УДК 621.78

МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕХАНИЧЕСКИХ СВОЙСТВ КОНСТРУКЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ МЕТОДАМИ ТЕРМИЧЕСКОЙ ОБРАБОТКИ

Козик Е.С., Корчагина С.А., Королева А.В.

МИРЭА – Российский технологический университет, Москва, Российская Федерация,
korchaginasa@yandex.ru

Аннотация: в работе представлено комплексное исследование структурных превращений и механических свойств конструкционной стали 45 после закалки и низкого отпуска. Экспериментальные данные по микроструктуре и твердости верифицированы методами вычислительной термодинамики и кинетического моделирования. Построение диаграммы состояния Fe-C выполнено в программном обеспечении Thermo-Calc, расчет критических точек проведен по эмпирическим формулам Эндрюса, а кинетика мартенситного превращения описана моделью Койстинена-Марбургера. Показано, что расчетные данные находятся в хорошем согласии с экспериментальными результатами и справочными данными. Обсуждаются причины разброса значений твердости и перспективы применения регрессионных моделей для прогнозирования структуры.

Ключевые слова: сталь 45, термическая обработка, моделирование, мартенситное превращение, TTT-диаграмма

I. ВВЕДЕНИЕ

Традиционный подход к оптимизации режимов термообработки базируется на дорогостоящем и трудоёмком экспериментальном подборе. В связи с этим, интеграция экспериментальных исследований с методами вычислительного материаловедения позволяет не только верифицировать полученные результаты, но и прогнозировать фазовый состав и механические свойства в зависимости от термической истории [2, 9].

Целью данной работы является верификация экспериментальных данных, полученных для стали 45, с помощью современных термодинамических и кинетических моделей. Такой подход позволяет подтвердить достоверность эксперимента и заложить фундамент для дальнейшего прогнозирования свойств материалов.

Объектом исследования выбрана конструкционная углеродистая сталь 45. Химический состав стали принят в соответствии с ГОСТ 1050-2013 [2]: C (0,42–0,50%), Si (0,17–0,37%), Mn (0,50–0,80%), P (не более 0,030%), S (не более 0,035%), а также Cr, Ni, Cu (каждого не более 0,25–0,30%).

II. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ЧАСТЬ

Термическая обработка включала закалку с температурами 830-850℃ и низкий отпуск при 150-250℃.

Обоснование температурного режима отпуска может быть подтверждено эмпирическим правилом, согласно которому отпуск происходит при температурах порядка (0,25-0,3)*$T_{пл}$.

Применялись следующие методы моделирования: термодинамическое моделирование диаграммы состояния Fe-C выполнено в программном пакете Thermo-Calc с использованием базы данных TCFE [4]; расчет критических точек TTT-диаграммы проведен по эмпирическим формулам Эндрюса [7]; кинетика мартенситного превращения смоделирована по уравнению Койстинена-Марбургера [8]; для сравнительного анализа эмпирических моделей привлекались данные регрессионного анализа из рецензируемых источников [9, 10].

III. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Термодинамическое моделирование фазового состава. С использованием Thermo-Calc была построена диаграмма состояния Fe-C для диапазона содержания углерода до 2,14% (рис. 1). Расчетные области фаз (LIQUID, FCC_A1 – аустенит, BCC_A2 – феррит, GRAPHITE_A9) и горизонтальные линии превращений (эвтектическое при ~1420 K и эвтектоидное при ~1000 K) совпадают с классической диаграммой, представленной в фундаментальной работе А.П. Гуляева [3].

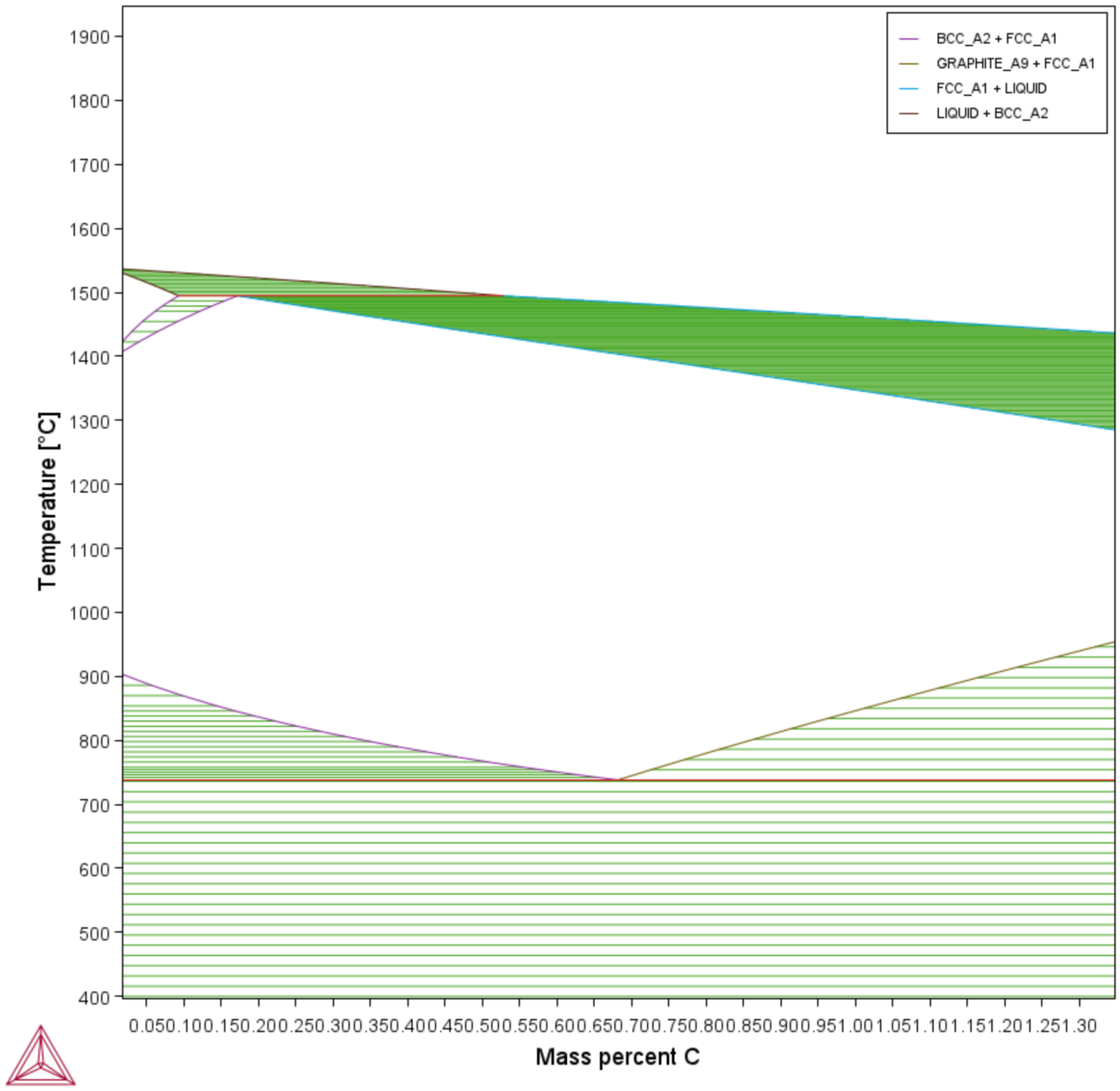


Рисунок 1. Расчетная диаграмма из Thermo-Calc

Кинетическое моделирование и критические точки. Для верификации фазовых превращений был рассчитан распад переохлаждённого аустенита. Критические точки для среднего состава стали 45 (C=0,45%; Mn=0,65%; Si=0,27%) рассчитывались по формулам Эндрюса (1-4) и построили TTT-диаграмму распада аустенита (рис. 2) [7].

Расчетные значения составили:

$$Ac_1 \approx 724 - 725℃ \quad (1)$$

$$Ac_3 \approx 748 - 764℃ \quad (2)$$

$$M_s \approx 326℃ \quad (3)$$

$$M_f \approx -140℃ \quad (4)$$

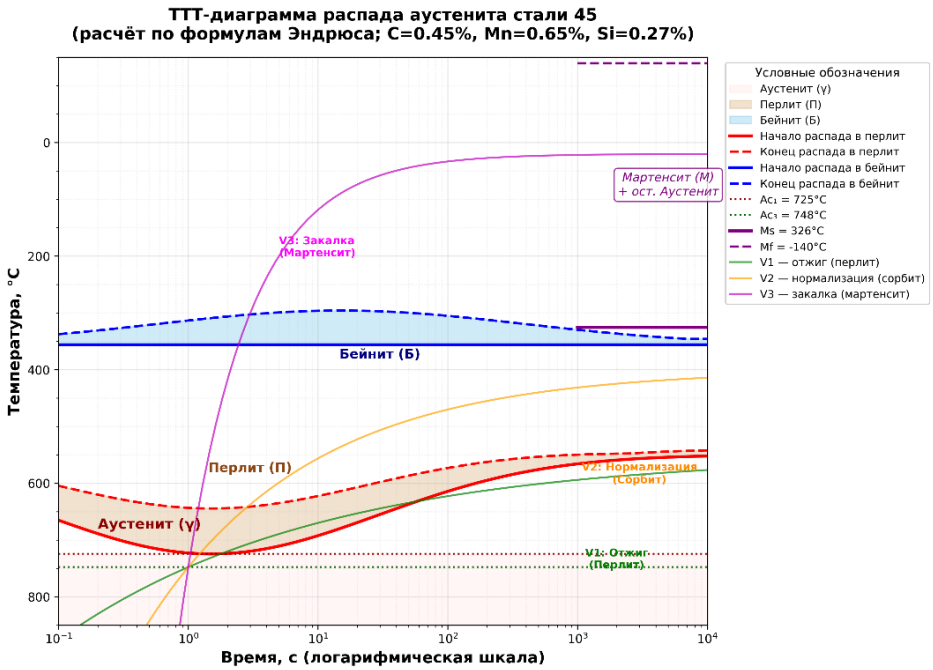


Рисунок 2. Расчётная TTT-диаграмма распада аустенита стали 45 (построена с использованием языка программирования Python с использованием библиотек: numpy, matplotlib.pyplot по формулам Эндрюса)

Отклонение рассчитанных значений от справочных данных [3, 6] не превышает 3-5%, что подтверждает высокую точность эмпирических моделей Эндрюса для данного класса сталей. Отрицательное значение точки (-140℃) указывает на то, что при охлаждении до комнатной температуры (20℃) мартенситное превращение не завершится полностью.

Доля мартенсита и твердость. Кинетика мартенситного превращения описывалась уравнением Койстинена-Марбургера [7], которое связывает объемную долю мартенсита (V_M) с температурой охлаждения (T) (5):

$$V_M = 1 - \exp\left[-\beta * (M_s - T)\right] \quad (5)$$

Расчет показал, что при охлаждении стали 45 до 20 °C объемная доля мартенсита составляет ~97%. Оставшиеся 3-5% приходится на остаточный аустенит (что согласуется с расчетной точкой M_f).

Именно наличие ~97% мартенсита отпуска объясняет экспериментально зафиксированную высокую твердость в диапазоне HRC 40–55 [1]. При этом низкий отпуск незначительно снизил твердость, но существенно повысил вязкость и пластичность материала [5].

Согласно справочным TTT-диаграммам [6], для образования мартенсита в стали 45 необходима скорость охлаждения выше критической ($V_{кр} \approx 150 - 200℃/с$). Построенная с помощью Python расчетная кривая охлаждения демонстрирует пересечение области мартенситного превращения при скоростях, превышающих Vкр, что подтверждает экспериментальную микроструктуру, полученную в работе [1].

Применение регрессионных моделей. Как показано в работах по регрессионному анализу [8, 9], использование готовых математических моделей, разработанных на основе сотен химических составов сталей, позволяет провести сравнительный анализ и спрогнозировать критические точки такие как, M_s, B_s, Ac_1, Ac_3, без необходимости формирования собственных экспериментальных датасетов. Подходы, описанные Лемзиковым А.В. и др. [11], подтверждают эффективность использования методов регрессионного анализа и нейронных сетей для прогнозирования структурных превращений и твердости в зависимости от охлаждения детали.

Анализ разброса механических свойств. Экспериментально зафиксированный разброс твердости (до 55 HRC) не является ошибкой измерения. Согласно классификации Н.Т. Гудцова и данным, приведенным в нашей предыдущей работе [1], этот разброс обусловлен реальными металлургическими факторами: влиянием скрытых примесей (O, N, H), вызывающих микроликвацию; локальной неоднородностью распределения цементита в структуре, что создает зоны с локально повышенной твердостью при индентировании.

IV. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Полученные результаты подтверждают, что комбинация классического эксперимента и современных эмпирических/термодинамических моделей является надежным инструментом анализа. В дальнейших наших работах планируется провести исследования по созданию полноценных предиктивных моделей, связывающих химический состав, параметры термической обработки и итоговые механические свойства конструкционных материалов.

ЛИТЕРАТУРА

[1] Структурные особенности конструкционной стали 45 после термической обработки / Е. С. Козик, С. А. Корчагина, А. В. Королева [и др.] // Перспективные материалы и технологии (ПМТ-2025) : сборник докладов Национальной научно-технической конференции с международным участием, Москва, 07–12 апреля 2025 года. М. : МИРЭА – Российский технологический университет, 2025. С. 433–437. EDN ABJNKF.

[2] ГОСТ 1050-2013. Металлопродукция из нелегированных конструкционных качественных и специальных сталей. Общие технические условия. М. : Стандартинформ, 2014.

[3] Гуляев, А. П. Металловедение / А. П. Гуляев. М. : Металлургия, 1986. 544 с.

[4] Thermo-Calc & DICTRA, computational tools for materials science / J. Andersson, T. Helander, L. Höglund, P. Shi, B. Sundman // Calphad. 2002. Vol. 26, No 2. P. 273–312.

[5] Материаловедение / Б. Н. Арзамасов [и др.]. М. : МГТУ им. Н. Э. Баумана, 2001. 640 с.

[6] Попова, Л. Е. Диаграммы превращения аустенита в сталях и бета-раствора в сплавах титана : справочник термиста / Л. Е. Попова, А. А. Попов. М. : Металлургия, 1991. 503 с.

[7] Empirical formulae for the calculation of some transformation temperatures / K. W. Andrews // Journal of the Iron and Steel Institute. 1965. Vol. 203. P. 721–727.

[8] A general equation prescribing the extent of the austenite-martensite transformation / D. P. Koistinen, R. T. Marburger // Acta Metallurgica. 1959. Vol. 7. P. 59–60.

[9] Regression analysis of critical temperatures and hardness prediction in steels [Electronic Resource] // Archives of Metallurgy and Materials. 2016. Vol. 2B. Mode of access : https://www.imim.pl/files/archiwum/Vol2B_2016/15.pdf. Date of access : 16.09.2026.

[10] Hardness prediction model for structural steels [Electronic Resource] // Metals. 2024. Vol. 14, No 8. Art. 881. Mode of access : https://www.mdpi.com/2075-4701/14/8/881. Date of access : 16.09.2026.

[11] Моделирование структурных превращений в углеродистых сталях / А. В. Лемзиков, Д. Г. Иванов, Н. В. Зимин, С. П. Кундас // Вестник Полоцкого государственного университета. Серия С, Фундаментальные науки. 2009. № 3. Mode of access : https://cyberleninka.ru/article/n/modelirovanie-strukturnyh-prevrascheniy-v-uglerodistyh-stalyah. Date of access : 16.09.2026.

MODELING THE MECHANICAL PROPERTIES OF STRUCTURAL MATERIALS VIA HEAT TREATMENT METHODS

Kozik E.S., Korchagina S.A, Koroleva A.V.

MIREA – Russian Technological University, Moscow, Russian Federation, korchaginasa@yandex.ru

Abstract: this paper presents a comprehensive study of the structural transformations and mechanical properties of structural steel 45 following quenching and low-temperature tempering. Experimental data on microstructure and hardness were verified using computational thermodynamics and kinetic modeling methods. The Fe-C phase diagram was constructed using Thermo-Calc software, critical points were calculated based on Andrews' empirical formulas, and martensitic transformation kinetics were described using the Koistinen-Marburger model. The calculated data were found to be in good agreement with experimental results and reference data. The causes of hardness value scatter and the prospects for using regression models to predict microstructure are discussed.

Keywords: steel 45, heat treatment, modeling, martensitic transformation, TTT diagram.