

УДК 621.723

DOI: 10.30977/BUL.2219-5548.2020.91.0.58

## КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ПЕРЕРОЗПОДІЛУ АЗОТУ В ТЕХНОЛОГІЯХ КОМПЛЕКСНОГО ІОННОГО АЗОТУВАННЯ ЛЕГОВАНИХ СТАЛЕЙ

Шевченко С.М., Терлецький О.С., Горова О.П.,  
Соболь О.В., Протасенко Т.О., Реброва О.М.

Національний технічний університет «Харківський політехнічний інститут»

**Анотація.** Робота присвячена моделюванню за допомогою COMSOL Multiphysics 5.5 перерозподілу азоту в деталях з легованої сталі 9ХС у процесі їхнього ізотермічного відпалу або витримання під гартування після операції іонного азотування. Така технологія комплексного іонного азотування також передбачає низький відпуск після гартування та фінішну механічну обробку поверхні й має низку переваг порівняно з традиційними способами азотування. Для комплексного іонного азотування дуже актуальні оцінка і прогноз глибини проникнення азоту, тому моделювання проводили з метою дослідження дифузійного перерозподілу азоту в циліндричних пуансонах зі сталі 9ХС за умови температури 860 °С, які мали на поверхні готовий азотований шар завтовшки 80 мкм. Показано, що в зоні різальної кромки (окружності торця) пуансона спостерігається ефект підвищеного вмісту азоту в процесі його перерозподілу. Встановлено, що за прийнятих припущень перетворення  $\epsilon$ -нітриду в азотистий аустеніт відбувається за 3,25 хв. Отримані концентраційні профілі перерозподілу азоту за умови різного часу витримання, які можуть застосовуватися для прогнозування в заводській практиці.

**Ключові слова:** комплексне іонне азотування (КІА), сталь 9ХС, моделювання, дифузія азоту, легований аустеніт,  $\epsilon$ -нітрид,  $\alpha$ -ферит.

### Вступ

Однією з широко розповсюджених технологій модифікації поверхні сталевих деталей є азотування. Незважаючи на великий і багаторічний досвід використання цієї технології, вона є актуальною і завдяки її постійному вдосконаленню за рахунок модернізації і створення нових методів насичення азотом.

### Аналіз публікацій

Серед нових методів насичення азотом для зміцнення металевих поверхонь лідером є іонне азотування з використанням низькотемпературної плазми [1–4], яке дозволяє прискорити процес насичення деталей азотом. І хоча цей процес за десятиріччя є дуже розроблений [5–10], адже і в поточний час тривають публікації, що розвивають і моделюють традиційні, здебільшого низько- (450–600 °С) та рідше – високотемпературні (800–950 °С) режими методу [11–18]. Для кожного з них характерні як свої переваги, так і недоліки, тому в останній період запропоновані методи комплексної технології азотування деталей різного призначення. Відомі такі комплексні технології:

а) газо- і термогазоциклування, що полягає в періодичному змінні циклів насичення і розсмоктування азотованого шару за

умови мінімального рівня азотного потенціалу атмосфери, що насичує [19];

б) комплексне іонне азотування (КІА) [20].

Технологія КІА складається з таких операцій: низькотемпературне іонне азотування, високотемпературний нагрів під гартування або відпал з бажано повним розчиненням нітридних фаз, гартування, як правило, з низьким відпуском, а також, зазвичай, механічна обробка поверхні деталі [20, 21]. Треба відзначити, що для КІА дуже важливий етап – це перерозподіл концентрації азоту в глибину деталі в процесі високотемпературного нагріву, що для окремих сталей моделювалося під час термоактивування [9, 12] та відпалу [22, 23].

У разі інструментальних сталей, зокрема 9ХС, низка переваг має саме технологія КІА, у процесі якої після низькотемпературного азотування нагрів під гартування поєднується з подальшим дифузійним насиченням з отриманого азотованого шару. Порівняно з високотемпературним азотуванням такий комплекс забезпечує на глибині підвищену концентрацію азоту за умови рівної температури й оптимального часу нагріву, а в разі рівної товщини кінцевого шару – менший час, що обмежує небажане зростання зерна

аустеніту. Відзначимо, що такі процеси перерозподілу азоту належать до нестационарних режимів, тобто підкоряються другому дифузійному закону Фіка. Очевидно, що для комплексної технології дуже важливе значення має оцінка і прогнозування глибини проникнення азоту під час нагріву після азотування.

### Мета і постановка завдання

Метою моделювання є дослідження дифузійного перерозподілу азоту в деталях з легваної сталі 9ХС у процесі їхнього ізотермічного нагріву після операції іонного азотування в межах комплексної технології.

### Матеріал та етапи моделювання

**1) Матеріал.** Моделювання проводили на прикладі деталі пуансон зі сталі 9ХС (0,9 С; 1,1 Cr; 1,4 Si % (мас.)), робоча частина якого має діаметр  $d = 2$  мм. Іонне азотування здійснювали за температури 540–560 °С за 1 год, тому глибина азотованого шару на боковій циліндричній поверхні й на торці зверху в середньому становила 80 мкм. Азотований шар зовні складається з  $\epsilon$ -нітридів (до 30 мкм) та глибше, до 50 мкм, – легваної азотом  $\alpha$ -фази (фериту) – рис. 1. За загальним вмістом азоту в деталі, його концентрація у нітридному шарі розрахунково становила 8,7 % (мас.).

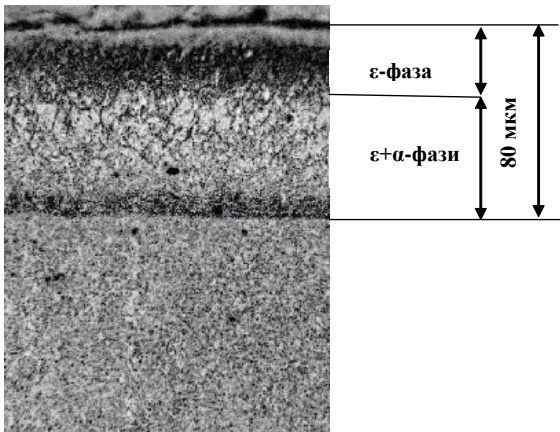


Рис. 1. Мікроструктура сталі після іонного низькотемпературного азотування (x200)

Наступний нагрів та ізотермічне витримування відбувалося за температури гартування  $T_n = 1133$  К ( $t_n = 860$  °С), інші технологічні параметри КІА надані в [21].

**2) Аналіз фазових співвідношень.** Насамперед була проведена оцінка фазових границь за температури  $T_n$ . За рівноважного фазового стану систем Fe-N та Fe-N-C у

публікаціях останнього періоду, наприклад [11, 13, 14], як правило, цитуються оглядові експериментальні [24] і розрахункові роботи [25–27]. На рис. 2 наведено якісно виконана діаграма стану Fe-N [11], що побудована за даними Wriedt H.A. [24], які використовуються в [26] та інших довідниках фазових рівноваг.

На діаграму (рис. 2) вгорі праворуч нами додана масштабована ділянка азотистого аустеніту ( $\gamma$ ) та  $\epsilon$ -нітриду заліза за даними [13], яка в координатах молярна частка–температура (К) ілюструє сучасний стан на цій ділянці системи Fe-N.

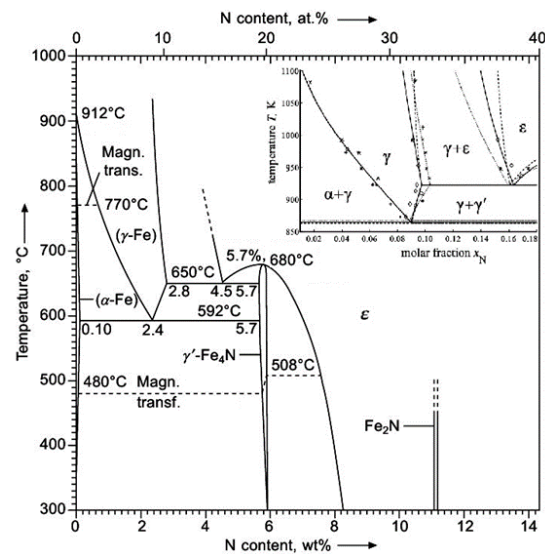


Рис. 2. Діаграма стану Fe-N [11] спільно з масштабованою її ділянкою [13]

Теоретичні криві [13, 25, 27] й експериментальні точки різних авторів показують істотну невизначеність концентрацій двофазної рівноваги ( $\gamma + \epsilon$ ) за температури  $T_n$ . Аналогічні дані наведені і в роботі [14], що дозволяє цю концентраційну невизначеність по азоту за умови  $t_n = 860$  °С оцінити значенням не меншим ніж  $\pm 0,01$  атомної або молярної частки. Відзначимо, що як до цього, так і далі припускали, що % (ваг.) = % (мас.). Перерахунки між атомними ( $atX_i$ ) та масовими ( $msX_i$ ) частками елементів ( $X_i$ ) з атомною масою ( $mX_i$ ), що входять до складу сталі, проводили за відомими рівняннями [16, 26]:

$$atX_i = (msX_i/mX_i)/\sum_i(msX_i/mX_i). \quad (1)$$

$$msX_i = atX_i \cdot mX_i/\sum_i(atX_i \cdot mX_i). \quad (2)$$

Відповідно (1), склад сталі 9ХС становить: 4,0 С; 1,1 Cr; 2,7 Si % (ат.). Щодо пот-

рійної системи Fe-N-C, то сучасні та попередні дані [13, 14, 25–27] основну увагу приділяють низькотемпературному азотуванню – ізотермічні перерізи не перевищують 700 °C і мають також, але менший, розкид між значеннями за теорією та експериментом. Винятком можна вважати більш вагомі розрахунки Ду Н. [25], у яких наведено політермічний переріз системи за умови 0,5 % (мас.) вуглецю – рис. 3.

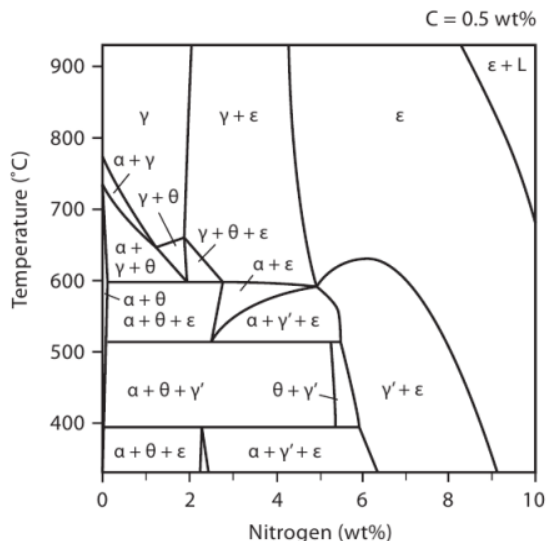


Рис. 3. Політермічний переріз системи Fe-N-C за умови 0,5 % (мас.) C [25]

З цієї потрібної діаграми отримуємо оцінку фазової рівноваги ( $\gamma + \epsilon$ ) по азоту за температури  $t_n$  значеннями 2,0 та 4,3 % (мас.), та відповідно їм за рівнянням (1) 7,4 та 15 % (ат.) із похибкою  $\pm 1$  % (ат.).

Також, як бачимо, за температури  $t_n$  у твердому стані, маємо тільки дві зазначені фази. У цьому випадку атоми C та N з аустенітом у потрібній системі формують твердий розчин проникнення, а  $\epsilon$ -нітрид має стехіометрію  $\text{Fe}_2(\text{C}, \text{N})_{1-z}$  і також є фазою проникнення непостійного складу. За відсутності відповідних даних для сталі 9ХС було припущено: за умови 0,9 % (мас.) вуглецю і заміщення атомів Fe елементами Cr та Si, фазові границі ( $\gamma + \epsilon$ ) суттєво не змінюються.

З діаграми (рис. 3) видно, що шар  $\epsilon$ -нітридів у процесі нагріву до  $t_n$  не змінює свій фазовий склад, а вищезазначеному в ньому вмісту азоту 8,7 % (мас.) за формулою (1) відповідає значення 27 % (ат.). Розташований глибше шар легованого азотом  $\alpha$ -фериту в разі нагріву до  $t_n$  швидко поліморфно перетворюється в легований азотом аустеніт. Його склад за азотом оцінювали за

достатньо детальними границями феритної зони за температур  $t < 592$  °C [13], що в середньому для цього шару становило 0,2 % (ат.) (0,05 % (мас.)). Також поліморфно перетворюється, але в безазотистий аустеніт, внутрішня феритна матриця пуансона. Наведене, зазначимо, відповідає даним рис. 3 у процесі азотування за умови температур 500–600 °C.

### 3) Аналіз дифузійних параметрів.

Для твердих розчинів проникнення швидкість дифузії контролюється її коефіцієнтом  $D$ , який описується законом Арреніуса [6, 11]:

$$D = D_0 \cdot \exp\left(-\frac{Q}{RT}\right), \quad (3)$$

де  $D_0$  – передекспоненціальний множник,  $Q$  – енергія активації,  $R$  – універсальна газова стала,  $T$  – абсолютна температура.

Як і за фазовими границями, більшість даних за дифузійними параметрами складових фаз присвячена низькотемпературному інтервалу. Дотепер спостерігається певний розкид значень, що застосовуються. Вплив складу сталі нерідко враховується емпіричними коефіцієнтами [15], що отримують за даними зростання товщини нітридних шарів та дифузійної зони, які модифікують та ускладнюють форм. (3). Стосовно  $\epsilon$ -нітриду доволі часто використовують такі дані:  $D_0 = 2,1 \cdot 10^{-8}$  м<sup>2</sup>/с;  $Q = 93,5$  кДж/моль [17, 18]. Для аустеніту заліза, низьколегованих сталей сучасна робота [28] пропонує використовувати:  $D_0 = 7 \cdot 10^{-4}$  м<sup>2</sup>/с;  $Q = 166$  кДж/моль. Але в цьому та інших більш ранніх дослідженнях застосовуються експериментальні дані щодо аустеніту, наведені в роботі Grabke H. J., Petersen E. M. (1978), в якій  $D_0 = 7 \cdot 10^{-5}$  м<sup>2</sup>/с, що і було взято за основу.

4) Математична модель процесу дифузії в процесі ізотермічного витримування. Моделювання проводилося методом кінцевих елементів у пакеті прикладних програм для моделювання фізичних задач COMSOL Multiphysics 5.5 у математичному блоці класичних диференціальних рівнянь.

За температури  $t_n$ , за загальним вмістом азоту в деталі, її рівноважному стану відповідає низьколегований азотом аустеніт (див. рис. 3). Але атоми N містить тільки азотований шар: твердий розчин проникнення азоту в аустеніт та  $\epsilon$ -нітрид. Тому в процесі ізотермічного витримування повинен відбуватися нестационарний дифузійний перерозподіл азоту з поверхні в глиб пуансона. Це опису-

ється тривимірним диференціальним рівнянням, другим законом Фіка [6, 11], відповідно до якого швидкість зміни концентрації в твердому розчині дорівнює:

$$\frac{\partial C}{\partial \tau} = D \left( \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} \right), \quad (4)$$

де  $C$  – концентрація азоту в точці з координатами  $x, y, z$  у момент часу  $\tau$ .

Згідно з підрозд. 2), у разі постійної температури  $T_n = 1133$  К та для часу  $\tau = 0$ , отримуємо такі концентраційні початкові умови для внутрішніх зон аустеніту, шару азотистого аустеніту та шару  $\epsilon$ -нітриду відповідно: 0; 0,2 та 27 % (ат.). За припущенням відсутності масообміну із зовнішнім середовищем, приходимо до окремого випадку граничних умов II роду – нормально зовнішньої поверхні ( $S$ ) густина потоку атомів N у кожній її точці за часом  $j_{N,S}(\tau)$  дорівнює:

$$j_{N,S}(\tau) = 0. \quad (5)$$

Із (5) впливає також незмінність середньої концентрації азоту  $C_N$  із часом за умови початкового її значення  $C_0$ :  $C_N = C_0 = \text{const}$ . За рівнянням (3) та наведеними дифузійними параметрами застосовували значення коефіцієнтів  $D$  відповідних фаз за температури  $T_n$ .

Зазначимо, що в дифузійних розрахунках за рівнянням (4) у твердих розчинах проникнення з великими концентраціями коректно застосовувати атомні або молярні частки (відсотки) атомів проникнення щодо атомів решітки металеві основи [11]. Із загального визначення атомної частки неважко довести, що це значення ( $atN$ ) для азоту в нашій сталі пов'язане з його атомною часткою відносно металеві основи ( $atN_{Me}$ ) за рівнянням:

$$atN_{Me} = atN / (1 - atC - atN), \quad (6)$$

де  $atC$  – атомна частка вуглецю відповідно (1).

Із вищезазначеного, початкові умови для змінного за концентрацією азоту у програмі COMSOL 5.5 задавали відповідно (6). Результати моделювання виводили в додаткову змінну для звичайних атомних часток, яку розраховували із зворотнього до (6) рівняння:

$$atN = atN_{Me} \cdot (1 - atC) / (1 + atN_{Me}). \quad (7)$$

Моделювання проводили у двох режимах. В об'ємному 3D-режимі виконували оцінку

моделювання процесів перерозподілу азоту в глибину деталі за короткий час, без урахування фазових перетворень у шарі  $\epsilon$ -нітриду. Особлива увага в цьому випадку приділялась зоні торця пуансона. У двовимірному 2D-режимі проводили більш детальне моделювання з урахуванням поступового перетворення шару  $\epsilon$ -нітриду в аустеніт.

5) **Геометрична модель.** 3D- та 2D-побудови проводили в ядрі COMSOL kernel. Геометрична модель 3D (рис. 4) для азотованих циліндричних деталей (пуансон) за діаметром основи 2 мм є циліндром з торцем зверху. З торця та бокової поверхні засобами програми виділяли шар завглибшки 30 мкм, який відповідав  $\epsilon$ -нітриду. Далі на глибину 50 мкм виділяли шар, що відповідав легваному азотом аустеніту, а решта, основний внутрішній об'єм, – безазотистому аустеніту. Початкові умови – відповідно до підрозділу 4. Концентраційні профілі за незначний час витримування аналізували на осьовому перерізі.

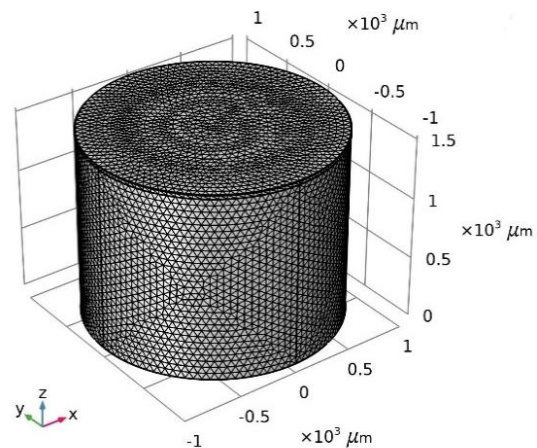


Рис. 4. Геометрична кінцево-елементна 3D-модель

Більш детальне моделювання дифузії азоту з циліндричної поверхні пуансона в глибину, з урахуванням поступового перетворення  $\epsilon$ -нітриду поверхневого шару в аустеніт, розраховували як двовимірну задачу. Її основою був переріз поперек осі циліндра вдалині від торця. Правий край геометричної 2D-моделі з центром координат (мкм) у центрі кола представлено на рис. 5.

Для урахування перетворень шар  $\epsilon$ -нітриду був розділений на десять підшарів завтовшки 3 мкм кожний. Далі вглиб – аналогічно 3D-моделі.



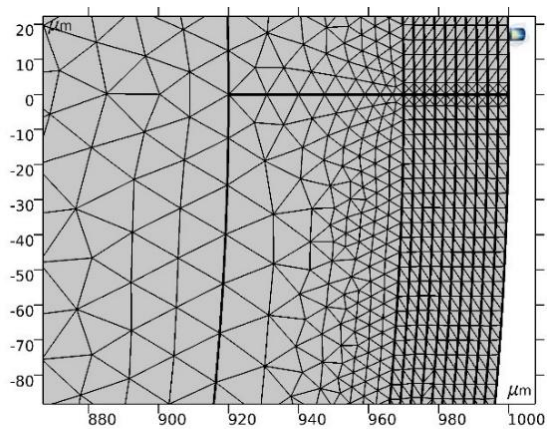


Рис. 5. Геометрична кінцево-елементна 2D-модель

#### б) Моделювання фазових перетворень.

Алгоритм моделювання полягав у поетапній (із зупинками розрахунку) передачі отриманого концентраційного профілю до наступного етапу з перенормуванням коефіцієнта  $D$ . Шляхом варіювання часу розрахунків на першому етапі знаходили таке його мінімальне значення, коли по всій товщині внутрішнього підшару  $\epsilon$ -нітриду концентрація азоту впаде нижче за фазову границю, відповідно підрозділу 2 – 15 % (ат.). У разі зупинення розрахунку на знайденому часі внутрішньому підшару надавали дифузійні параметри аустеніту. Аналогічно продовжували для наступних внутрішніх підшарів та етапів. На кінцевому етапі, коли останньому (зовнішньому десятому) підшару задали значення  $D$  (коефіцієнт дифузії) аустеніту, одним розрахунком отримали концентраційні дані для наступних додаткових інтервалів часу.

Така схема моделювання перетворення обґрунтована тим, що в процесі ізотермічного витримування шарів нітридів, на відміну від їхнього зростання під час азотування, з боку розчинення, як правило, не спостерігається чітка та плоска міжфазна границя [11, 14]. Тобто, зародки нової фази в процесі перетворення нітриду формуються як на фронті розчинення, так і всередині його крайніх зерен. З наведеного передбачали, що коли по всій товщині підшару (3 мкм) вміст азоту впаде нижче ніж 15 % (ат.), то металевою матрицею в ньому буде аустеніт із залишками включень  $\epsilon$ -нітриду. Тому в цьому підшарі допустимо деяке перевищення вмісту азоту фазової границі аустеніту. Зрозуміло, що мінімальна товщина підшарів пов'язана з розміром нітридних зерен і не може бути значно меншою за них.

### Результати моделювання й експериментальних досліджень

1) **3D-моделювання.** Як зазначалося, концентрація азоту в нітридному поверхневому шарі пуансона на торці (зверху) та боковій поверхні становила 27 % (ат.) (8,7 % (мас.)). Результати його перерозподілу за  $t_n = 860^\circ\text{C}$  надані контурними графіками на рис. 6.

Програмні можливості дозволяли комбінувати шкали атомного вмісту. Тому для осевого перерізу на рис. 6, а саме – середніх зон торця і бокових поверхонь, задіяна контурна шкала до досягнутих 16 % із кроком 3 % (ат.). У зоні окружності основи циліндра деталі (верхнього торця) спостерігається більший вміст азоту. Тому для цієї зони на осевому перерізі, поверхнях торця та циліндричній боковій задіяна шкала від 17 % до досягнутих на окружності 22 % із кроком 1 % (ат.).

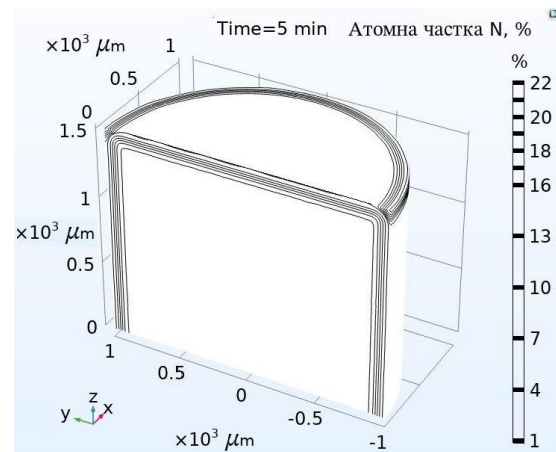


Рис. 6. 3D-моделювання розподілу концентрації азоту через 5 хв витримування

За умови часу витримування від десятків секунд до кількох хвилин, коли не потрібно враховувати фазові перетворення, закономірно зростає глибина проникнення азоту та спадає його вміст на поверхні. У цьому випадку в зоні окружності завжди спостерігався підвищений вміст азоту. Оцінки свідчать, що в цій зоні, на глибині до 25 % від загальної досягнутої товщини дифузійного насичування, є не менше ніж півтора кратне перевищення вмісту порівняно із його значеннями на тих же глибинах, але вдалині.

Таке відносне перевищення концентрації азоту зберігається і в разі більшого часу витримування – рис. 7.

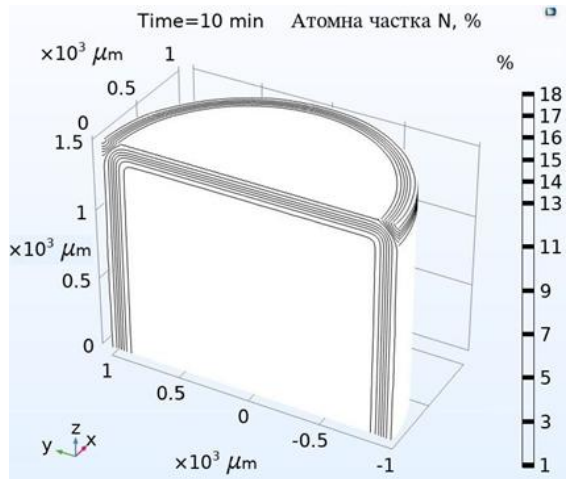


Рис. 7. 3D-модель розподілу концентрації азоту через 10 хв витримання

Як свідчать контури рис. 7, на окружності торця вміст атомів N упав до 18 %, на зовнішніх поверхнях вдалині – до 13 % (ат.). Загалом, у разі такого часу витримання потрібно враховувати розчинювання нітриду. Однак цей ефект, але з меншим перевищенням, спостерігався і в процесі 3D-модельовання зразка, що мав замість шару нітридів шар азотованого аустеніту. Наведене свідчить на користь того, що в зонах перетину поверхонь, зовнішніх ребер спостерігається геометричний ефект підвищеного вмісту під час перерозподілу, що повинно враховуватися фінішною механічною обробкою.

**2) 2D-модельовання.** У цьому режимі, завдяки більш дрібним кінцевим елементам на перерізі поперек (рис. 5), у процесі перерозподілу азоту враховували фазові перетворення  $\epsilon$ -нітриду (підрозд. б), що цілком достатньо для вирішення задачі дифузії в симетричній деталі. Були отримані залежності вмісту азоту за глибиною в перерізі, тобто радіальний розподіл, для різного часу витримання за умови  $t_{\text{н.}} = 860$  °С. Для наочності, радіальне розміщення підшарів  $\epsilon$ -нітриду (3 мкм), починаючи з внутрішнього, на наступних рисунках позначено цифрами 1–10 відповідно в інтервалі радіусів ( $R$ ) 970–1000 мкм. За умови менших значень  $R$ , нагадаємо, знаходиться аустеніт. Варіювання часу витримання проводили з розрізненням 0,25 хв.

У кінці першої хвилини витримання (перший етап) по всьому підшарі 1 вміст азоту впав нижче за фазову границю 15 % (ат.) (рис. 8).

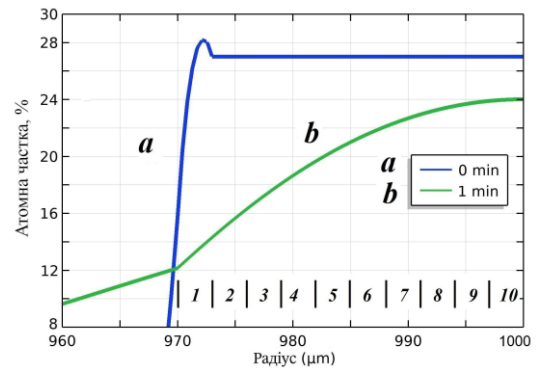


Рис. 8. Радіальний розподіл азоту по перерізу пуансона на початку (а) і в кінці (б) першого етапу (1 хв)

Профіль *a* на рис. 8 відповідає початковому стану, у нульовий момент часу, зі збагаченим азотом  $\epsilon$ -нітридом на глибину 30 мкм від поверхні. Відзначимо, що злам на кривій *b* за умови  $R = 970$  мкм відображає рівність потоків азоту через міжфазну поверхню складових фаз, у яких різні коефіцієнти  $D$ . На зупинці розрахунку в кінці першого етапу підшару 1 задали значення  $D$  аустеніту.

На наступних трьох етапах у підшарах 2, 3 та 4 вміст азоту знижувався нижче за фазову границю за пів хвилини витримання. Як і на першому, у кінці кожного із зазначених етапів відповідним підшарам задавали значення  $D$  аустеніту. Накопичений на попередніх етапах час витримки у хвилинах наведено на легенді рисунків першою цифрою – рис. 9–11.

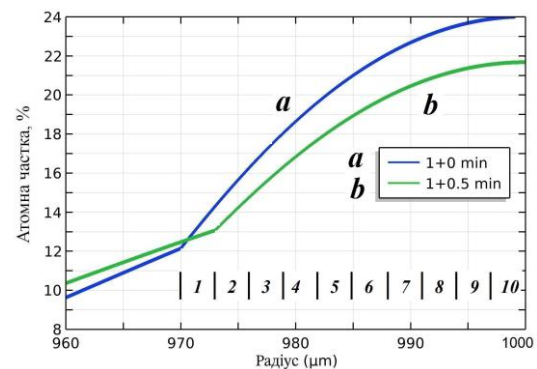


Рис. 9. Радіальний розподіл азоту на початку (а) і в кінці (б) другого етапу (0,5 хв)

Як видно з рис. 11, за 2,5 хв витримання концентрація азоту на поверхні деталі знижується з 27 до 18 % (ат.). Дифузійна довжина у цьому випадку, тобто – глибина перерозподілу, перевищує 100 мкм. Зрозуміло

також, що крива *b* на поточному рисунку є та сама, що й крива *a* на наступному.

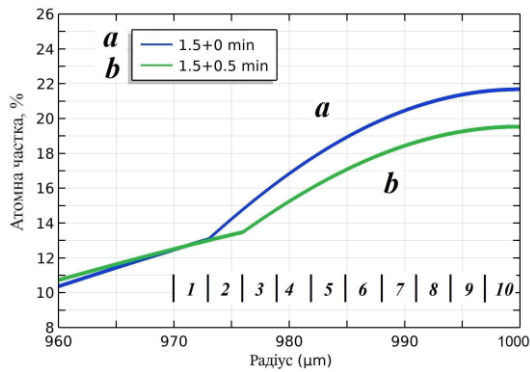


Рис. 10. Радіальний розподіл азоту на початку (*a*) і в кінці (*b*) третього етапу (0,5 хв)

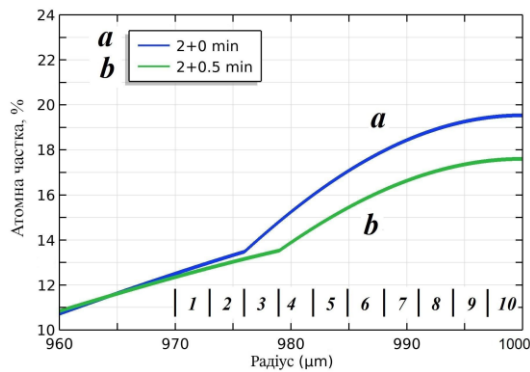


Рис. 11. Радіальний розподіл азоту на початку (*a*) і в кінці (*b*) четвертого етапу (0,5 хв)

За наступні 0,5 хв витримування (за умови кроку часу 0,25 хв) вміст азоту знизився порівняно від фазової границі в підшарах 5 і 6 (рис. 12).

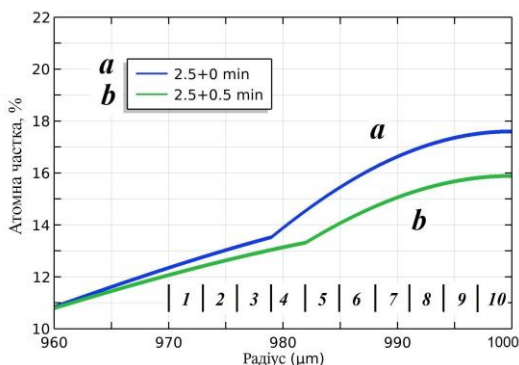


Рис. 12. Радіальний розподіл азоту на початку (*a*) і в кінці (*b*) п'ятого етапу (0,5 хв)

Відзначимо, що в процесі витримування знижуються не тільки концентрації радіального профіля, але і їхній градієнт. Тому за

наступні 0,25 хв вміст азоту зменшився нижче за фазову границю в останніх чотирьох підшарках 7–10 (рис. 13).

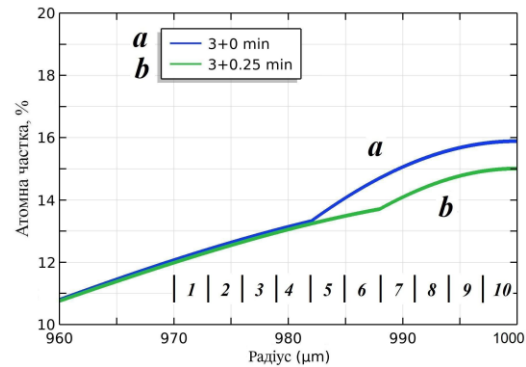


Рис. 13. Радіальний розподіл азоту на початку (*a*) і в кінці (*b*) шостого етапу (0,25 хв)

У кінці шостого етапу, із загальним часом витримування 3,25 хв, усі підшари колишнього  $\epsilon$ -нітриду мали значення  $D$  аустеніту. Отже, для фазового перетворення структури  $\epsilon$ -фази в аустеніт, за умови зазначених параметрів та припущень, необхідно витримувати деталь за температури гартування більше ніж 3,25 хв.

На останньому, сьомому, етапі одним розрахунком отримали концентраційні профілі дифузії азоту з моменту фазового перетворення на інтервалі часу витримування на інтервалі часу витримування 3,25–63,25 хв із кроком 5 хв. Частина цих даних наведена на рис. 14.

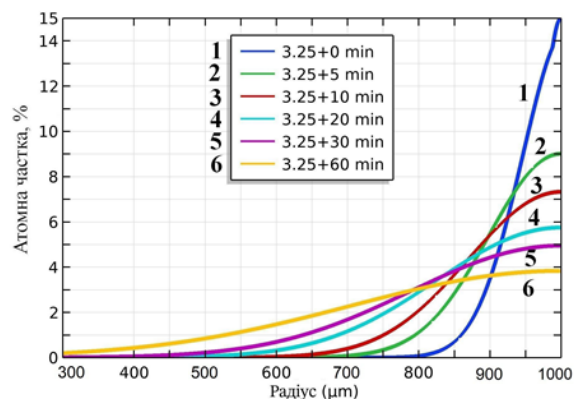


Рис. 14. Радіальний розподіл азоту з моменту фазового перетворення за умови різного часу витримування на сьомому етапі

Як випливає з наведених даних, на цьому етапі моделювання поверхневий шар азотистого аустеніту завтовшки 30 мкм є постачальником азоту в більш глибокі зони пуансона. З практичної точки зору корисні також

дані про поверхневу концентрацію азоту та його дифузійну довжину від загального часу витримування – табл. 1.

Таблиця 1 – Поверхнева концентрація азоту та його дифузійна довжина за умови  $t_n = 860\text{ }^\circ\text{C}$

№	Час витримування $\tau$ , хв	Концентрація азоту, ат %	Дифузійна довжина, мкм
1	3,25	15	200–225
2	8,25	9,0	300–325
3	13,25	7,2	350–400
4	23,25	5,9	450–500
5	33,25	5,0	550–625
6	63,25	3,9	700–750

**3) Експериментальні дані.** Вищенаведене моделювання свідчить, що наявність нітридного шару, навіть у разі поступового розчинення, зменшує середнє значення концентраційного профілю азоту в аустеніті та, як наслідок, – і після завершення його розчинення. Але водночас глибину дифузійного насичення, яка дає помітне збільшення мікротвердості (рис. 15, 16), суттєво не знижує.

Мікроструктура пуансона зі сталі 9ХС після КІА представлена на рис. 15. Твердість цієї сталі після класичної термічної обробки без азотування становить 7000 МПа. Унаслідок КІА середня мікротвердість пуансонів за умови  $d = 2\text{ мм}$  стає 8700 МПа, її зростання спостерігається по всій глибині – рис. 16.

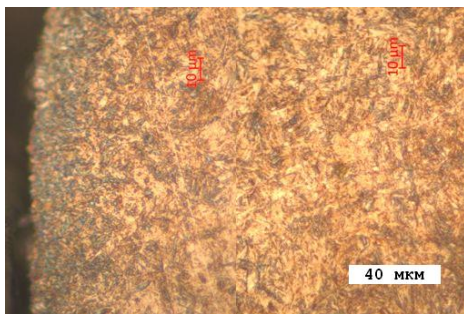


Рис. 15. Мікроструктура пуансона (поперек,  $d = 2\text{ мм}$ ) зі сталі 9ХС після КІА

Аналіз дифракторентгенограм (рис. 17) виявив, що структура сталі складається здебільшого з  $\alpha$ -фериту та  $\gamma'$ -фази ( $\text{Fe}_4\text{N}$ ).

Наявність у мікроструктурі зразків зі сталі 9ХС (після КІА із застосуванням гартування та відпуску)  $\alpha$ -фериту та  $\gamma'$ -фази ( $\text{Fe}_4\text{N}$ ), разом із значеннями мікротвердості, свідчить про глибинне азотування з концентрацією азоту близько 1 % (мас.).

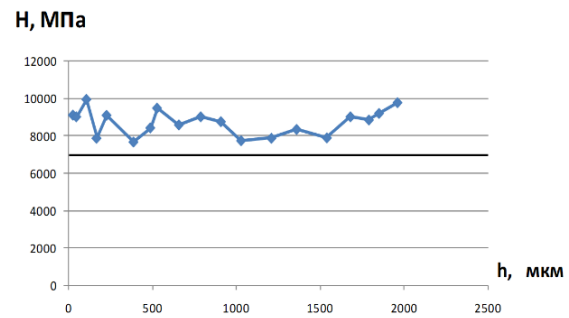


Рис. 16. Мікротвердість пуансона зі сталі 9ХС ( $d = 2\text{ мм}$ ) за глибиною після КІА

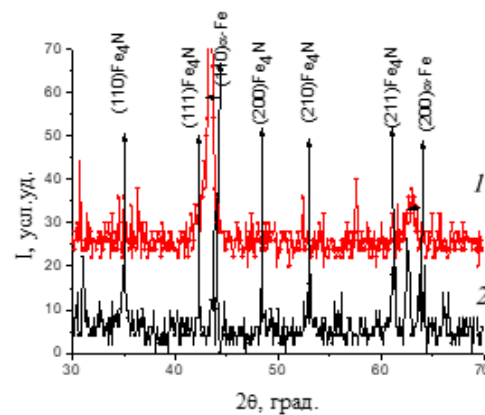


Рис. 17. Ділянки дифракційних спектрів пуансона зі сталі 9ХС після КІА: 1 – поверхневий шар, 2 – приповерхневий шар

Це є достатнім для високих експлуатаційних властивостей пуансонів, а саме: поєднання підвищених рівней ударної в'язкості та мікротвердості. Зазначене підтверджує експлуатаційна поведінка деталей після КІА – поряд зі збільшенням мікротвердості на 1700 МПа, порівняно зі значеннями після звичайної термічної обробки без азотування, значно зростає і ударна в'язкість.

### Висновки

Тривимірне моделювання свідчить на користь того, що в зоні різальної кромки (окружності торця) пуансона існує геометричний ефект підвищеного вмісту азоту за умови його перерозподілу, що повинно враховуватися фінішною механічною обробкою.

Двовимірне моделювання перерозподілу азоту з урахуванням фазового перетворення  $\epsilon$ -нітриду в азотистий аустеніт показало, що за зазначеними припущеннями перетворення, якщо температура становить  $860\text{ }^\circ\text{C}$ , відбувається за 3,25 хв.

Нітридний шар, незважаючи на своє поступове розчинення, зменшує середнє значен-



ня концентраційного профілю азоту в аустеніті. Але в цьому випадку глибину дифузійного насичення, яка дає помітне збільшення мікротвердості, суттєво не знижує.

За даними моделювання, для дифузії азоту на глибину до 750 мкм потрібно майже часове витримування за умови температури гартування.

Результати моделювання добре корелюють із даними за розподілом мікротвердості на перерізах пуансонів після комплексного іонного азотування та можуть застосовуватись для прогнозування в заводській практиці.

### Література

1. Дручинина О.А., Колобов Ю.Р., Вершинин Д.С., Смолякова М.Ю. Оценка глубины азотированного слоя на стали Р6М5 с использованием автоматической системы анализа микротвердости. *Заводская лаборатория. Диагностика материалов*. 2009. Т. 75. № 6. С. 40–43. ISSN 1028-6861.
2. Смолякова М.Ю., Вершинин Д.С., Трегубов И.М. Исследование влияния низкотемпературного азотирования на структурно-фазовый состав и свойства аустенитной стали. Материалы 9-й Международной конференции «Взаимодействие излучений с твердым телом» (20-22 сент., 2011 г. Минск). Минск, 2011. С. 80–82. URL: <http://elib.bsu.by/handle/123456789/26374>.
3. Рамазанов К.Н., Вафин Р.К. Разработка способа ионного азотирования инструментальной стали Х12 в скрещенных электрических и магнитных полях. *Машиностроение*. Уфа: УГАТУ, 2011. Т. 15, № 1 (41). С. 101–104. URL: <http://journal.ugatu.ac.ru/index.php/Vestnik/article/view/912>.
4. Shicai Yang, Kevin Cooke, Hailin Sun, Xiaoying Li, Kaijie Lin, Hanshan Dong. Development of advanced duplex surface systems by combining CrAlN multilayer coatings with plasma nitrided steel substrates. *Surface & Coatings Technology*. 2013. Vol. 236. pp. 2–7. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.surfcoat.2013.07.017>.
5. Лахтин Ю.М., Коган Я.Д., Шпис Г.И., Бемер З. Теория и технология азотирования. М.: Металлургия, 1991. 320 с. URL: <https://lib-bkm.ru/13980>.
6. Арзамасов Б.Н., Братухин А.Г., Елисеев Ю.С., Панайоти Т.А. Ионная химико-термическая обработка сплавов. Москва: МГТУ им. Баумана, 1998. 400 с. URL: <http://baumanpress.ru/books/283/>.
7. Лахтин Ю.М. Высокотемпературное азотирование. *Металловедение и термическая обработка металлов*. 1991. № 2. С. 25–29.
8. Pye D. Practical Nitriding and Ferritic Nitrocarburizing. Materials Park, Ohio: ASM International, 2003. 256 p. ISBN: 978-0-87170-791-8.
9. Белашова И.С., Шашков Д.П. Поверхностное упрочнение инструментальных сталей. Москва: Техполиграфцентр, 2004. 362 с.
10. Андреев А.А., Саблев Л.П., Григорьев С.Н. Вакуумно-дуговые покрытия. Харьков: ННЦ ХФТИ, 2010. 318 с.
11. Mittemeijer E.J., Somers M.A.J. Thermochemical Surface Engineering of Steels. Cambridge: Elsevier Ltd, 2015. 816 p. DOI: <https://doi.org/10.1016/C2013-0-16318-0>.
12. Каплун В.Г., Каплун П.В. Ионное азотирование в безводородных средах: монография. Хмельницький: ХНУ, 2015. 318 с. ISBN 978-966-330-218-8.
13. Göhring H., Fabrichnaya O., Leineweber A., Mittemeijer E.J. Thermodynamics of the Fe-N and Fe-N-C Systems: The Fe-N and Fe-N-C Phase Diagrams Revisited. *Metallurg. and Mater. Transactions A.*, 2016. Vol. 47A, Iss. 12, pp. 6173–6186. DOI: <https://doi.org/10.1007/s11661-016-3731-0>.
14. Woehle T., Cinaroglu H., Leineweber A., Mittemeijer E.J. Fe-N and Fe-N-C phase equilibria above 853 K studied by nitriding/nitrocarburising and secondary annealing. *Int. J. Mater. Res.*, 2016. Vol. 107, Iss. 3, pp. 192–202. DOI: <https://doi.org/10.3139/146.111341>.
15. Deng X., Ju D., Li M. Finite Element Modeling and Experimental Verification of Nitriding Process in S30C Steel. *Materials Research*. 2017. Vol. 20, no. 2, pp. 509–513. DOI: <http://dx.doi.org/10.1590/1980-5373-MR-2016-0531>.
16. Krauss G. Steels: Processing, Structure, and Performance, Second Edition. Materials Park, Ohio: ASM International, 2015. 704 p. ISBN: 1627080848, 9781627080842.
17. Hosseini S.R., Ashrafzadeh F., Kermanpur A. Calculation and experimentation of the compound layer thickness in gas and plasma nitriding of iron. *Iran. J. of Sci. & Techn., Trans. B: Engineer.* 2010. Vol. 34, no. B5. pp. 553–566. URL: [https://www.researchgate.net/publication/262243233\\_Calculation\\_and\\_experimentation\\_of\\_the\\_compound\\_layer\\_thickness\\_in\\_gas\\_and\\_plasma\\_nitriding\\_of\\_Iron](https://www.researchgate.net/publication/262243233_Calculation_and_experimentation_of_the_compound_layer_thickness_in_gas_and_plasma_nitriding_of_Iron).
18. Kim Y.-M., Son S.W., Lee, W.-B. Thermodynamic and kinetic analysis of formation of compound layer during gas nitriding of AISI1018 carbon steel. *Metals and Materials International*, 2018. Vol. 24, Iss. 1. pp. 180–186. DOI: <https://doi.org/10.1007/s12540-017-7191-x>.
19. Белашова И.С. Поверхностное упрочнение инструментальных сталей. Автореф. дис. ... д-ра техн. наук. Москва: МАДИ (ГТУ), 2005. 48 с.
20. Патент И 2058421 России. Способ азотирования деталей из конструкционных легированных сталей. Оpubл. 20.04.1996.

21. Соболев О.В., Шевченко С.М., Протасенко Т.О. Дослідження ефективності комплексного іонного азотування для модифікації сталі. *Вісник ХНАДУ*. Харків: ХНАДУ, 2018. Вип. 82. С. 13–18.  
DOI: <https://doi.org/10.30977/BUL.2219-5548.2018.82.0.13>.
  22. Петрова Л.Г. Моделирование процессов внутреннего азотирования жаропрочных сталей и сплавов: дис. ... д-ра техн. наук. Москва, 2001. 402 с.
  23. Дин Кай Цзянь, Семенов М.Ю. Сопоставление твердорастворного и нитридного упрочнения азотированного хромоникелевого сплава на основе разработанной математической модели. *Вестник ПНИПУ. Машиностроение, материаловедение*. 2016. Т. 18. № 3. С. 41–51.
  24. Wriedt H.A., Gokcen N.A., Nafziger R.H. The Fe-N (Iron-Nitrogen) system. *Bulletin of Alloy Phase Diagrams*, 1987. Vol. 8, Iss. 4. pp. 355–377. DOI: <https://doi.org/10.1007/BF02869273>.
  25. Du H. A Reevaluation of the Fe-N and Fe-C-N systems. *Journal of Phase Equilibria*, 1993. Vol. 14, Iss. 6. pp. 682–693. DOI: <https://doi.org/10.1007/BF02667880>.
  26. ASM handbook: Vol. 3: Alloy phase diagrams. Materials Park, Ohio: ASM International, 1992. 512 p. ISBN(s): 9780871703711.
  27. Kunze j. Thermodynamische Gleichgewichte im System Eisen-Stickstoff-Kohlenstoff. *HTM Härtereitechn. Mitt.*, 1996. Vol. 51, Iss. 6, pp. 348–354. URL: <https://www.tib.eu/en/search/id/olc%3A1552889203/Thermodynamische-Gleichgewichte-im-System-Eisen/>
  28. Bhadeshia H., Honeycombe R. Steels. Microstructure and Properties, 4th Edition, 2017. 488 p. ISBN: 9780081002704.
- References**
1. Druchinina O.A., Kolobov Yu.R., Vershinin D.S., Smolyakova M.Yu. Otsenka glubinyi azotirovannogo sloya na stali R6M5 s ispolzovaniem avtomaticheskoy sistemyi analiza mikrotverdosti [Depth estimation of nitrided layer on P6M5 steel using an automatic microhardness analysis system]. *Zavodskaya laboratoriya. Diagnostika materialov – Industrial Laboratory. Diagnostics of Materials*, 2009, Vol. 75, no. 6, pp. 40–43. ISSN 1028-6861.
  2. Smolyakova M.Yu., Vershinin D.S., Tregubov I.M. Issledovanie vliyaniya nizko-temperaturnogo azotirovaniya na strukturno-fazovyj sostav i svoystva austenitnoj stali [Investigation of the effect of low temperature nitriding on the structural phase composition and properties of austenitic steel]. *9th International Conference "Interaction of Radiations with a Solid"*, 20 September 22 nd, 2011, Minsk. pp. 80–82. URL: <http://elib.bsu.by/handle/123456789/26374>.
  3. Ramazanov K.N., Vafin R.K. Razrabotka sposoba ionnogo azotirovaniya instrumentalnoj stali H12 v skreshennykh elektricheskikh i magnitnykh polyah [Development of a method for ion nitriding of tool steel X12 in crossed electric and magnetic fields]. *Vestnik UGATU*. 2011. Vol. 15, no. 1 (41), pp. 101–104. URL: <http://journal.ugatu.ac.ru/index.php/Vestnik/article/view/912>.
  4. Shicai Yang, Kevin Cooke, Hailin Sun, Xiaoying Li, Kaijie Lin, Hanshan Dong. Development of advanced duplex surface systems by combining CrAlN multilayer coatings with plasma nitrided steel substrates. *Surface & Coatings Technology*. 2013. Vol. 236, pp. 2–7. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.surfcoat.2013.07.017>.
  5. Lakhtin Yu.M., Kogan Ya.D., Shpis G.I., Bemer Z. *Teoriya i tehnologiya azotirovaniya* [Theory and technology of nitriding]. Moscow, Metallurgija Publ., 1991. 320 p. DOI: <https://lib-bkm.ru/13980>.
  6. Arzamasov B.N., Bratukhin A.G., Eliseev Yu.S., Panayoti T.A. *Ionnaya himiko-termicheskaya obrabotka spлавov* [Ionic chemical-thermal treatment of alloys]. Moscow Publ. MSTU named after Bauman. 1998. 400 p. URL: <http://baumanpress.ru/books/283/>
  7. Lakhtin Yu.M. Vysokotemperaturnoe azotirovanie [High-temperature nitriding]. *Metallovedenie i termicheskaya obrabotka metallov*. Metallurgy and heat treatment of metals. 1991, no. 2, pp. 25–29.
  8. Pye D. *Practical Nitriding and Ferritic Nitrocarburizing*. Materials Park, Ohio: ASM International, 2003. 256 p. ISBN: 978-0-87170-791-8.
  9. Belashova I.S., Shashkov D.P. *Poverhnostnoe uprochnenie instrumentalnykh staley* [Surface hardening of tool steels]. Moscow, Techpoligrafcentr Publ., 2004. 362 p.
  10. Andreev A.A., Sablev L.P., Grigoriev S.N. *Vakuumno-dugovye pokrytiya* [Vacuum-arc coatings]. Kharkov, NSC KIPT Publ., 2010. 318 p.
  11. Mittemeijer E.J., Somers M.A.J. *Thermochemical Surface Engineering of Steels*. Cambridge: Elsevier Ltd, 2015. 816 p. DOI: <https://doi.org/10.1016/C2013-0-16318-0>.
  12. Kaplun V.G., Kaplun P.V. *Ionnnoe azotirovanie v bezvodnorodnykh sredah* [Ionic nitriding in anhydrous media]. Khmelnytskyi, KhNU, Publ., 2015. 318 p. ISBN 978-966-330-218-8.
  13. Göhring H., Fabrichnaya O., Leineweber A., Mittemeijer E.J. Thermodynamics of the Fe-N and Fe-N-C Systems: The Fe-N and Fe-N-C Phase Diagrams Revisited. *Metallurg. and Mater. Transactions A.*, 2016. Vol. 47A, Iss. 12, pp. 6173–6186.  
DOI: <https://doi.org/10.1007/s11661-016-3731-0>.
  14. Woehrle T., Cinaroglu H., Leineweber A., Mittemeijer E.J. Fe-N and Fe-N-C phase equilibria above 853 K studied by nitriding/nitrocarburizing and secondary annealing. *Int. J. Mater. Res.*, 2016, Vol. 107, Iss. 3, pp. 192–202. DOI: <https://doi.org/10.3139/146.111341>.

15. Deng X., Ju D., Li M. Finite Element Modeling and Experimental Verification of Nitriding Process in S30C Steel. *Materials Research*, 2017, Vol. 20, no. 2, pp. 509–513. DOI: <http://dx.doi.org/10.1590/1980-5373-MR-2016-0531>.
  16. Krauss G. *Steels: Processing, Structure, and Performance, Second Edition*. Materials Park, Ohio: ASM International, 2015. 704 p. ISBN: 1627080848, 9781627080842.
  17. Hosseini S.R., Ashrafizadeh F., Kermanpur A. Calculation and experimentation of the compound layer thickness in gas and plasma nitriding of iron. *Iran. J. of Sci. & Techn., Trans. B: Engineer.* 2010, Vol. 34, no. B5, pp. 553–566. URL: [https://www.researchgate.net/publication/262243233\\_Calculation\\_and\\_experimentation\\_of\\_the\\_compound\\_layer\\_thickness\\_in\\_gas\\_and\\_plasma\\_nitriding\\_of\\_Iron](https://www.researchgate.net/publication/262243233_Calculation_and_experimentation_of_the_compound_layer_thickness_in_gas_and_plasma_nitriding_of_Iron).
  18. Kim Y.-M., Son S.W., Lee, W.-B. Thermodynamic and kinetic analysis of formation of compound layer during gas nitriding of AISI1018 carbon steel. *Metals and Materials International*. 2018. Vol. 24, Iss. 1, pp. 180–186. DOI: <https://doi.org/10.1007/s12540-017-7191-x>.
  19. Belashova I.S. *Poverhnostnoe uprochnenie instrumentalnyh stalej*. Avtoref. diss. dokt. techn. nauk [Surface hardening of tool steels. Abstract. dis. Forthescientific Art. Drs. tech. sciences]. Moscow, 2005. 48 p.
  20. Gerasimov S.A., Karguzhin S.D. et al., *Sposob azotirovaniya detalej iz konstrukcionnyh legirovannyh stalej* [Method for nitriding parts from structural alloy steels]. Patent RU no205842, 1996.
  21. Sobol O.V., Shevchenko S.M., Protasenko T.O. Doslidzhennya efektyvnosti kompleksnogo ionnogo azotuvannya dlya modifikaciyi stali [Investigation of efficiency of complex ion nitriding for steel modification] *Bulletin of Kharkov National Automobile and Highway University*. Kharkov, KHNADU, 2018. Vol. 82, pp. 13–18. DOI: <https://doi.org/10.30977/BUL.22195548.2018.82.0.13>.
  22. Petrova L.G. *Modelirovanie processov vnutrennego azotirovaniya zharoprochnykh stalej i splavov*. Diss. dokt. techn. nauk. [Modeling of processes of internal nitriding of heat-resistant steels and alloys. Dr. tech. sci. diss.]. Moscow, 2001. 402 p.
  23. Din Kai Jian, Semenov M.Yu. Comparison of solid-solution and nitrid hardening of nitride chromium-nickel alloy based on the developed mathematical model. *Bulletin of PNIPU. Engineering, materials science*, 2016. Vol. 18, no. 3, pp. 41–51.
  24. Wriedt H.A., Gokcen N.A., Nafziger R.H. The Fe-N (Iron-Nitrogen) system. *Bulletin of Alloy Phase Diagrams*, 1987, Vol. 8, Iss. 4, pp. 355–377. DOI: <https://doi.org/10.1007/BF02869273>.
  25. Du H. A Reevaluation of the Fe-N and Fe-C-N systems. *Journal of Phase Equilibria*, 1993, Vol. 14, Iss. 6, pp. 682–693. DOI: <https://doi.org/10.1007/BF02667880>.
  26. ASM handbook: Vol. 3: Alloy phase diagrams. Materials Park, Ohio: ASM International. Publ., 1992. 512 p. ISBN (s): 9780871703711.
  27. Kunze j. Thermodynamische Gleichgewichte im System Eisen-Stickstoff-Kohlenstoff. *HTM Härte-rei-Techn. Mitt.*, 1996. Vol. 51, Iss. 6, pp. 348–354. URL: <https://www.tib.eu/en/search/id/olc%3A1552889203/Thermodynamische-Gleichgewichte-im-System-Eisen/>.
  28. Bhadeshia H., Honeycombe R. *Steels: Microstructure and Properties*, 4th Edition, 2017. 488 p. ISBN: 9780081002704.
- Шевченко Світлана Михайлівна**, доц. каф. «Матеріалознавство», тел. +38 098-813-37-07 svsshev970819@gmail.com;
- Терлецький Олександр Семенович**, к.ф.-м.н., доц. каф. «Матеріалознавство», тел. +38 099-305-36-02, terletskg@gmail.com;
- Горова Олена Павлівна**, к.т.н., ст. наук. співр. каф. «Матеріалознавство», helen.gorovaya@gmail.com.
- Соболь Олег Валентинович**, д.ф.-м.н., проф. каф. «Матеріалознавство», sool@kpi.kharkov.ua.
- Протасенко Тетяна Олександрівна**, доц. каф. «Матеріалознавство», protasenko@gmail.com.
- Рєброва Олена Михайлівна**, к.т.н., доц. каф. «Матеріалознавство», rebrovaem0512@gmail.com. Національний технічний університет «Харківський політехнічний інститут», 61002, Україна, м. Харків, вул. Кирпичова 2, інженерний корп. (права крило), 2-й пов.
- Computer modeling of nitrogen redistribution in technologies of complex ion nitriding of alloy steels**
- Abstract. Problem.** The work is devoted to modeling the redistribution of nitrogen in the parts made from alloy steel 9CrSi during isothermal annealing or holding for quenching after the operation of ionic nitriding. This integrated technology has a number of advantages over traditional nitriding methods. It is clear that assessment and prediction of the depth of nitrogen penetration are relevant for complex ion nitriding. **Goal.** Therefore, the purpose of the simulation was to study the diffusion redistribution of nitrogen in cylindrical punches made of 9CrSi steel at a temperature of 860 °C, which had a finished nitrided layer with a thickness of 80 μm on the surface. **Methodology.** Externally, at a depth of up to 30 μm, the layer contained nitrides with a nitrogen concentration of 8.7% by mass, and deeper, up to 50 μm, - nitrogenous α-ferrite. Simulation was carried out in the COMSOL Multiphysics 5.5 software environment in the convection-diffusion module of classical differential equations. We used modern data on the diffusion coefficients in alloyed austenite and ε-nitride of steel. Within the framework of the initial conditions, for nitrogen, which forms solid solutions of interstitiality

with carbon in phases, the mass percentages were recalculated into atomic ones with respect to the solid solution of substitution. The simulation results were programmatically returned to the usual atomic percentages. **Results.** In 3D modeling for up to 10 minutes, nitrogen redistribution from the end and a cylindrical 2 mm diameter of the lateral surface into the punch was assessed. It has been established that in the area of the cutting edge (end circumference) of the punch there is a geometric effect of increased nitrogen content during its redistribution. With a short holding time for hardening, this is an undesirable effect that must be taken into account by finishing machining. A more detailed simulation of the diffusion of nitrogen from the cylindrical surface of the punch into depth, taking into account the gradual transformation of the  $\epsilon$ -nitride of the surface layer into austenite, was carried out in the 2D-simulation mode on the cross section. For this, the nitride layer was divided into ten sublayers, each 3  $\mu\text{m}$  thick. The dependences of the nitrogen concentration in depth were obtained for different times of high-temperature holding up to 1 hour. **Originality.** Analysis of the data indicates that the nitride layer, despite its gradual dissolution in 3.25 min., decreases the average value of the concentration profile of nitrogen in austenite compared to the same initial conditions, but without nitrides. However, in this case, the depth of diffusion saturation, which gives a noticeable increase in microhardness, does not significantly decrease. **Practical value.** The simulation results correlate well with the microhardness data over the cross section of punches after complex ion nitriding and can be used for prediction in factory practice.

**Key words:** complex ion nitriding (CIN), steel 9CrSi, modeling, diffusion of nitrogen, alloyed austenite,  $\epsilon$ -nitride,  $\alpha$ -ferrite.

**Shevchenko Svitlana Mikhaylivna**, Assoc. Prof. Materials Science Department, тел.+38 098-813-37-07, svsshev970819@gmail.com;  
**Terletsky Alexander Semenovich**, Candid. of Phys.-Math. Sc., Assoc. Prof. Materials Science Department, тел. +38 099-305-36-02, terletskg@gmail.com;

**Horova Olena Pavlivna**, Candid. of Techn. Scien., Senior Res. Scien. Materials Science Department, helen.gorovaya@gmail.com.

**Sobol Oleg Valentinovich**, Doctor of Phys.-Math. Sc., Professor Materials Science Department, sool@kpi.kharkov.ua.

**Protasenko Tatyana Olexandrivna**, Assoc. Prof. Materials Science Department, protasenko@gmail.com.

**Rebrova Olena Mikhaylivna**, Candid. of Techn. Scien., Assoc. Prof. Materials Science Department, +38 057-707-64-35, rebrovaem0512@gmail.com. National Technical University "Kharkiv Polytechnic Institute", 61002, Ukraine, Kharkiv, st. Kirpychova 2, engineering building. (right wing), 2nd floor.

### Компьютерное моделирование перераспределения азота в технологиях комплексного ионного азотирования легированных сталей

**Аннотация.** Работа посвящена моделированию с помощью COMSOL Multiphysics 5.5 перераспределения азота в деталях из легированной стали 9ХС при их изотермическом отжиге или выдержке под закалку после операции ионного азотирования. Такая технология комплексного ионного азотирования также включает низкий отпуск после закалки, финишную механическую обработку поверхности и имеет ряд преимуществ по сравнению с традиционными способами азотирования. Для комплексного ионного азотирования очень актуальны оценка и прогнозирование глубины проникновения азота, поэтому моделирование проводили с целью исследования диффузионного перераспределения азота в цилиндрических пуансонах из стали 9ХС при температуре 860 °С, которые имели на поверхности готовый азотированный слой толщиной 80 мкм. Показано, что в зоне режущей кромки (окружности торца) пуансона наблюдается эффект повышенного содержания азота при его перераспределении. Установлено, что при принятых предположениях преобразование  $\epsilon$ -нитрида в азотистый аустенит происходит за 3,25 мин. Полученные концентрационные профили перераспределения азота при различном времени выдержки могут применяться для прогнозирования в заводской практике.

**Ключевые слова:** комплексное ионное азотирование (КИА); сталь 9ХС; моделирование; диффузия азота; легированный аустенит;  $\epsilon$ -нитрид,  $\alpha$ -феррит.

**Шевченко Светлана Михайловна**, доц. каф. «Материаловедение», тел. +38 098-813-37-07, svsshev970819@gmail.com;

**Терлецкий Александр Семенович**, к.ф.-м.н., доц. каф. «Материаловедение». terletskg@gmail.com;

**Горовая Елена Павловна**, к.т.н., ст. научн. сотр. каф. «Материаловедение», helen.gorovaya@gmail.com.

**Соболь Олег Валентинович**, д.ф.-м.н., проф. каф. «Материаловедение», sool@kpi.kharkov.ua.

**Протасенко Татьяна Александровна**, доц. каф. «Материаловедение», protasenko@gmail.com.

**Реброва Елена Михайловна**, к.т.н., доц. каф. «Материаловедение», rebrovaem0512@gmail.com. Национальный технический университет «Харьковский политехнический институт», 61002, Украина, г. Харьков, ул. Кирпичева 2, инженерн. корп. (прав. крыло), 2-й эт.