

Э.В.Приходько

ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ КРИТЕРИИ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ ВЛИЯНИЯ СОСТАВА НА СВОЙСТВА МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ СТАЛЕЙ

Институт черной металлургии НАН Украины

На основе физико-химических моделей структуры металлических систем в твердом и жидком состоянии развиваются основные положения прикладной теории комплексного легирования. Развиваемая методология физико-химического моделирования позволяет с принципиально новых позиций подойти к решению комплексного легирования.

На современном этапе научно-технической революции, связанном с созданием информационных технологий, проблема обеспечения стабильно высокого заранее заданного комплекса свойств металлопродукции за счет оптимизации её состава и технологии производства становится все более актуальной.

При разработке термодинамических и структурных теорий упорядочения в сплавах и анализе с их позиции закономерностей формирования структуры и свойств гетерофазных многокомпонентных систем обычно предполагается, что энергии взаимодействия между одними и теми же парами атомов постоянны и не зависят от состава и степени порядка в расположении атомов. Чтобы снять это грубое приближение и повысить "работоспособность" соответствующих теоретических концепций, необходимо энергию упорядочения, равно как и другие термодинамические характеристики ансамбля атомов, выразить как функцию межатомных расстояний (d) в соответствующих участках структуры. При всей внешней простоте постановки этой задачи ни фундаментальные, ни прикладные численные методы её решения до сих пор не разработаны. Для преодоления этого концептуального затруднения в работах [1,2] развит нетрадиционный подход к постановке и решению подобных задач. Его сущность сводится к расчету эффективных зарядов (Z) взаимодействующих атомов в зависимости от их реального (или предполагаемого гипотетического) кристаллографического окружения. Это понятие включает комплексный учет d всех связей в первых двух координационных сферах рассматриваемых структур в сочетании с характеристиками химической индивидуальности компонентов.

На основе развитых представлений к настоящему времени разработан комплекс идей и методик, положенных в основу физико-химических моделей структуры металлических систем в твердом и жидком состоянии [3–6]. С этих же позиций ниже развиваются основные положения прикладной теории комплексного легирования [1].

В основе подхода, с позиций которого в рамках этой теории рассматриваются вопросы, связанные с оценкой влияния межатомного взаимодействия на различные свойства, лежат два положения:

1) представление об изменчивости зарядового состояния (соответственно и парциальных термодинамических свойств) атомов каждого из компонентов в зависимости от их конкретного кристаллографического окружения;

2) как гомогенные, так и гетерофазные сплавы и растворы рассматриваются как химически единые системы, изменение состава которых влияет на комплекс их физико-механических свойств через сопутствующее изменение интегральных характеристик межатомного взаимодействия.

Конкретными следствиями этих двух отправных положений являются:

а) отказ от постулирования зарядов ионов (Z), кратности Z целым числам и представления о сферической симметрии их электронных облаков;

б) отказ от трактовки взаимодействия в твердых растворах и их расплавах как суммы реакций между отдельными их компонентами. Такие взаимодействия рассматриваются как кооперативный ионнообменный процесс, результаты которого сложным образом зависят от общего состава сплава.

Сочетание вышеизложенного означает, что электроны компонентов не обобществляются (с образованием газа свободных или почти свободных электронов), а остаются локализованными на орбиталях, связывающих каждый из атомов с окружающими его партнерами. Соответственно эффективные заряды (Z) всех компонентов изменяются не дискретно, а сообразно с характеристиками конкретного кристаллографического окружения. На основе такой трактовки элементарного акта парного взаимодействия разработаны физико-химические модели ОЦК и ГЦК – подобных структур металлических систем в твердом и расплавленном состояниях.

Основными парциальными параметрами модели являются эффективные заряды (Z_i) [$Z_i(i-j)$], так и среднестатистическое их значения ($Z_{\text{ср.}}$), характеризующее зарядовое состояние каждого из компонентов в растворе заданного состава. Его интегральными характеристиками как химически единой системы являются химический эквивалент состава (Z^y), суммирующий данные о Z компонентов с учетом вероятностей образования связей разного типа, и структурный параметр (d), пропорциональный среднестатистическому расстоянию между атомами в первой и второй координационных сферах. По физическому смыслу эти параметры подобны понятиям общеизвестных электронного и размерного факторов У.Юм–Розери, получивших широкое освещение в литературе при описании закономерностей формирования структур соединений в

зависимости от их атомного состава. В такой же мере аналогом электрохимического фактора (чаще всего электроотрицательности) можно считать среднестатистический параметр $\text{tg}\alpha$ состава, определяемый [1–3] по его парциальным значениям для атомов каждого компонента. Ниже приведены две иллюстрации потенциальных возможностей развиваемой методологии анализа свойств многокомпонентных металлических систем. В обоих случаях (табл.1 и табл.2) информация о составе сплавов закодирована в виде параметра Z^y , определяемом [1–3] как число электронов, принимающих участие в образовании среднестатистической связи между двумя атомами сплава заданного состава и являющегося его электронным химическим эквивалентом.

Таблица 1. Составы аустенитных сталей и сплавов и их химические эквиваленты (модель ГЦК).

№ пп	Si	Mn	Cr	Mo	Nb	Ni	Z^y, e
1	0,41	1,18	16,55	0,10	0,86	12,85	2,488
2	0,30	1,70	18,40	0,10	0,80	10,00	2,510
3	0,44	0,54	17,38	1,97	–	12,19	2,525
4	0,78	1,52	17,21	0,07	1,49	13,24	2,540
5	0,84	1,08	15,90	2,11	1,50	15,76	2,551
6	0,81	1,60	16,11	2,28	1,61	13,98	2,584
7	1,02	0,72	15,80	2,12	1,05	15,80	2,567
8	0,56	1,17	16,86	1,38	0,95	21,52	2,634
9	1,02	1,38	16,35	1,30	1,24	21,49	2,645

Примечание: При расчете Z^y учитывались также значимые концентрации углерода – диапазон от 0,04 до 0,12 %, кобальта – до 2,04 %, меди – 0,06+0,17 %, титана –до 0,38 % и ванадия –до 0,85 %).

Таблица 2. Состав и модельные параметры структуры аморфных металлических сплавов.

№ пп	Сплавы	Модельные параметры		№ пп	Сплавы	Модельные параметры	
		Z^y, e	$d \cdot 10^{-1}, \text{нм}$			Z^y, e	$d \cdot 10^{-1}, \text{нм}$
1	$\text{Zr}_{35}\text{Ti}_{20}\text{Co}_{45}$	0,961	3,217	15	$\text{Ni}_{50}\text{Fe}_{30}\text{P}_{14}\text{B}_6$	0,801	2,695
2	$\text{Zr}_{64}\text{Co}_{36}$	0,892	3,217	16	$\text{Ti}_{40}\text{Ni}_{60}$	0,778	3,047
3	$\text{Hf}_{80}\text{Fe}_{20}$	0,941	3,384	17	$\text{Fe}_8\text{Co}_{39}\text{Ni}_{31}\text{Si}_8\text{B}_{17}$	0,798	2,656
4	$\text{Zr}_{35}\text{Ti}_{20}\text{Co}_{25}$	0,918	3,163	18	$\text{Fe}_{62}\text{Ni}_{16}\text{Si}_8\text{B}_{14}$	0,766	2,616
5	$\text{Hf}_{62}\text{Ni}_{32}$	0,896	3,280	19	$\text{Fe}_{61}\text{Ni}_{10}\text{P}_{14}\text{B}_4\text{Si}_2$	0,761	2,737
6	$\text{Zr}_{67}\text{Co}_{17}\text{Ni}_{16}$	0,890	3,308	20	$\text{Fe}_{50}\text{Ni}_{30}\text{P}_{20}$	0,748	2,665
7	$\text{Zr}_{65}\text{Ti}_{11}\text{Ni}_{24}$	0,909	3,349	21	$\text{Fe}_{80}\text{P}_{13}\text{C}_7$	0,730	2,542

8	Zr ₇₆ Ni ₁₅ Fe ₉	0,862	3,358	22	Fe ₇₈ Si ₁₂ B ₁₀	0,709	2,584
9	Zr ₇₀ Fe ₂₀ Ni ₁₀	0,906	3,312	23	Co ₇₀ Fe ₅ S ₁₅ B ₁₀	0,722	2,591
10	Zr ₇₈ Co ₂₂	0,858	3,370	24	Fe ₈₀ P ₁₆ B ₁ C ₃	0,729	2,619
11	Mn _{5,6} Ni _{34,4} Pd ₄ oP ₂₀	0,853	2,846	25	Ni ₇₀ Fe ₁₀ P ₁₄ B ₆	0,694	2,683
12	Fe ₄₀ Ni ₄₀ P ₁₄ B ₆	0,824	2,695	26	Ni ₇₄ P ₂₆	0,669	2,658
13	Fe ₂₉ Ni ₄₉ P ₁₄ B ₆ Si ₂	0,811	2,674	27	Fe ₈₀ B ₂₀	0,630	2,617
14	Ti ₇₆ Ni ₂₄	0,752	3,136	28	Ni ₇₅ Si ₉ B ₁₇	0,593	2,576

Таблица 3. Химический состав среднелегированных высокопрочных сталей

№ спла ва	Концентрация легирующих элементов, %								Z ^y , e
	C	Si	Mn	Ni	Cr	Mo	V	Проч ие	
1	0,38	0,33	0,63	0,19	3,13	0,87	0,24	–	1,318
3	0,53	0,21	0,32	0,11	1,37	1,55	1,33	2,79W	1,356
4	0,31	0,34	0,26	–	2,74	2,98	0,53	–	1,348
5	0,32	0,36	0,24	–	3,00	3,07	0,53	1,41W	1,380
8	0,40	1,00	0,40	–	5,00	1,40	0,50	–	1,408
9	0,34	0,87	0,44	–	5,16	1,26	0,32	2,62C o	1,440
10	0,38	1,00	0,50	–	5,00	2,40	0,40	–	1,428
12	0,52	0,89	0,43	1,47	4,90	1,56	1,16	0,25Nb	1,456
13	0,46	1,10	1,13	0,14	4,92	3,70	0,50	0,08La	1,482
15	0,45	0,92	0,97	0,19	5,21	3,35	0,51	0,65W	1,476
16	0,44	1,21	0,95	0,18	5,14	3,66	0,55	0,13Nb	1,484
18	0,50	1,01	1,19	0,18	5,28	3,40	0,76	0,44Ti	1,492

В первом случае (рис.1) на диаграмме $\tau = f(Z^y)$ приведены данные одного исследования [8], во втором (рис.2) на диаграмме $\rho = f(Z^y)$ систематизированы результаты разных исследований (поэтому точки обозначены по-разному). Наблюдаемый в обоих случаях определенный диапазон колеблемости экспериментальных величин может быть уменьшен при дополнительном учете структурного (d) и электрохимического (tgα) фактора или объяснен различиями в технологии.

Зависимости типа приведенной на рис.3 для среднелегированных высокопрочных сталей (табл.3) свидетельствуют о наличии оптимального (при конкретном сочетании условий и метода испытаний) уровня легирования, превышение которого влечет за собой немонотонный характер изменения свойств. Как правило, подобные изменения связаны с изменением типа, состава и количества упрочняющих (или

разупрочняющих) фаз, процессами распада базовых структур, изменением характера распределения и взаимодействия продуктов распада между собой и матричной фазой.

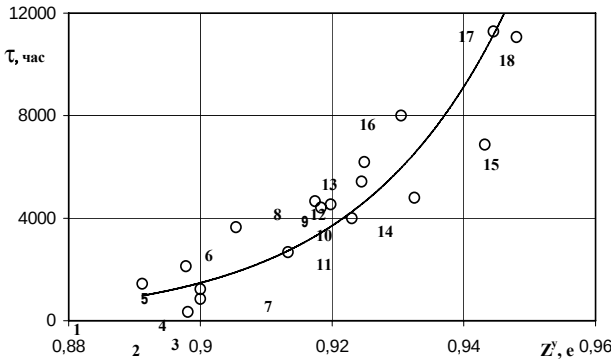
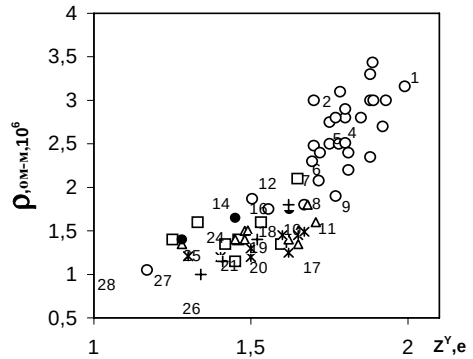


Рис. 1. Изменение времени до разрушения аустенитных сталей ($t - 600^{\circ}\text{C}$, $G - 200$ МПа) в зависимости от электронного эквивалента их состава (нумерация точек по табл.1).

Рис. 2. Зависимость электросопротивления аморфных сплавов от электронного эквивалента их состава (нумерация точек по табл.2).



Всесторонние исследования связи между характеристиками структуры и вязкости разрушения конструкционных сталей позволили выявить основные закономерности, связывающие эти характеристики [7].

Однако ввод численного критерия K_b (коэффициента вязкости) не связывался с конкретным химсоставом стали и отмечалось, что корреляции между K_b – с одной стороны, σ_b и σ_t – с другой, мало пригодны для практических целей из-за большого разброса значений K_b . В этих условиях наличие тесной корреляции между K_b и параметром Z^e , рассчитанным для среднemarkочного состава сталей, представляет несомненный интерес: рис.4 можно рассматривать как подтверждение определяющей роли химсостава (независимо от уровня прочности) в поведении сталей при динамическом нагружении.

Появление новой численной информации о процессах межатомного взаимодействия в многокомпонентных сплавах и сопоставление её с информацией о результатах этого взаимодействия в виде экспериментальных данных о различных свойствах сталей ставит на повестку дня ряд концептуально важных вопросов. С одной стороны, параметры микромира (типа Z и d) сопоставляются с макросвойствами (σ_b , δ), что с точки зрения современной металлофизики, мягко говоря, преждевременно.

С другой стороны, развитие современной теории легирования идет по пути дифференциации роли отдельных компонентов, факторов и параметров в формировании структуры и свойств сплавов. Иногда эта дифференциация столь глубока, что теряется видение общей проблемы, ради решения которой была осуществлена эта дифференциация. Этому процессу необходимо, по нашему мнению, противопоставить интеграцию влияния отдельных факторов, для чего необходимо решить проблему их свертки.

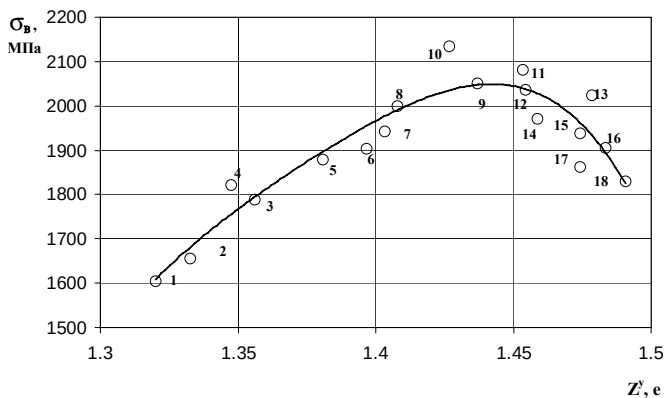


Рис.3. Изменение прочности сложнолегированных сталей (табл.3) после закалки в масле при $t=850-900^\circ\text{C}$ и последующего отпуска при $t=200^\circ\text{C}$ от химического эквивалента их состава.

В то же время, сопоставляя макросвойства с параметрами, предназначенными для обеспечения такой свертки, необходимо построить цепь гипотез, дающих приемлемое с точки зрения сложившихся представлений объяснение с позиции химизма закономерностей формирования упомянутых свойств в зависимости состава системы. Иными словами, все элементарные процессы, протекающие в металлических расплавах и продуктах их кристаллизации, должны рассматриваться как результат межатомного взаимодействия.

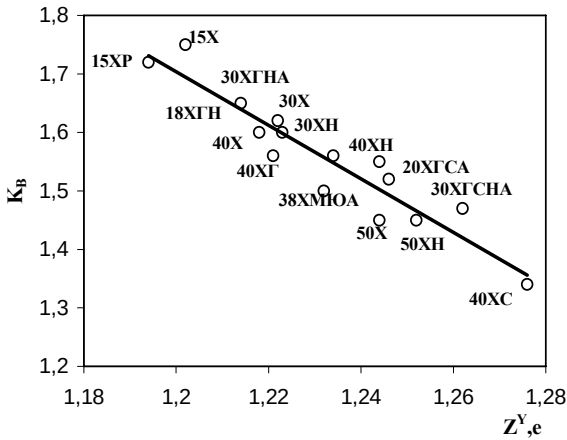


Рис.4. Соотношение между коэффициентом вязкости и химическим эквивалентом состава сталей.

Первая из развиваемых нами гипотез связана с наличием многочисленных корреляций типа приведенных на рис.3 и 4 [3–6]. Согласно ей, любую многокомпонентную гетерофазную систему $A_nB_rC_pD_k$ можно привести в гомогенное состояние

при определенной степени перегрева после расплавления. Однако и в таком состоянии характеристики прочности различных парных связей типа А–А, А–В и С–Д будут различаться между собой. Поэтому при охлаждении гомогенного расплава на каждой последующей стадии затвердевания перераспределение компонентов между матричной и формирующимися фазами будет определяться, в конечном счете, соотношением упомянутых характеристик в сосуществующих фазах. Иными словами, программа структурных превращений в затвердевающем расплаве закодирована в характеристиках межатомного взаимодействия для данной системы в гомогенном состоянии. Это объясняет природу работоспособности квазихимической модели расчета параметра Z^y в случаях, подобных рассмотренным на рис.3 и 4.

Вторая гипотеза исходит из того, что результаты межатомного взаимодействия в ряде случаев определяются не столько общим составом сплава, сколько локальными конкретными атомными сочетаниями. В результате при изучении эффектов микролегирования и модифицирования результативность прямолинейного использования сочетания параметров Z^y и d существенно снижается. Такая локализация процессов, свойственных обычному легированию, происходит в ограниченных по объему и протяженности участках структуры (как правило, это границы зерен, скопления примесей, вакансий или дислокаций).

При обсуждении таких сложных дискуссионных вопросов первоочередного внимания заслуживает оценка перспектив объяснения и конкретизации на языке теории физико-химического моделирования некоторых выработанных практикой плодотворных представлений. В частности, авторы работы [8], как и ряд других, отмечали, что

легирование стали большим количеством элементов при малом содержании каждого из них гораздо эффективнее влияет на её свойства, чем легирование одним или двумя элементами в большем количестве.

Для объяснения этих и им подобных результатов оказалось целесообразным вновь вернуться к проблеме кодирования стали и сочетаний отдельных её компонентов. На современной стадии развития методология такого кодирования, наряду с расчетом Z^y и всех сопутствующих модельных параметров [5,9] для полного состава дополнительно предусматривает расчет всех тех же критериев Z^y и d_i для:

а) заданного состава всех добавок (без железа) (Z_o^y и d_o) и

раздельный расчет для

б) матричной системы ($[C]+[Mn]+[Si]$).

Такой выбор сочетания компонентов (в качестве базы) предопределен спецификой выплавки стали; последующая доводка состава производится с учетом изначального содержания этих компонентов (Z_m^y и d_m);

в) легирующей (или микролегирующей) подсистемы ($Z_m^y \ell$ и $d_m \ell$);

г) примесной подсистемы, включающей серу, фосфор, цветные металлы и газы ($Z_{пр}^y$ и $d_{пр}$).

Различные варианты оперирования сочетаниями указанных параметров как при сопоставлении их между собой (с целью выявления общих признаков у сталей определенного целевого назначения), так и при анализе влияния различных фрагментов состава на физико-химические и служебные свойства металлопродукции подтверждают целесообразность такой дифференциации. По сути она соответствует идеологии второй гипотезы, согласно которой результаты межатомного взаимодействия определяются не только общим составом системы, но и конкретными атомными сочетаниями, роль которых может существенно изменяться в зависимости от технологии обработки стали.

Рассмотрим ряд примеров, иллюстрирующих этот тезис.

На сложившиеся к настоящему времени представления о влиянии химического состава высокопрочной стали на образование горячих трещин в процессе сварки большое влияние оказали результаты исследования [10]. Анализ этих результатов позволил установить разный характер влияния параметров $d_m \ell$ (рис.5) и d_m (рис.6) на коэффициент трещиностойкости ($K_{тр}$) высокопрочных сталей. Отсюда следует, что для обеспечения минимальных значений $K_{тр}$ состав легирующей подсистемы должен обеспечивать $d_m \ell \geq 2,95 \text{ } ^\circ A$, а содержание C, Si и Mn соответствовать $d_m = 1,8-2,0 \text{ } ^\circ A$.

Обобщение по аналогичной схеме результатов экспериментальных исследований [11] свойств металла сварных швов показало, что наиболее точно и с минимальным числом переменных эти результаты аппроксимируются уравнениями:

$$\sigma_m = 73,3Z_o^y + 627No - 143,85 \quad (r=0,95)$$

$$\sigma_\theta = 75,05Z_o^y + 592,14No - 129,2 \quad (r=0,96)$$

$$\delta = 88,8 - 28,08Z_o^y - 136,9No \quad (r=0,91)$$

где No – общее число атомов в сплаве без железа, Z_o^y – их химический эквивалент.

Для большого числа работ, оказавших заметное влияние на формирование современных представлений о влиянии состава стали на комплекс физико-механических свойств металлопродукции характерной является ориентация на использование экспериментальных данных для небольшого числа тщательно изучаемых плавочных составов различных марок сталей и сплавов. К числу таких работ относятся, в частности, монографии [12,13]. Высокий уровень достоверности данных как о составе, так и свойствах, приведенных в подобных монографиях, позволяет считать целесообразным их анализ по разрабатываемой методике несмотря на сравнительно небольшой объем информации и разные режимы деформационно-термической обработки. В первом случае исследовались сложнелегированные Cr-Co-Mo стали, содержащие от 0,3 до 18 % Ni [12], во втором [13] – наиболее широк был диапазон колеблемости концентраций хрома (от 0,1 до 17,2 %). Максимальная точность при минимальном числе переменных обеспечивается уравнениями типа $\sigma_\theta = f(Z_o^y, d_o, No)$, которые имеют вид:

$$\sigma_\theta = 253,7 - 563,7d_o + 490 \cdot Z_o^y + 1400No \quad (r=0,91) \text{ для данных [12] и}$$

$$\sigma_\theta = 139,7 - 281,3d_o + 523,5 \cdot Z_o^y + 1670,4No \quad (r=0,97) \text{ для данных [13].}$$

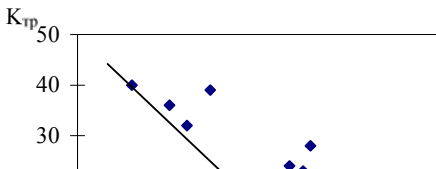


Рис.5. Зависимость $K_{тр}$ от структурного параметра d_{ml} микролегирующей подсистемы

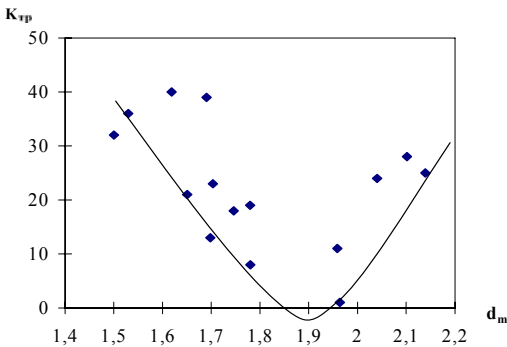


Рис.6. Зависимость $K_{гр}$ от структурного параметра d_m матрицы

Как следует из данного и других примеров, последствия изменения концентраций любого компонента (или сочетания компонентов) легирующей и примесной подсистемы в рассмотренных сталях будут проявляться через сопутствующее изменение модельных параметров состояния матричной и легирующей подсистем.

В предлагаемой схеме деления состава стали на матричный, легирующий и примесный комплексы есть много дискуссионных вопросов. Отказ от деления элементов на подобные группы в зависимости от образования ими с железом растворов внедрения или замещения выглядит нелогичным только в том случае, если речь будет идти об идеальных твердых растворах, в которых роль границ зерен и сегрегаций может каким-либо образом оцениваться по аддитивным схемам. Проиллюстрируем этот тезис конкретным примером. В работе [14] её авторы дали качественную оценку эффективности различных сочетаний легирующих и микролегирующих комплексов, расположив их в следующем порядке возрастания: 1) Mn-Si, 2) Mn-Si-Cr, 3) Cr-Ni, 4) Cr-Mo и 5) Cr-Ni-Mo. Используя этот интуитивный прогноз, мы провели серию вычислительных экспериментов. В первой состав легирующей системы был представлен в виде матрицы (табл.4), составленной по принципу равных концентраций легирующих как в упомянутых, так и в вероятных иных комбинациях. Анализ результатов этих расчетов показал, что относительная химическая активность комплекса (его мы предлагаем определять по отношению Z^y к числу атомов (N_d) – последняя колонка в табл.4) полностью совпадает с качественной оценкой авторов работы [14]: от системы Mn-Si до системы Cr-Ni-Mo идет нарастание отношения Z_d^y / N_d от 0,616 до 1,46 е/ат. Такая конкретизация, не реализуемая при других методических подходах, создает принципиально новые предпосылки для оценки эффективности комплексного легирования и микролегирования. В частности, она объясняет причины ориентации (опять же интуитивно) и американских стандартов [15] на качественные стали, микролегированные или легированные комплексом Cr- Mo- Ni. Самое высокое значение Z_d^y / N_d для комплекса Cr-Mo-V позволяет понять, почему методом проб и ошибок практики пришли к обобщающему выводу [14], что в качестве легирующей основы составов проволок для сварки высокопрочных сталей целесообразно использовать систему Cr-Mo-V.

Таблица 4. Состав и металлохимические параметры микролегирующих комплексов.

№ пп	Химсостав, ат%						Модельные параметры		
	Mn	Si	Cr	Ni	Mo	V	Z ^y , e	N _л , ат%	Z ^y /N _л
1	50	50	-	-	-	-	1,658	2,69	0,616
2	33	33	34	-	-	-	2,038	2,431	0,838
3	-	-	50	50	-	-	1,842	1,813	1,016
4	-	-	50	-	50	-	2,380	1,943	1,225
5	-	-	33	33	34	-	2,265	1,551	1,460
6	-	-	25	25	25	25	2,360	1,658	1,423
7	33	33	-	34	-	-	1,765	2,355	0,749
8	-	33	33	-	34	-	2,172	2,164	1,004
9	-	-	33	-	33	34	2,484	1,646	1,509
10	33	-	-	-	33	34	2,306	1,612	1,430

Очевидно, что соотношение концентраций различных легирующих элементов в рассматриваемых композициях может существенно изменяться, что отразится на значениях Z^y (а оно максимально опять же у эквивалентной системы Cr-Mo-V). Однако дальнейшее обсуждение этой проблемы выходит за рамки целей данной статьи.

Все вышеизложенное дает основания для проведения некоторых параллелей между системой сложившихся в теории легирования представлений и развиваемой в наших работах методологией физико-химического моделирования. К основным факторам, определяющим, например, механические свойства низколегированных сталей с ферритно-перлитной структурой обычно относятся: упрочнение твердого раствора, величина зерна, дисперсионное твердение и количество перлита. С позиций такого подхода в литературе рассматривается роль концентраций легирующих элементов и влияние различных технологических параметров на свойства сталей этого типа. Как правило, комплексное теоретическое рассмотрение и учет роли каждого из упомянутых выше факторов и параметров производится по аддитивной схеме, что нашло свое отражение в различных модификациях уравнения Петча-Холла типа выражения для предела текучести:

$$\sigma_m = \sigma_{т.р.} + \sigma_{д.у.} + \sigma_{в.т.} + \sigma_{д.т.} + \sigma_{суб.} + \sigma_{текс.} + K_y \cdot d^{1/2},$$

где $\sigma_{т.р.}$ и $\sigma_{д.у.}$ - твердорастворное и дислокационное упрочнения; $\sigma_{в.т.}$, $\sigma_{д.т.}$, $\sigma_{суб.}$, $\sigma_{текс.}$ - упрочнения соответственно за счет внутреннего трения решетки, дисперсионного твердения, субструктуры и текстуры, d - диаметр зерна, K_y - коэффициент, характеризующий напряжение активации движения дислокаций.

Раскрытие физико-химического содержания каждого из выходящих в рассматриваемое уравнение параметров в конечном счете, прямо или косвенно, связано с анализом процессов межатомного взаимодействия в

сосуществующих фазах с учетом предыстории их формирования и при современном уровне наших знаний численной расшифровки не поддается. Развиваемая методология физико-химического моделирования позволяет с принципиально новых позиций подойти к решению этой задачи.

1. *Приходько Э.В.* Эффективность комплексного легирования сталей и сплавов. – К.: Наукова думка, 1995. – 286 с.
2. *Приходько Э.В.* Методика определения параметров направленного межатомного взаимодействия в молекулярных и кристаллических соединениях. // Металлофизика и новейшие технологии. 1995, № 11. – С.54–60.
3. *Приходько Э.В.* Металлохимия многокомпонентных систем. – М.: Металлургия, 1995. – 320 с.
4. *Приходько Э.В., Гармаш Л.И.* Влияние параметров направленной химической связи в расплавах на структуру и свойства кристаллизующихся соединений. // Расплавы, 1996, № 2. – С.62–68.
5. *Приходько Э.В., Петров А.Ф.* Физико-химические критерии для оценки степени микронеоднородности металлических расплавов // Металлофизика и новейшие технологии. 1998, т.20, № 7. – С.64–74.
6. *Prikhod'ko E.V., Moroz V.F.* The role of the atomic interaction directionality in formation of structures and properties of compound// Functional Materials. 2000.7, №4(2), p.867–892.
7. *Мешков Ю.Я., Пахаренко Г.А.* Структура металла и хрупкость стальных изделий. – К.: Наукова думка, 1985. – 268 с.
8. *Еришов Г.С., Бычков Ю.Б.* Физико-химические основы рационального легирования сталей и сплавов. – М.: Металлургия. – 1982. – 360 с.
9. *Приходько Э.В., Мороз В.Ф.* Физико-химические критерии для "свертки" информации о составе расплавов и соединений металлов. В сб. "Фундаментальные исследования физико-химии металлических расплавов". – М.: ИКЦ "Академкнига", 2002. – С.275–283.
10. *Коттрелл К.Л.* Требования, предъявляемые к высокопрочной стали. – В кн.: Высокопрочная сталь. – М., Металлургия, 1965. – С.9–23.
11. *Касаткин Б.С., Мусияченко В.Ф.* Низколегированные стали высокой прочности для сварных конструкций. – Изд. Техника.– Киев. – 1970. – 200 с.
12. *Панасюк В.Ф., Андрейкив А.Е., Ковчик С.Е.* Методы оценки трещиностойкости конструкционных материалов. – К.: Наукова думка, 1977.– 277 с.
13. *Трощенко В.Т., Покровский В.В., Прокопенко А.В.* Трещиностойкость металлов при циклическом нагружении. – К.: Наукова думка, 1987.– 256 с.
14. *Бабаскин Ю.З., Шипицын С.Я., Афтандиянц Е.Г.* Экономное легирование стали. – К.: Наукова думка. – 1987. – 185 с.

15. *International Comparison of Standard. – Materials. – 1997.*