

УДК: 669.14.018.29:669.11;669.14.018.9:669.11

Подольський Р.В., Сафронова О.А., Меркулов О.Є., Клемешов Є.С., Кононенко Г.А.,
Бабаченко О.І.**Розроблення методики моделювання фазово-структурних перетворень у легованих Fe-C сплавах**Podolskyi R.V., Safronova O.A., Merkulov O.Ye., Klemeshov E.S., Kononenko G.A.,
Babachenko O.I.**Development of methods for modeling phase-structural transformations in alloyed Fe-C alloys**

Анотація. Побудова діаграм ТТТ чи ССТ є важливим та завжди актуальним завданням для матеріалознавців, оскільки вони надають повну інформацію, необхідну для призначення раціональних режимів термічної обробки сталей. Однак, велика кількість сплавів в поєднанні з високою чутливістю розміру зерен до зміни хімічного складу вказує на те, що неможливо створити достатню кількість діаграм для спільного застосування. Одним із сучасних матеріалознавчих завдань була розробка універсальних моделей, які дозволяють розрахунковим методом отримати ТТТ та ССТ діаграми найбільш наближені до експериментальних даних. Мета досліджень – розробка методики моделювання фазово-структурних перетворень у легованих Fe-C сплавах для прикладного матеріалознавства. Для побудови ССТ діаграм дані про фактичний хімічний склад та вплив базових хімічних елементів на утворення структури було визначено через відомі ТТТ діаграми. В рамках даних досліджень було проведено аналіз літературних даних та проведено математичне моделювання за допомогою програмних забезпечень: QForm, JmatPro, MathLAB, Call Phad. Прикладом одночасного використання розрахунку та експериментальних методів можуть служити діаграми ССТ. За основ яких береться відомі ТТТ діаграми та фактичний хімічний склад та шляхом моделювання перетворення аустеніту в центрі заготовок різного перерізу, охолодження яких відбувається в однорідному охолоджуючому середовищі будується структурні діаграми. В даній роботі розроблено методику, яка базується на застосуванні стандартних пакетних термодинамічних моделей в поєднанні з кінетичною моделлю, що дозволяє оперативно враховувати найменші коливання хімічного складу в межах однієї марки сталі (від плавки до плавки) або зміни умов охолодження (від виробу до виробу). Побудовано та проаналізовано ССТ діаграми для сталей 30ХГС з діапазонами хімічного складу 0,28...0,29% C, 1,00...1,49% Si, 0,92...1,10% Mn, 0,91...1,10% Cr, 0,12...0,13% Ni; сталі 45ХГС 0,43% C, 1,38% Si, 0,95% Mn, 1,06% Cr, 0,10% Mo; сталі 50ХГСМ 0,50% C, 1,48% Si, 1,05% Mn, 1,20% Cr; сталі 60ХГСМ 0,58% C, 0,89% Si, 0,81% Mn, 1,27% Cr, 0,06% Ni. Дана методика може бути застосована для коригування режимів термічної обробки або хімічного складу Fe-C сплавів поточного виробництва; а також для прогнозування структурного складу дослідних сплавів при розробці нових матеріалів.

Ключові слова: ССТ, ТТТ, діаграми, моделювання, хімічний склад, структурна діаграма, методика.

Annotation. Construction of TTT or CCT diagrams is an important and always relevant task for materials scientists, as they provide complete information necessary for the appointment of rational modes of heat treatment of steels. However, the large number of alloys combined with the high sensitivity of grain size to changes in chemical composition indicates that it is impossible to create a sufficient number of diagrams for joint use. One of the modern materials science tasks was the development of universal models that allow the calculation method to obtain TTT and CCT diagrams closest to experimental data. The purpose of research is to develop a method for modeling phase-structural transformations in doped Fe-C alloys for applied materials science. To construct CCT charts, data on the actual chemical composition and the effect of basic chemical elements on the formation of the structure were determined through known TTT charts. As part of the research data, the analysis of literature data and mathematical modeling were performed using software: QForm, JmatPro, MathLAB, Call Phad. An example of the simultaneous use of calculation and experimental methods are CCT charts. Based on the known TTT diagram and the actual chemical composition and by modeling the transformation of austenite in the center of the workpieces of different cross sections, cooling which takes place in a homogeneous cooling medium, structural diagrams are built. This paper develops a method based on the use of standard batch thermodynamic models in combination with a kinetic model that allows you to quickly take into account the smallest fluctuations in chemical composition within one steel grade (from melting to melting) or changes in cooling conditions (from product to product). The CCT diagrams for 30HGS steels with chemical composition ranges 0.28...0.29% C, 1.00...1.49% Si, 0.92...1.10% Mn, 0.91...1.10% Cr, 0.12...0.13% Ni; steel 45HGS 0.43% C, 1.38% Si, 0.95% Mn, 1.06% Cr, 0.10% Mo; steel 50HGSM 0.50% C, 1.48% Si, 1.05% Mn, 1.20% Cr; steel 60HGSM 0.58% C, 0.89% Si, 0.81% Mn, 1.27% Cr, 0.06% Ni. This technique can be used to adjust the modes of heat treatment or chemical composition of Fe-C alloys of current production; as well as to predict the structural composition of experimental alloys in the development of new materials.

Keywords: CCT, TTT, diagrams, modeling, chemical composition, structural diagram, methodology.

Вступ. Побудова діаграм ТТТ чи ССТ є важливим та завжди актуальним завданням для матеріалознавців, оскільки вони надають повну ін-

формацію, необхідну для призначення раціональних режимів термічної обробки сталей.

Для створення таких діаграм було виконано

Подольський Р.В.,	
Сафронова О.А.,	
Меркулов О.Є.,	
Клемешов Є.С.,	
Кононенко Г.А.,	
Бабаченко О.І.	

велику кількість експериментальних робіт [1-11]. Наприклад, Кіркалді та ін. [2, 6-7] розробив модель, що включає можливість застосування даних про перетворення з формуванням фериту, перліту, бейніту в сталях HSLA. В роботах Х. Бхадешіа [8, 9] була використана інша методологія для визначення початкових кривих для перетворення фериту, бейніту. Розроблена модель була перевірена на сходинку з експериментальними даними та мала високий рівень цього критерію. Модель Х. Бхадешіа була пізніше вдосконалена Лі [10,11], з метою розширення бібліотеки специфікацій сплавів з більш високими концентраціями. Також авторами [2, 6-7, 13] були здійснені спроби створення моделі для побудови CCT діаграм з застосуванням результатів випробувань на прожарюваність по Джомені для низьколегованих та високовуглецевих сталей. Одним із недоліків цих моделей є використання термодинаміки розведених розчинів для розрахунку температури перетворення. Тепер це можна подолати за допомогою термодинамічної моделі [14].

При побудові CCT діаграм вважають, що якщо за початок перетворення приймають момент переходу через критичні точки A_1 та A_3 , то лінії на діаграмах також показуватимуть тривалість перебування сталі в субкритичному інтервалі при безперервному охолодженні, що забезпечує отримання певного відсотку розпаду переохолодженого аустеніту. Ізотермічні діаграми зазвичай будуються у тих самих координатах і показують саме тривалість ізотермічної витримки при певній температурі, необхідної для отримання того чи іншого ступеня розпаду. Ґрунтуючись на цьому вдається наочно зіставити кінетику перетворення в ізотермічних умовах і за безперервного охолодження [11-12]. З урахуванням отриманих результатів експериментів авторів [11-12], а також запису дилатометричних кривих отримуємо загальне, досить, правильне уявлення про перебіг перетворення в процесі і про вплив на нього швидкості охолодження.

Однак, велика кількість сплавів в поєднанні з високою чутливістю розміру зерен до зміни хімічного складу вказує на те, що неможливо створити достатню кількість діаграм для спільного застосування. Одним із сучасних матеріалознавчих завдань була розробка універсальних моделей, які дозволяють розрахунковим методом отримати ТТТ та CCT діаграми найбільш наближені до експериментальних даних.

Виходячи з цього, при одночасному використанні ТТТ діаграм та розрахунку можна створювати діаграми CCT. За основу, як і в інших розрахункових методах, прийняті дані ізотермічних діаграм, але вони доповнені результатами обширних дилатометричних досліджень. На сьогодні дані дослідження можна спростити шляхом введення відомих результатів щодо ТТТ діаграм спільно з діаграмами структурного стану.

Мета і завдання досліджень. Мета досліджень – розробка методики моделювання фазово-структурних перетворень у легованих Fe-C сплавах для прикладного матеріалознавства.

Завдання досліджень – застосувати літературні дані ТТТ діаграм з застосуванням стандартних пакетних термодинамічних моделей в поєднанні з кінетичною моделлю для побудови масиву даних структурних діаграм з метою побудови CCT діаграм для прикладного застосування в металознавстві.

Матеріали та методи дослідження. Для побудови CCT діаграм дані про фактичний хімічний склад та вплив базових хімічних елементів на утворення структури було визначено через відомі ТТТ діаграми. В рамках даних досліджень було проведено аналіз літературних даних та проведено математичне моделювання за допомогою програмних забезпечень: QForm, JmatPro, MathLAB, Call Phad.

Результати досліджень. Модель для розрахунку фериту та перліту вперше була представлена Кіркалді та ін (1) [5], наступні рівняння (2-4), розроблені Зенером і Гіллертом [15, 16, 17]. У початковій моделі не було зроблено жодної спроби розрізнити дифузійне та зміщувальне перетворення, а загальна крива «С» була створена за допомогою загальної формули для часу (τ) для перетворення x фракції аустеніту при температурі T ,

$$\tau(x, T) = \frac{1}{\alpha(N)D_{eff}\Delta T^q} \int_0^x \frac{dx}{x^2(1-x)^{2/3}(1-x)^{2x/3}} \quad 1$$

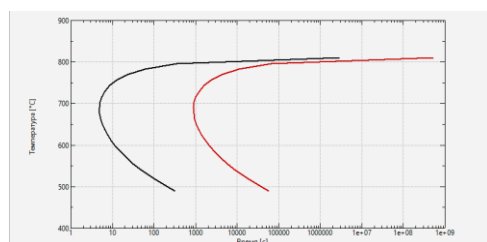
де $\alpha = \beta 2^{(N-1)/2}$, β — емпіричний коефіцієнт, N — розмір зерна ASTM, D — ефективний коефіцієнт дифузії, ΔT — переохолодження нижче температури, де знаходиться аустеніт, нестійкий відносно фериту (температура A_3), а q — показник, що залежить від ефективного механізму дифузії [5].

Вираз, який було зроблено вище, означає, що після надання складу та розміру зерна потрібно розрахувати лише температуру A_3 . Модель була розширена, щоб включити С-криві для перліту та бейніту, а також дозволити загальний розрахунок величини перетворення як функції часу при температурі. Це забезпечило три набори рівнянь для величини перетворення фериту (τ_F), перліту (τ_P) і бейніту (τ_B) [18]. В роботі було виконано обчислення для відомої сталі з використанням термодинамічних моделей (2-4), на рис. 1 наведенні вказані «С» криві.

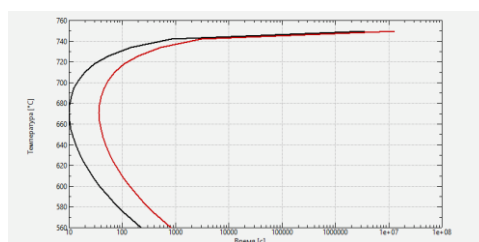
$$\tau_F = \frac{60. \% Mn + 2. \% Ni + 68. \% Cr + 244. \% Mo}{6 \times 2^{N/8} \Delta T^3 D_F} I \quad 2$$

$$\tau_P = \frac{1.8 + 5.4(\% Cr + \% Mo + 4. \% Mo. \% Ni)}{6 \times 2^{N/8} \Delta T^q D_P} I \quad 3$$

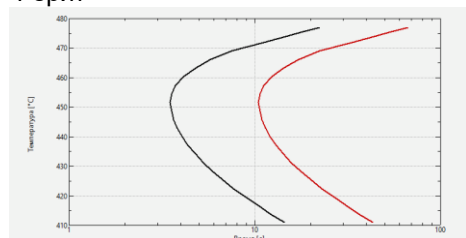
$$\tau_P = \frac{(2.3 + 10\% C + 4. \% Cr + 19. \% Mo) \cdot 10^{-4}}{6 \times 2^{N/8} \Delta T \exp(-\frac{27500}{RT})} I \quad 4$$



Ферит



Перліт



Бейніт

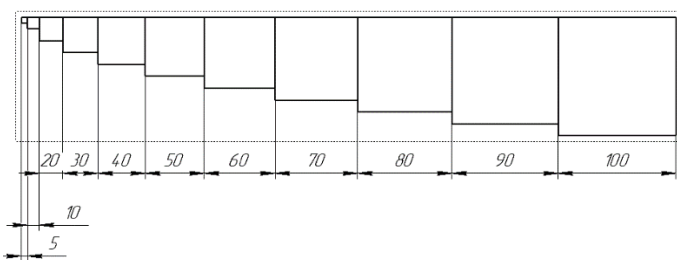
Рисунок 1 – Результати розрахованих термодинамічних моделей сталі 30ХГС

Прикладом одночасного використання розрахунку та експериментальних методів можуть служити діаграми ССТ. За основу яких береться відома ТТТ діаграма та фактичний хімічний склад (табл. 1) та шляхом моделювання перетворення аустеніту в центрі заготовок різного перерізу (рис. 2), охолодження яких відбувається в однорідному охолоджуючому середовищі будується структурні діаграми.

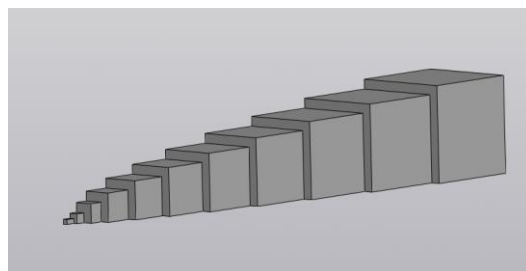
охолодження (від виробу до виробу).

Таблиця 1 – Хімічний склад сталей, що застосовуються в різних сферах в Україні [11, 19-22]

Маркування	Хімічний елемент, ваг. %										Джерело
	C	$\Delta C^{30XГC}$	Si	$\Delta Si^{30XГC}$	Mn	$\Delta Mn^{30XГC}$	Cr	$\Delta Cr^{30XГC}$	Ni (Mo)	$\Delta Ni(Mo)^{30XГC}$	
30ХГС	0,28	-	1,49	-	0,92	-	0,99	-	0,12	-	[19 - 20]
30ХГС	0,28	0	1,00	-0,5	1,10	+0,2	1,00	+0,01	-	-0,12	[21]
30ХГС	0,29	+0,01	1,05	-0,44	0,98	+0,06	0,91	-0,08	0,13	+0,01	[11]
45ХГС	0,43	+0,15	1,38	-0,11	0,95	+0,03	1,06	-0,07	(0,10)	(+0,10)	[20]
50ХГСМ	0,50	+0,22	1,48	-0,01	1,05	+0,13	1,20	+0,21	-	-	[20]
60ХГСМ	0,58	+0,3	0,89	-0,6	0,81	-0,11	1,27	+0,28	0,06	-0,06	[22]



а



б

Рисунок 2 – Ескіз моделі (а) та CAD-модель (б) для проведення розрахункового експерименту

Моделювання проводилося за допомогою методу скінченних елементів (МСЕ) в середовищі програмного комплексу QForm. МСЕ це чисельний метод, який дозволяє зводити вирішення системи диференціальних рівнянь до системи найпростіших алгебраїчних рівнянь. В рамках даного дослідження використовувалось численні кінетичні методи, що базуються на заміні функції $T(x, y)$ сітковою функцією $T_{i,k}^j$, де (i, k - нумерація вузлів

двовимірної сітки). За умови рівномірної сітки (крок по x дорівнює кроку по y). З застосуванням термодинамічної моделі Кіркалді та ін [5] яка була обрана як основа для нових розрахунків кінетичної моделі (5), оскільки існує чітко визначений набір вхідних параметрів, які необхідні і які можна легко розрахувати. Розрахунок температури у кожному вузлі сітки (в даному програмному комплексі елемент «mesh») визначається такою формулою:

$$T_{i,k}^j = \frac{T_{i,k}^{j-1} + T_{i-1,k}^{j-1} + T_{i,k+1}^{j-1} + T_{i,k-1}^{j-1}}{4}$$

5

Кінцево-елементний аналіз процесу загартування експериментальної заготовки проводився за такими етапами:

1. Побудова геометричних об'єктів процесу загартування. Побудова геометрії експериментальної CAD-моделі проводилася в програмі SolidWorks. Креслення експортувалось в форматі *.stp в QForm. Потім геометрична модель розбивалася на плоскі чотирихвустові кінцеві елементи з одним ступенем свободи (температура) розміром 2 мм.

2. Завдання початкових умов. В якості вихідних умов задавалася початкова температура перед загартуванням рівною 900°C з витримкою 1 хв на 1 мм перерізу деталі (1 год 40 хв).

3. Завдання граничних умов. У фізичному сенсі граничні умови приймалися як охолоджувачі вода та масло, які задавалися у вигляді даних у внутрішню бібліотеку за результатами аналізу в форматі *.qdat. Вони характеризуються коефіцієнтом тепловіддачі і температурою охолоджувача. Коефіцієнт тепловіддачі задавався як функція від температури поверхні металу.

Моделювання проводилося для сталі згідно табл. 1. Для цієї марки сталі через аналіз даних визначались та вносились дані зміни мікроструктури в момент часу через відомі ТТТ діаграми.

4. Для марок сталі згідно табл. 1 визначали властивості за допомогою комп'ютерного методу «Call Phad», та «JmatPRO» та відомої ТТТ діаграми (рис. 5, а). Комп'ютерний метод «Call Phad» та «JmatPRO» за хімічним складом сталі дозволяє визначити різні її мікроструктурні стани, що змінюються в процесі загартування. Для вирішення теплової задачі задавалися наступні температурозалежні властивості сталі: щільність, питома теплоємність і температуропровідність.

5. Завдання чисельних параметрів розв'язувача. При вирішенні теплової задачі приймалися такі параметри розв'язувача: метод рішення - квазістатичний; тип розв'язувача - ітераційний; інтегрування за часом - неявне.

6. На останньому етапі моделювання проводилася адаптація моделі до реального процесу (зіставлення експериментальних даних в контрольних точках з чисельними результатами, подальше коректування моделі) і аналіз оптимальних результатів моделювання. Результати моделювання (температура в вузлах моделі на різній глибині) зіставлялися з експериментальними даними (ТТТ діаграми) і при значному розходженні вносилися поправки в чисельну модель.

Значення швидкості охолодження експериментальної CAD-моделі в різних її зонах були отримані шляхом рішення методом кінцевих елементів диференціального рівняння теплопровідності (рівняння Фур'є):

$$\frac{\partial t}{\partial \tau} = a \nabla^2 t + \frac{q_v}{c\rho},$$

6

де t – температура, °C; τ – час, с; a – коефіцієнт температуропровідності, (1/°); $\nabla^2 t$ – оператор Лапласа (сума других приватних похідних); q_v – кількість теплоти, що виділяється в одиниці об'єму в одиницю часу; c – теплоємність, (Дж/(кг·°C)); ρ – щільність, г/см³.

Отримали результати даного моделювання з умовами охолодження у воді (рис. 3), та охолодження в маслі (рис. 4), фіксація даних проводилася по центру кожної об'ємної фігури. На підставі цих даних були отримані структурні діаграми сталі кожної центральної площі поперечного перерізу об'ємної фігури, охолодженої в воді або в маслі, що вносились в масив даних довірчого інтервалу (рис. 5, б). Ці дані були основними критеріями для побудови об'ємних модельованих термкінетичних (CCT) діаграм (рис. 5, в).

Результати моделювання показали, що при нагріванні зразків дослідних хімічних складів зі швидкістю 30°C/хв в сталі поліморфне $\alpha \rightarrow \gamma$ - перетворення починається в діапазоні температур ~749-771 °C (A_1), закінчується при ~778-829°C (A_3). Для побудови CCT зразки нагрівали до температури 900°C (на ~90°C вище температури A_3 для даної сталі).

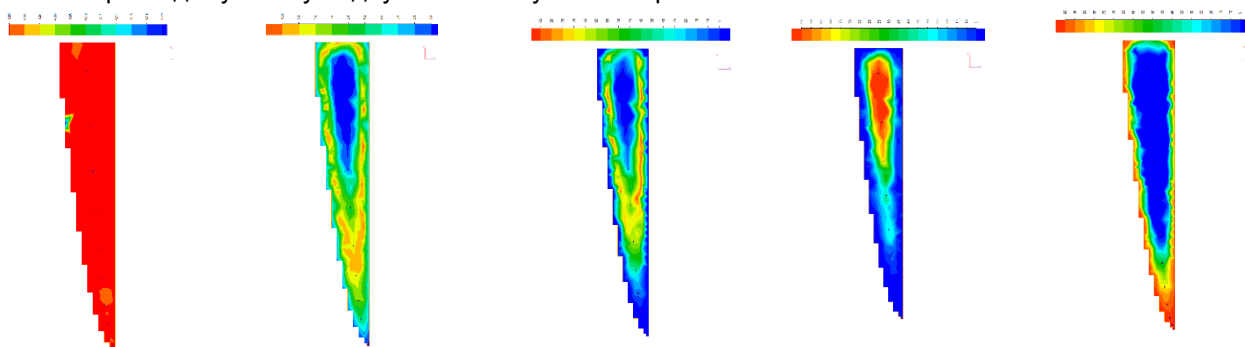
На CCT діаграмі (рис. 5, в) для кожної швидкості охолодження нанесені значення твердості по Роквелу і об'ємні частки структурних складових, виражені в процентах. Аналіз ТКД показує, що температури початку і завершення утворення фериту, перліту і бейніту помітно зменшуються при збільшенні швидкості охолодження. Зі збільшенням швидкості охолодження відзначається тенденція зростання значень твердості, що пов'язано зі структурними змінами, що відбуваються в сталі: підвищенням дисперсності структурних складових, зменшенням кількості фериту і перліту в структурі, зростанням об'ємної частки бейніту і мартенситу.

За результатами моделювання за розробленою методикою визначені інтервали швидкостей охолодження, в межах яких спостерігається зміна механізму структуроутворення при розпаді аустеніту сталі 30ХГС [20]. Показано, що при швидкості охолодження до ~ 2°C/с розпад аустеніту відбувається з утворенням доєвтектоїдного фериту і перліту; при 2°C/с ... 7°C/с структура сталі складається з доєвтектоїдного фериту, перліту і бейніту; при 7°C/с...10°C/с - з доєвтектоїдного фериту, перліту, бейніту і мартенситу; при 10°C/с...20°C/с - з бейніту і мартенситу; при швидкості охолодження 50°C/с розпад аустеніту відбувається з утворенням мартенситу. Критична швидкість охолодження для досліджуваної сталі знаходиться в інтервалі 30...50°C/с.

З результатів моделювання сталі 30ХГС [10] показано, що при швидкості охолодження до ~ 3°C/с розпад аустеніту відбувається з утворенням доєвтектоїдного фериту і перліту; при 3°C/с ... 10°C/с структура сталі складається з доєвтектоїд-

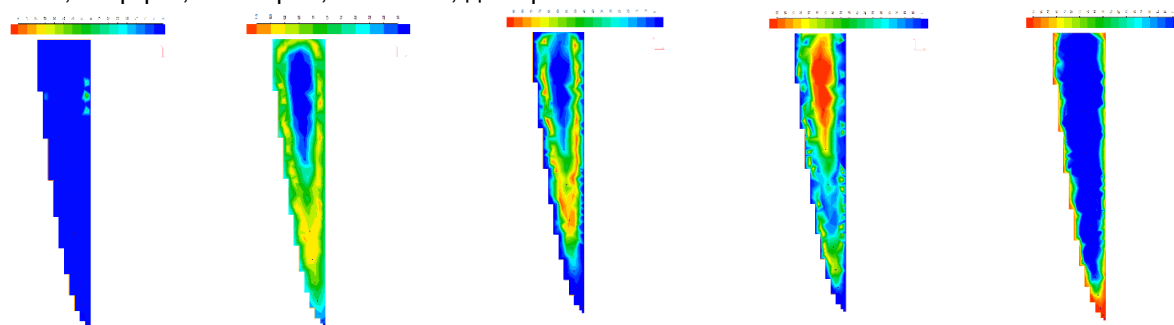
ного фериту, перліту і бейніту; при $10^{\circ}\text{C}/\text{с} \dots 20^{\circ}\text{C}/\text{с}$ - з бейніту і мартенситу; при швидкості охолодження $50^{\circ}\text{C}/\text{с}$ розпад аустеніту відбувається з утво-

ренням мартенситу. Критична швидкість охолодження для досліджуваної сталі знаходиться в інтервалі $30 \dots 50^{\circ}\text{C}/\text{с}$.



а б в г д

Рисунок 3 – Структурна складова дослідної моделі (5, 10...100 мм) на 200 с охолодження у воді: а – аустеніт, б- ферит, в – перліт, г – бейніт, д- мартенсит

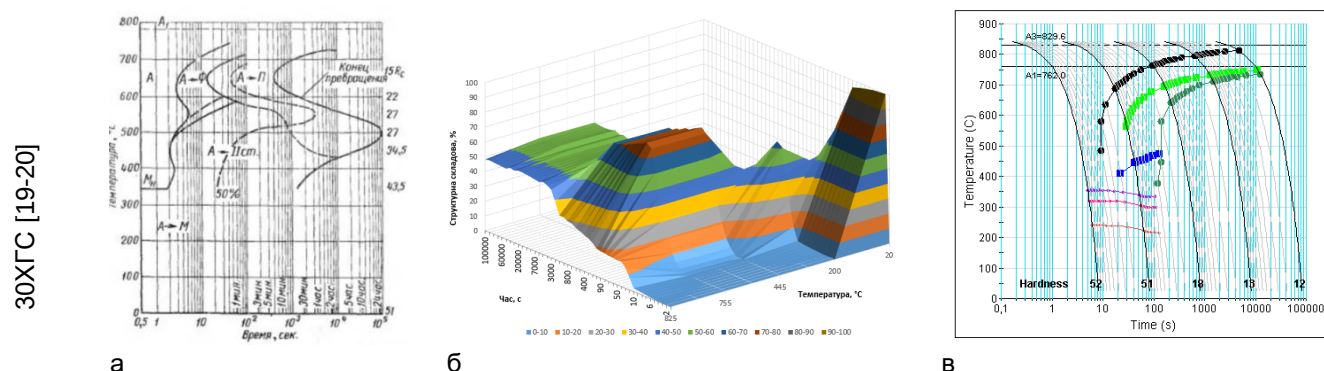


а б в г д

Рисунок 4 – Структурна складова дослідної моделі (5, 10...100 мм) на 200 с охолодження у маслі: а – аустеніт, б- ферит, в – перліт, г – бейніт, д- мартенсит

3 результатів моделювання сталі 45ХГС [19] показано, що при швидкості охолодження до $\sim 1^{\circ}\text{C}/\text{с}$ розпад аустеніту відбувається з утворенням доєвтектоїдного фериту і перліту; при $1^{\circ}\text{C}/\text{с} \dots 3^{\circ}\text{C}/\text{с}$ структура сталі складається з доєвтектоїдного фериту, перліту і бейніту; при $3^{\circ}\text{C}/\text{с} \dots 7^{\circ}\text{C}/\text{с}$ - з доєвтектоїдного фериту, перліту, бейніту і мар-

тенситу; при $7^{\circ}\text{C}/\text{с} \dots 10^{\circ}\text{C}/\text{с}$ - з бейніту і мартенситу; при швидкості охолодження $50^{\circ}\text{C}/\text{с}$ розпад аустеніту відбувається з утворенням мартенситу. Критична швидкість охолодження для досліджуваної сталі знаходиться в інтервалі $10 \dots 50^{\circ}\text{C}/\text{с}$.



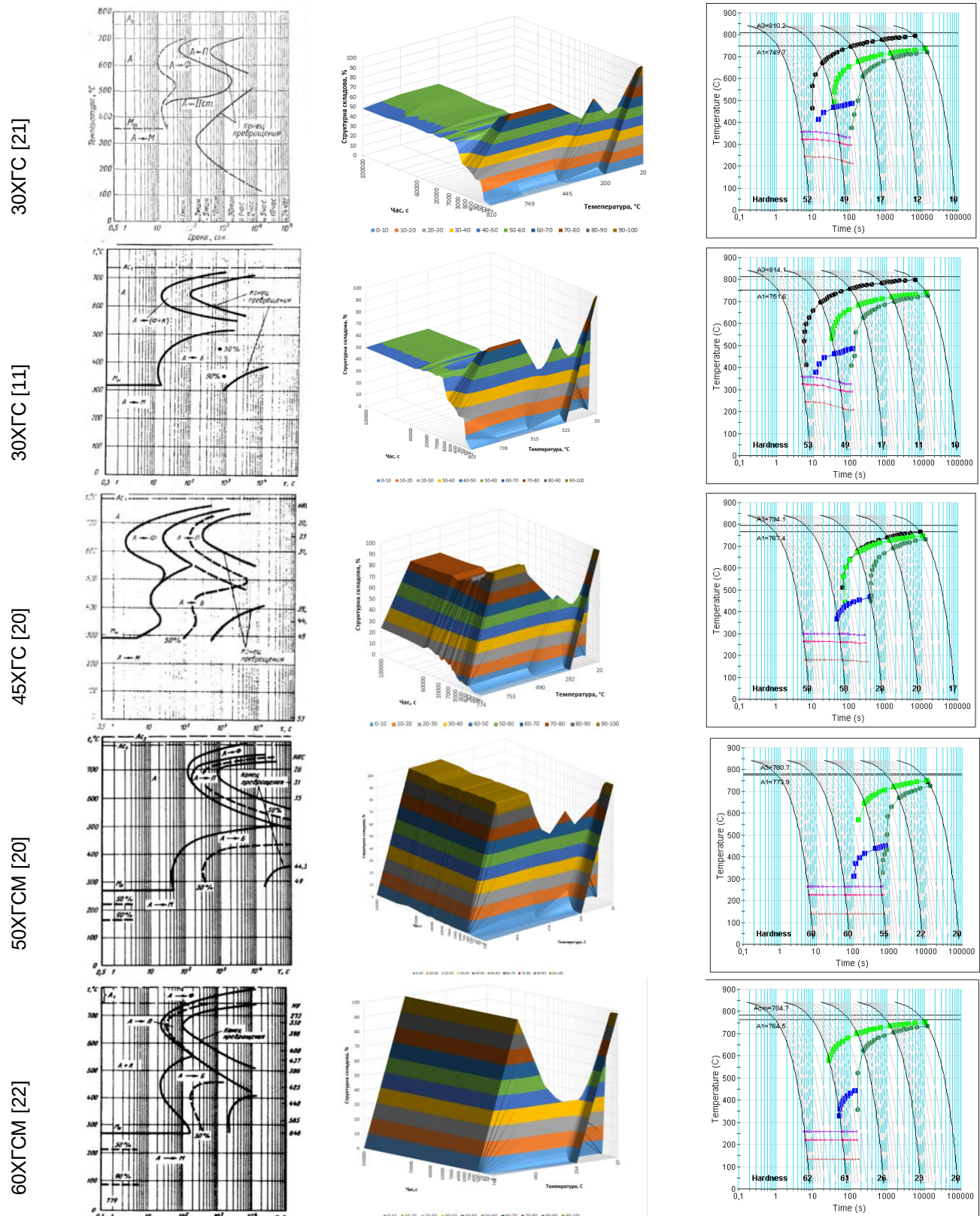
а

б

в

Рисунок 5 – Результати досліджень: а - ТТТ діаграма розпаду аустеніту дослідних сталей [11,19-22], відповідно до таблиці 1, б – залежність структурної складової від моменту часу, геометрії та температури, в - модельована ССТ діаграма розпаду аустеніту.

Продовження рисунку 5



З результатів моделювання сталі 50ХГСМ [19] показано, що при швидкості охолодження до $\sim 3^\circ\text{C}/\text{c}$ розпад аустеніту відбувається з утворенням доєвтектоїдного фериту і перліту; при $3^\circ\text{C}/\text{c}$... $7^\circ\text{C}/\text{c}$ структура сталі складається з доєвтектоїдного фериту, перліту і бейніту; при $7^\circ\text{C}/\text{c}$... $10^\circ\text{C}/\text{c}$ -

з доєвтектоїдного фериту, перліту, бейніту і мартенситу при швидкості охолодження $50^\circ\text{C}/\text{c}$ розпад аустеніту відбувається з утворенням мартенситу. Критична швидкість охолодження для досліджуваної сталі знаходиться в інтервалі $10\ldots 50^\circ\text{C}/\text{c}$.

З результатів моделювання сталі 60ХГСМ [21] показано, що при швидкості охолодження до $\sim 2^\circ\text{C}/\text{с}$ розпад аустеніту відбувається з утворенням доєвтектоїдного фериту і перліту; при $2^\circ\text{C}/\text{с} \dots 10^\circ\text{C}/\text{с}$ структура сталі складається з доєвтектоїдного фериту, перліту і бейніту; при $3^\circ\text{C}/\text{с} \dots 7^\circ\text{C}/\text{с}$ - з доєвтектоїдного фериту, перліту, бейніту і мартенситу при швидкості охолодження $50^\circ\text{C}/\text{с}$ розпад аустеніту відбувається з утворенням мартенситу. Критична швидкість охолодження для досліджуваної сталі знаходиться в інтервалі $10 \dots 50^\circ\text{C}/\text{с}$.

Висновки. 1. Розроблено методику побудови CCT діаграм на основі відомих TTT діаграм та застосуванням кінетичної моделі. Показано вплив коливань хімії між марками та в межах марки. За результатами аналізу побудовано масив даних структурних діаграм, що слугують для побудови CCT діаграм. Створена модель може бути застосована для експрес аналізу побудови CCT діаграм для прикладного матеріалознавства.

2. Застосовано літературні дані TTT діаграм з застосуванням стандартних пакетних термодинамічних моделей в поєднанні з кінетичною моделлю для побудови масиву даних структурних діаграм з метою побудови CCT діаграм для прикладного застосування в металознавстві. Розроблена методика моделювання фазово-структурних перетворень у легованих Fe-C сплавах для прикладного матеріалознавства.

3. Побудовано та проаналізовано CCT діаграми для сталей 30ХГС з діапазонами хімічного складу 0,28...0,29% C, 1,00...1,49% Si, 0,92...1,10% Mn, 0,91...1,10% Cr, 0,12...0,13% Ni; сталі 45ХГС 0,43% C, 1,38% Si, 0,95% Mn, 1,06% Cr, 0,10% Mo; сталі 50ХГСМ 0,50% C, 1,48% Si, 1,05% Mn, 1,20% Cr; сталі 60ХГСМ 0,58% C, 0,89% Si, 0,81% Mn, 1,27% Cr, 0,06% Ni.

**робота виконана в рамках цільової програми Науково-дослідні роботи молодих учених НАН України 2021-2022 рр.*

Бібліографічний опис

1. Using JMatPro to model materials properties and behavior / N. Saunders et al. JOM. 2003. Vol. 55, no. 12. P. 60–65. URL: <https://doi.org/10.1007/s11837-003-0013-2>.
2. Modelling of materials properties and behaviour critical to casting simulation / Z. Guo et al. Materials Science and Engineering: A. 2005. Vol. 413-414. P. 465–469. URL: <https://doi.org/10.1016/j.msea.2005.09.036>.
3. Material properties for process simulation / Z. Guo et al. Materials Science and Engineering: A. 2009. Vol. 499, no. 1-2. P. 7–13. URL: <https://doi.org/10.1016/j.msea.2007.09.097>.
4. Saunders N., Miodownik A. P., Schillé J. P. Modelling of the thermo-physical and physical properties for solidification of Ni-based superalloys. Journal of Materials Science. 2004. Vol. 39, no. 24. P. 7237–7243. URL: <https://doi.org/10.1023/b:jmsc.0000048737.32055.7a>.
5. Kirkaldy J. S., Baganis E. A. Thermodynamic prediction of the a_{Fe3} temperature of steels with additions of Mn, Si, Ni, Cr, Mo, Cu. Metallurgical Transactions A. 1978. Vol. 9, no. 4. P. 495–501. URL: <https://doi.org/10.1007/bf02646405>.
6. Venugopalan D., Kirkaldy J. S. Theory of cellular solidification of binary alloys with applications to succinonitrile-salol. Acta Metallurgica. 1984. Vol. 32, no. 6. P. 893–906. URL: [https://doi.org/10.1016/0001-6160\(84\)90026-9](https://doi.org/10.1016/0001-6160(84)90026-9).
7. Bhadeshia H. K. D. H. Driving force for martensitic transformation in steels. Metal Science. 1981. Vol. 15, no. 4. P. 175–177. URL: <https://doi.org/10.1179/030634581790426714>.
8. Bhadeshia H. K. D. H. Thermodynamic analysis of isothermal transformation diagrams. Metal Science. 1982. Vol. 16, no. 3. P. 159–166. URL: <https://doi.org/10.1179/030634582790427217>.
9. Bhadeshia H. K. D. H. Modelling of steel welds. Materials Science and Technology. 1992. Vol. 8, no. 2. P. 123–133. URL: <https://doi.org/10.1179/mst.1992.8.2.123>.
10. Bhadeshia H. K. D. H. Thermodynamic extrapolation and martensite-start temperature of substitutionally alloyed steels. Metal Science. 1981. Vol. 15, no. 4. P. 178–180. URL: <https://doi.org/10.1179/030634581790426697>.
11. Попова Л.Е. Диаграммы превращения аустенита в сталях и бета-растворах в сплавах титана: Справочник термиста. / Попова Л.Е., Попов А.А. - 3-е изд. Перераб. и доп. М.: Металлургия, 1991. - 503с.
12. Попов А.А. Изотермические и термокинетические диаграммы распада переохлажденного аустенита: Справочник термиста. / Попов А.А., Попова Л.Е. -М.: Государственно научно-техническое издательство машиностроительной литературы. Москва - Свердловск. 1961, - 430с.
13. Бабаченко О., Кононенко Г., Подольський Р. Розробка розрахункової моделі зміни температури рейкової сталі К76Ф для визначення параметрів термічної обробки. Science and Innovation. 2021. Т. 17, № 4. С. 25–32. URL: <https://doi.org/10.15407/scine17.04.025>.
14. Saunders N. CALPHAD (calculation of phase diagrams): A comprehensive guide. Oxford : Pergamon, 1998. 479 p.
15. C. Zener, Trans.AIME, 167 (1946), 550.
16. Hillert M. Thermodynamics of martensitic transformations. Acta Metallurgica. 1958. Vol. 6, no. 2. P. 122–124. URL: [https://doi.org/10.1016/0001-6160\(58\)90124-x](https://doi.org/10.1016/0001-6160(58)90124-x).
17. Кризement О. Бейнитная реакция в высокоуглеродистых сталях / О. Кризement. Ф. Вефер // Фазовые превращения в стали. – М.: Металлургиздат. – 1961. С. 138-148.
18. Kirkaldy J. S. Spontaneous evolution of spatiotemporal patterns in materials. Reports on Progress in Physics. 1992. Vol. 55, no. 6. P. 723–795. URL: <https://doi.org/10.1088/0034-4885/55/6/002>.
19. Бабаченко О. І., Кононенко Г. А., Меркулов О. Є., Подольський Р. В., Клемешов Є. С., Сафронова О. А. Моделювання фазово-структурних перетворень у сталі для залізничних рейок нового покоління. Фонда-

- ментальні та прикладні проблеми чорної металургії. 2021. Вип. 35. С. 212-222. (In Ukrainian). DOI 10.52150/2522-9117-2021-35-212-222
20. Constant A., Delbart G. Étude de l'influence du revenu sur la microstructure et les propriétés mécaniques à froid et à chaud d'aciers au chrome-molybdène. *Revue de Métallurgie*. 1954. Vol. 51, no. 11. P. 777–794. URL: <https://doi.org/10.1051/metal/195451110777>.
 21. Винаров С.М. Авиационные стали. Оборонгиз. 1945. (переведены данные Дубинина Г.Н.).
 22. Atlas zur Wärmebehandlung der Stähle. T.I. Waver F., Rose A.S. T.II. Rose A., Peter W., Straburg W., Rademacher L. Dusseldorf: Berichtiger Nachdruck. 1961. 257 p.

References

1. Using JMatPro to model materials properties and behavior / N. Saunders et al. *JOM*. 2003. Vol. 55, no. 12. P. 60–65. URL: <https://doi.org/10.1007/s11837-003-0013-2>.
2. Modelling of materials properties and behaviour critical to casting simulation / Z. Guo et al. *Materials Science and Engineering: A*. 2005. Vol. 413-414. P. 465–469. URL: <https://doi.org/10.1016/j.msea.2005.09.036>.
3. Material properties for process simulation / Z. Guo et al. *Materials Science and Engineering: A*. 2009. Vol. 499, no. 1-2. P. 7–13. URL: <https://doi.org/10.1016/j.msea.2007.09.097>.
4. Saunders N., Miodownik A. P., Schillé J. P. Modelling of the thermo-physical and physical properties for solidification of Ni-based superalloys. *Journal of Materials Science*. 2004. Vol. 39, no. 24. P. 7237–7243. URL: <https://doi.org/10.1023/b:jmsc.0000048737.32055.7a>.
5. Kirkaldy J. S., Baganis E. A. Thermodynamic prediction of the a_3 temperature of steels with additions of Mn, Si, Ni, Cr, Mo, Cu. *Metallurgical Transactions A*. 1978. Vol. 9, no. 4. P. 495–501. URL: <https://doi.org/10.1007/bf02646405>.
6. Venugopalan D., Kirkaldy J. S. Theory of cellular solidification of binary alloys with applications to succinonitrile-salol. *Acta Metallurgica*. 1984. Vol. 32, no. 6. P. 893–906. URL: [https://doi.org/10.1016/0001-6160\(84\)90026-9](https://doi.org/10.1016/0001-6160(84)90026-9).
7. Bhadeshia H. K. D. H. Driving force for martensitic transformation in steels. *Metal Science*. 1981. Vol. 15, no. 4. P. 175–177. URL: <https://doi.org/10.1179/030634581790426714>.
8. Bhadeshia H. K. D. H. Thermodynamic analysis of isothermal transformation diagrams. *Metal Science*. 1982. Vol. 16, no. 3. P. 159–166. URL: <https://doi.org/10.1179/030634582790427217>.
9. Bhadeshia H. K. D. H. Modelling of steel welds. *Materials Science and Technology*. 1992. Vol. 8, no. 2. P. 123–133. URL: <https://doi.org/10.1179/mst.1992.8.2.123>.
10. Bhadeshia H. K. D. H. Thermodynamic extrapolation and martensite-start temperature of substitutionally alloyed steels. *Metal Science*. 1981. Vol. 15, no. 4. P. 178–180. URL: <https://doi.org/10.1179/030634581790426697>.
11. Popova L.E. Diagrammy prevrashheniya austenita v staljah i beta-rastvorah v splavah titana: Spravochnik termista. / Popova L.E., Popov A.A. - 3-e izd. Pererab. i dop. M.: Metalurgija, 1991. - 503s.
12. Popov A.A. Izotermicheskie i termokineticheskie diagrammy raspada pereohlazhdenного austenita: Spravochnik termista. / Popov A.A., Popova L.E. - M.: Gosudarstvenno nauchno-tehnicheskoe izdatel'stvo mashinostroitel'noj literatury. Moskva - Sverdlovsk. 1961. - 430s.
13. Babachenko O., Kononenko G., & Podolsky P. (2021). Development of a model for calculating changes in K76F rail steel temperature to determine the heat treatment parameters. *Science and Innovation*, 17(4), 25–32. <https://doi.org/10.15407/scine.17.04.025Saunders>
14. Saunders N. CALPHAD (calculation of phase diagrams): A comprehensive guide. Oxford : Pergamon, 1998. 479 p.
15. C. Zener, *Trans. AIME*, 167 (1946), 550.
16. Hillert M. Thermodynamics of martensitic transformations. *Acta Metallurgica*. 1958. Vol. 6, no. 2. P. 122–124. URL: [https://doi.org/10.1016/0001-6160\(58\)90124-x](https://doi.org/10.1016/0001-6160(58)90124-x).
17. Krizement O. Bejnitnaja reakcija v visokouglerodistih staljah / O. Krizement. F. Vefer // Fazovie prevrashhenija v stali. – M.: Metallurgizdat. – 1961. S. 138-148.
18. Kirkaldy J. S. Spontaneous evolution of spatiotemporal patterns in materials. *Reports on Progress in Physics*. 1992. Vol. 55, no. 6. P. 723–795. URL: <https://doi.org/10.1088/0034-4885/55/6/002>.
19. Babachenko O.I., Kononenko G.A., Merkurov O.Ye., Podolsky R.V., Klemeshov E.S., Safronova O.A. Modelyuvannya fazovo-strukturnykh peretvoren u stalidya zaliznychnykh reyk novoho pokolinnya [Modeling of phase-structural transformations in steel for new generation railway tracks]. *Fundamental'nye i prikladnye problemy chornoj metallurgii* [Fundamental and applied problems of ferrous metallurgy], 2021, 35, 212-222. (In Ukrainian). DOI 10.52150/2522-9117-2021-35-212-222
20. Constant A., Delbart G. Étude de l'influence du revenu sur la microstructure et les propriétés mécaniques à froid et à chaud d'aciers au chrome-molybdène. *Revue de Métallurgie*. 1954. Vol. 51, no. 11. P. 777–794. URL: <https://doi.org/10.1051/metal/195451110777>.
21. Vinarov S.M. Aviacionnye stali. Oborongiz. 1945. (perevedeny dannye Dubinina G.N.).
22. Atlas zur Wärmebehandlung der Stähle. T.I. Waver F., Rose A.S. T.II. Rose A., Peter W., Straburg W., Rademacher L. Dusseldorf: Berichtiger Nachdruck. 1961. 257 p.