

ИССЛЕДОВАНИЕ ДИФфуЗИОННЫХ ПРОЦЕССОВ В ПОВЕРХНОСТНОЙ ЗОНЕ НИКОТРИРОВАННЫХ ТЕПЛОСТОЙКИХ СТАЛЕЙ

Маленко П.И.

ФГБОУ ВО «Тульский государственный университет», г. Тула, pawel.malenko@yandex.ru

Ключевые слова: метод молекулярной динамики, моделирование диффузионных процессов, никотрированные теплостойкие стали, процесс трения скольжения, режим ресурсного смазывания.

Важной особенностью, характеризующей кинетику структурных изменений и диффузионных процессов при трении, является высокая скорость нагрева и охлаждения поверхностей при переходе механической энергии в тепловую, значительно превышающая скорости нагрева и охлаждения при обычных условиях термической обработки. Тепловые и силовые поля характеризуются нестационарностью и большими градиентами температур и давлений. Вследствие изменений химического потенциала металлов при многократном тепловом и силовом воздействии возникают значительные диффузионные потоки атомов по глубине поверхностных слоев толщиной от моноатомных до нескольких десятков микрометров [1].

В течение времени нахождения в контакте участков рабочей поверхности реализуются существенные диффузионные превращения в зоне деформации. Представления о микродиффузионном характере реализующихся при трении процессов, связанном с наличием флуктуации концентрации легирующих элементов в исследуемых микрообъемах, предложены в работе [2]. Они основаны на том, что в приповерхностном слое интенсифицируются процессы, которые приводят к возникновению диффузионной пористости металла, обуславливающей появление микроскопических дефектов. Направление диффузионного потока атомов определяется распределением давления и температуры по глубине активного поверхностного слоя. Результирующий диффузионный поток атомов в рабочих объемах материала направлен в сторону контакта сопряженных поверхностей трения.

Таким образом, основным отличием поверхностных слоев при трении является локальность структурных изменений и диффузионного перераспределения компонентов в пределах отдельных микроскопических объемов. Локальные структурные и фазовые превращения в отдельных микрообъемах поверхностного слоя связаны с неоднородностью свойств рабочей поверхности в пределах зоны контакта, что, в свою очередь, определяется различием характера воздействий на материал при контактировании.

Данная трактовка базируется на работах [3-6] в которых доказывается влияние контактирования на микрошероховатых поверхностях, вызывающих процесс термоциклирования, то есть колебательный температурный процесс с высокой частотой ($\omega=10^9 \dots 10^{12}$ м/с²). В свою очередь процесс термоциклирования приводит к возникновению термических ударов (ТУ). При этом данные ТУ в зависимости от температуры достигают величины $P=3 \dots 18$ ГПа. Именно ТУ приводят к возникновению восходящей диффузии, вызывающей трансформацию исходных фаз.

Поскольку металловедческие исследования, основанные на обработке экспериментальных данных и рассматривающих металлы в континуальном приближении, только подтверждают возможность наличия различных механизмов диффузии, но не доказывают их существование, то возникла необходимость в анализе механизмов диффузии на атомном уровне, то есть на уровне кристаллических решеток (среда дискретная). Для решения подобных задач используется метод молекулярной динамики (ММД), основанный на численном интегрировании уравнений движения Ньютона для системы из N частиц (атомов). Число N выбирается обычно от нескольких сотен до десятков тысяч. Важная особенность метода – это задание закона межчастичного взаимодействия – потенциала

парного взаимодействия (ППВ). Наибольшую точность дают расчеты ППВ «из первых принципов» (*ab initio*), в том числе и квантово-химические методы. Однако, вследствие больших временных затрат они базируются на ограниченном количестве атомов ($n < 1000$) и не могут быть перенесены на большие атомные системы. В этой связи в последние годы широко используются полуэмпирические методы, в частности, формализм метода «погруженного атома» (EAM). Дальнейшая процедура получения наблюдаемых физических величин (в частности, коэффициента диффузии D) состоит в статистической обработке (усреднении) функции диффузии в зависимости от микропеременных – координат атомов $\mathbf{r}(\tau)$ и скоростей $\mathbf{v}(\tau)$ атомов системы (кристаллита).

Объектом исследования послужила теплостойкая сталь 25Х3МЗНБЦА с низкотемпературным карбонитридным покрытием (процесс никотрирования). Данная сталь используется для изготовления узлов автоматики стрелково-пушечного вооружения, работающих в условиях трения скольжения с ресурсным смазыванием.

Молекулярно-динамические расчеты проводились с помощью стандартного пакета программ XMD, основные характеристики которого описаны в работе [7]. На сформированный из кристаллических решеток кристаллит из N атомов могут накладываться как свободные, так и циклические граничные условия. Свободные условия используются для определения коэффициента диффузии D для конкретного кристаллита. Циклические граничные условия необходимы для кратного увеличения количества атомов. На границе кристаллита фиксируется текущее положение атомов. Затем рассматривается следующий аналогичный кристаллит, для которого начальное положение атомов – это положение атомов на границе предыдущего кристаллита.

Исследовались механизмы диффузии исходных структур защитного никотрированного слоя со следующим фазовым составом: α -Fe, карбиды Fe_3C , нитриды Fe_3N и Fe_4N , карбонитриды $\text{Fe}_3(\text{CN})$. Для выполнения исследований были построены новые ППВ – EAM для указанных структур с использованием основополагающих принципов, изложенных в работе [8]. Результаты моделирования – образование вторичных структур (ВС): Fe_2O_3 , Fe_3O_4 , FeS_2 , Fe_2P , FeSi , MoS_2 , $\text{MoSi}_{0,65}$. Ингредиентами для образования ВС служили элементы из окружающей среды (O, S, P) и из подслоя (Mo, Si, S).

Рассмотрим методику применения ММД на примере фазы FeS_2 .

На рис. 1 а, б представлен кристаллит с дефектом – межзеренной границей “ α -Fe- FeS_2 ”. В данном случае атомы серы, как более лёгкие, диффундируют из межзеренной границы гораздо быстрее, чем атомы α -Fe.

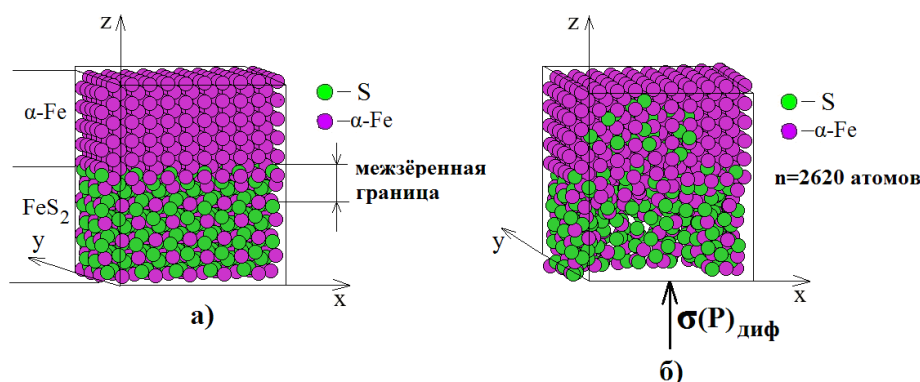


Рис. 1. Расположение атомов в кристалле решётки фазы FeS_2 ($T=600$ K, $\sigma_{\text{диф}}=8,9$ ГПа, $n=2620$ атомов): а – исходное состояние; б – диффузия S_2

Интерес представляет анализ механизма диффузии для фазы Mo_2C . Диффузия через межзеренную границу “ γ -Fe- Mo_2C ” представлена на рис. 2 а,б.

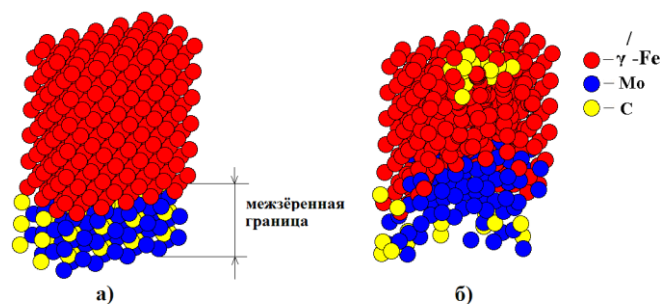


Рис. 2. Расположение атомов на межзёрной границе “ γ -Fe-Mo₂C”
($T=900$ К, $\sigma_{\text{диф}}=14$ ГПа, $n=1000$ атомов): а – исходное состояние; б – диффузия Мо и С

Атомы С диффундируют с большой скоростью, выходя из межзёрной границы и фазы γ -Fe. В то же время атомы Мо “протискиваются” между атомами Fe по извилистой траектории.

По аналогичному сценарию происходит и процесс образования других ВС. Из представленных схем очевидно, что механизм диффузии является кооперативным (эстафетным), когда одновременно диффундирует большое количество атомов ($n>30$) и возможны их столкновения. Следовательно, можно утверждать, что отсутствует доминирующее влияние вакансионного механизма.

Список литературы

- 1 Рыбакова Л.М., Куксенова Л.И. Структура и износостойкость металла. М.: Машиностроение, 1982. 212 с.
- 2 Любарский И.М., Палатник Л.С. Металлофизика трения. М.: Metallurgy, 1976. 176 с.
- 3 Платт Дж. Метод строгих выводов // Вопросы философии. 1965. № 9. С. 68-78.
- 4 Дедков Г.В. Нанотрибология: экспериментальные факты и теоретические модели // Успехи физических наук. 2000. Т. 170. № 1. С. 585-618.
- 5 Bhushan B., Israelachvili J.N., Landman U. Nanotribology: friction, wear and lubrication at the atomic scale // Nature. 1995. Vol. 374. № 6523. P. 607-616.
- 6 Виньярд Дж. Динамика радиационного повреждения // Успехи физических наук. 1961. Т. 74. Вып. 3. С. 435-459.
- 7 Rifkin J. XMD Molecular Dynamics Program [Electronic resource] // University of Connecticut, Center for Materials Simulation, Storrs, CT, 2002. 104 p. URL: <http://xmd.SourceForge.net/> (accessed: 18.02.2011).
- 8 Baskes M.I. Modified embedded-atom potentials for cubic materials and impurities // Physical Review B. 1992. V. 46. № 5. P. 2727-2742.

Сведения об авторах

Маленко Павел Игоревич, к.т.н., доцент. Область научных интересов: триботехническое материаловедение.

INVESTIGATION OF DIFFUSION PROCESSES IN THE SURFACE AREA OF NICOTRATING HEAT-RESISTANT STEELS

Malenko P.I.

Federal State Budgetary Educational Establishment of Higher Education «Tula State University»,
Tula, pawel.malenko@yandex.ru

Keywords: of molecular dynamics simulation of diffusion processes nikotrirovannye heat-resistant steels, the process of sliding friction, lubrication mode resource.

The features of the method of molecular dynamics analysis of diffusion mechanisms under the influence of thermal shock in relation to the phases of the surface layer formed in the surface layers of heat-resistant steels nikotrirovannyh during sliding friction with the resource lubrication.