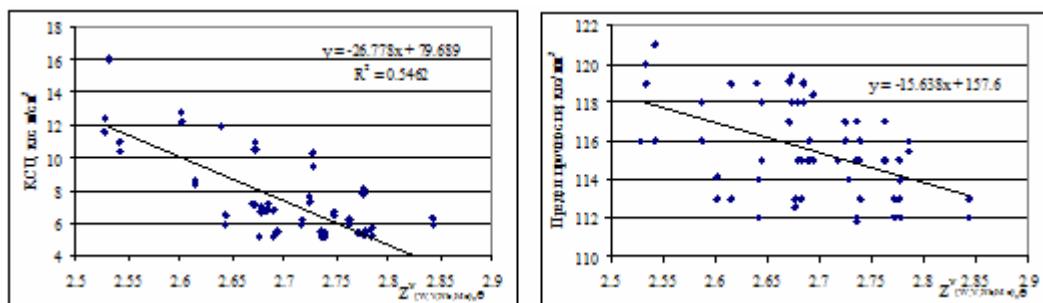


Рисунок 3 – Взаимосвязь параметра зарядового состояния для подсистемы [W,V,Nb,Mo] на ударную вязкость и предел прочности для стали 14Х17Н2, 3.1020°C-40'm.O.350°C -1ч. воздух для круга диаметром 46мм

Таблица 3

Парные связи механических свойств стали 14Х17Н2 с химическим составом и параметрами межатомного взаимодействия

	$\sigma_b$	$\sigma_t$	$\delta$	$\psi$	KCU
W	-0.24	-0.23	-0.18	<b>-0.45</b>	<b>-0.42</b>
V	-0.24	-0.23	0.05	-0.20	-0.08
Mo	-0.20	-0.20	-0.06	-0.25	-0.33
Nb	-0.26	-0.26	0.04	<b>-0.44</b>	<b>-0.49</b>
$Z^Y_{(W,V,Nb,Mo)}$	-0.14	-0.14	-0.16	<b>-0.6</b>	<b>-0.66</b>
$d_{(W,V,Nb,Mo)}$	-0.18	-0.18	-0.11	<b>-0.41</b>	<b>-0.63</b>
$tg_{(W,V,Nb,Mo)}$	-0.018	-0.014	0.23	0.25	<b>0.46</b>

Компенсировать вредное влияние примесно-микролегирующей подсистемы можно при помощи корректировки элементов матричной подсистемы, а также режима термообработки, (рис.4). Такой подход нами использован применительно к сталям марок S355G2, 16MnCrS5, S235G производства РУП «БМЗ»[6,7].

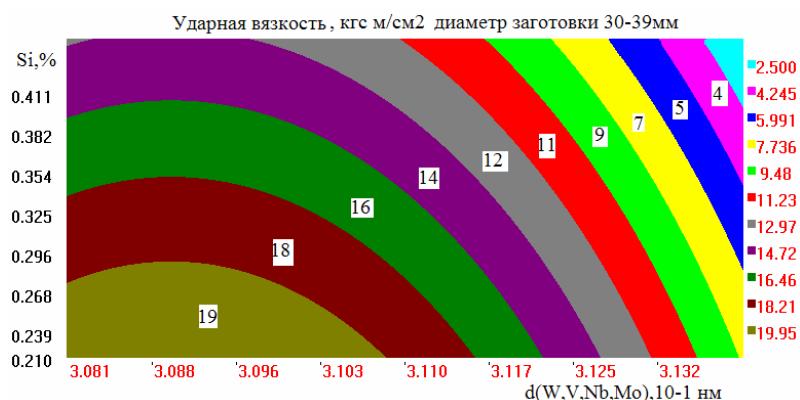


Рисунок 4 - Влияние примесно-микролегирующей подсистемы (W,V,Nb,Mo) и содержания кремния на изменение механических свойств металлопродукции из стали 14Х17Н2 (числа на изолиниях значения KCU)

**Выводы.** 1. На примере состава стали 14Х17Н2 показана методика «свертки» химического состава стали, как единой физико-химической системы, позволяющая учитывать как свойства отдельных элементов, так и результаты их взаимодействия и научно обосновать рациональные пределы изменения элементного состава в пределах марки.

2. На основе физико-химической модели структуризации расплава выявлена роль примесно-микролегирующей подсистемы в формировании механических свойств стали. Получены закономерности, позволяющие выполнить оценку степени ее влияния на механические свойства стали и внести соответствующие корректизы за счет элементов матричной подсистемы и изменения режима термообработки.

## ЛИТЕРАТУРА

1. Г.Г.Ефименко, И.Г. Михеева, В.Н. Нещадим, Н.И. Щымбал. Сталь и альтернативные материалы: анализ и прогноз. Днепропетровск: НМетАУ. 1997.-53с.
2. Інтерв'ю за підсумками 2014 року/  
<http://www.nas.gov.ua/UA/news/Pages/contents>.
3. Приходько Э. В. Эффективность комплексного легирования стали и сплавов/ Э. В. Приходько. Киев: Наукова думка.-1995.-292 с.
4. Приходько Э.В., Тогобицкая Д.Н., Головко Л.А. Концептуальные основы прикладной теории комплексного легирования //Фундаментальные и прикладные проблемы черной металлургии. – Вып.13. -2006. –С.162-165.
5. Приходько Е.В., Тогобицька Д.М., Козачок О.С. Інформаційно-аналітична система стабілізації властивостей прокату // Металознавство та обробка металів. – Київ. – 2011. -№1. – С.39-43.
6. Международная научно-техническая конференция «Металлургия и литейное производство 2007. Беларусь» Разработка методики физико-химического моделирования закономерностей изменения свойств горячекатаного крупносортового проката в зависимости от содержания химических элементов. с.184-186
7. Патент на винахід №95729. Спосіб доведення хімічного складу сталі в ковші.