

УДК 621.184.2-192

СРЕДНЕКВАДРАТИЧНЫЕ ОТКЛОНЕНИЯ АТОМОВ – НАНОМАСШТАБНЫЙ ИНДИКАТОР СОСТОЯНИЯ ПОВЕРХНОСТИ

Заворин Александр Сергеевич¹,
zavorin@tpu.ru

Любимова Людмила Леонидовна¹,
lll@tpu.ru

Буваков Константин Владимирович¹,
kvb@tpu.ru

Фисенко Роман Николаевич¹,
ronifis@tpu.ru

Ташлыков Александр Анатольевич¹,
tashlykov@tpu.ru

Артамонцев Александр Иванович¹,
a_art@tpu.ru

¹ Национальный исследовательский Томский политехнический университет,
Россия, 634050, г. Томск, пр. Ленина, 30.

Актуальность исследования связана с повышением надежности сварных соединений паросиловых установок и тем самым с рациональным использованием материалов изделий за счет совершенствования и развития методов изучения их ресурсных физических характеристик.

Цель: тестирование новых наномасштабных структурных характеристик III рода для оценок состояния поверхности.

Объект: образцы жаропрочной стали трубных поверхностей нагрева паровых котлов.

Методы: физическое моделирование условий эксплуатации путем термоциклирования в электропечи МИМП-10УЭ, холодно-го циклического деформирования с применением гидравлического пресса, рентгенометрия образцов с оценкой среднеквадратичных отклонений атомов и внутренних структурных напряжений на рентгеновских дифрактометрах типа ДРОН, анализ морфологии поверхности с помощью портативного электронного микроскопа типа PENSCKOPE с увеличением $\times 20$.

Результаты. Проведены экспериментальные исследования, связанные с количественной оценкой колебательной амплитуды атомов и ее эволюцией при циклических термических и механических нагрузках. В результате исследований предложен новый диагностический параметр в виде колебательной амплитуды атомов \bar{U}^2 , отражающий фундаментальную природу сил межатомных связей. Продемонстрирована корреляция между среднеквадратичными отклонениями атомов (микромасштабный уровень свойств), представляющими микроструктурные характеристики III рода, с макромеханическими характеристиками $\sigma_{0,2}$ и σ_B (макромасштабный уровень свойств). Так как условный предел текучести и временное сопротивление разрушению связаны с прочностью и разрушением, то и среднеквадратичные отклонения атомов могут быть использованы в качестве индикатора поврежденности и признака достижения предельных состояний. Параметр \bar{U}^2 может служить также характеристикой текущего индивидуального физического состояния металла. Предложена новая методология оценки текущего и наступления предельных состояний. Показано, что восстановление структуры контролируется на атомном микромасштабном уровне по колебательной амплитуде и напряжениям I рода.

Ключевые слова:

Сталь, поверхность нагрева, механическое циклическое деформирование, термоциклирование, рентгеновская дифракция, среднеквадратичные отклонения, структурные напряжения I рода.

Введение

Разрушение труб котлов, сварных соединений и их околошовных зон – нередкое явление, и не всегда возможно предсказать момент наступления предельного состояния в условиях скрытого процесса накопления микроповрежденности [1–6 и др.].

Деградация структуры стали происходит постоянно под термическими и механическими нагрузками и начинается на самых ранних стадиях эксплуатации [7, 8], а также вследствие естественного процесса старения материала [9]. В результате наблюдаются внезапные разрушения конструкций за счет трещинообразования. Именно условия накопления, развития и

распространения трещин являются в настоящее время наименее диагностируемыми и изученными [1].

В основу приближенных инженерных методов оценки накопления поврежденности и сопротивления разрушению положен традиционный подход анализа идеализированных тел, лишь приближенно отражающих поведение реальных объектов [9, 10].

Одной из важнейших задач в этих условиях остается надежная диагностика, что является основным средством установления резерва работоспособности металла [11–18 и др.].

Это требует не только совершенствования традиционных методов контроля и поиска новых подходов,

но и введения иных критериев диагностики текущего физического состояния, а также признаков накопления поврежденности и достижения металлом предельных состояний.

Одним из таких подходов может быть оценка внутренней структурной поврежденности металла, основанная на исследовании свойств III рода. Свойства III рода изучаются на объектах, размеры которых малы по сравнению с размерами микроструктуры. К таким объектам кроме зерен, блоков мозаики в зернах, участков границ зерен и т. д. можно отнести колебательную амплитуду атомов кристаллических решеток (среднеквадратичные отклонения), имеющую фундаментальную физическую природу.

Среднеквадратичные отклонения атомов связаны с температурой Дебая θ , характеризующей прочность межатомных связей [17–21]. Прочность межатомных связей наряду со структурой металла и состоянием границ зерен является главным параметром, определяющим жаропрочность – одну из важнейших характеристик металла для энергомашиностроения. Развитие энергетики упирается в создание жаропрочных материалов. Жаропрочность металла возрастает с увеличением температуры плавления именно потому, что при этом растет прочность межатомных связей. Температура плавления, а также модуль упругости являются тепловой и силовой характеристиками прочности межатомных связей. Таким образом, физические, механические свойства металла, жаропрочность, ползучесть и разрушение пропорционально связаны с прочностью сил межатомных взаимодействий.

Известно, что все макроскопические гипотезы и их феноменологические обобщения не содержат параметров микроструктуры. Этот недостаток макроскопических критериев прочности является стимулом для изучения различных структурных критериев. Исследование сил межатомных взаимодействий и их связей с макромеханическими характеристиками прочности и разрушением в эксплуатационных условиях представляется перспективным направлением в диагностике и обеспечении ресурса работоспособности металла опасных производственных объектов.

Очевидно, что изучение субмикроскопических свойств III рода требует прецизионных физических методов.

Колебания атомов \bar{U}^2 в кристаллической решетке реального кристалла весьма сложны, однако на основании метода рентгеновской дифракции можно оценивать среднеквадратичные смещения атомов \bar{U}^2 при термическом или механическом деформировании [22, 23]:

$$\bar{U}^2 = \frac{3}{4\pi^2} \left(\frac{d}{n}\right)^2 \cdot \ln\left(\frac{I}{I'}\right), \text{ \AA}^2, \quad (1)$$

где n – порядок отражения; d – межплоскостное расстояние, \AA; I' – интегральная интенсивность для деформированного образца, имп.; I – интегральная интенсивность для недеформированного образца (эталоны), имп.

Температура Дебая θ также может быть измерена экспериментально с применением метода рентгеновской дифракции [24]:

$$\theta = \sqrt{\frac{3h^2T}{k \cdot m \cdot \bar{U}^2}}, \text{ К}, \quad (2)$$

где \bar{U}^2 – среднеквадратичное смещение атомов, \AA²; h – постоянная Планка, Дж·с; k – постоянная Больцмана, Дж/К; m – масса атома, г; $T = 295 \text{ К}$ ($t = 22 \text{ }^\circ\text{C}$).

Из (2) очевидно, что $\bar{U}^2 \sim 1/(m\theta^2)$. В то же время величина $(m\theta^2)$ характеризует прочность межатомной связи, поскольку она пропорциональна силе F , возвращающей атомы в положение равновесия: $F \sim m\theta^2$.

В рентгенометрии колебательная амплитуда атомов и температура Дебая связаны с уширением линий рентгеновских спектров и интегральной интенсивностью дифракционных рефлексов. Поэтому в качестве базового метода исследования выбран рентгенодифракционный метод, а целью исследования является тестирование новых наномасштабных структурных критериев для оценок состояния поверхности.

Подготовка образцов

Основными факторами старения металла труб парового тракта котлов являются температура и давление. Немаловажную роль в исчерпании работоспособности играют также и процессы естественного старения, связанные с распадом неустойчивых пересыщенных твердых растворов. Поэтому для экспериментальных исследований подбирались образцы с разной историей. Это были образцы труб, не бывших в эксплуатации, подвергнутые длительному естественному старению, а также образцы из труб, отработавших в реальных парогенераторах, полированные и неполированные образцы. Для других экспериментальных образцов индивидуальная история создавалась путем форсированного старения циклическим механическим деформированием, термоциклированием или совместным термо- и механоциклированием.

Исследованию подвергались следующие группы образцов.

1. Образцы № 1 и 2 из околошовной зоны сварного шва участка трубы из жаропрочной стали 12Х1МФ перлитного класса $\varnothing 38 \times 5$, находящейся в районе обмуровки котла в точке б (рис. 1). Труба эксплуатировалась в котле 16500 часов (≈ 2 года). Рабочая температура в точке б составляла 480 °С. Образцы вырезаны на расстоянии 8 мм слева и справа от оси шва, размер плоскости образцов, повернутой к пучку рентгеновских лучей, составляет 10×15 мм (рис. 2). Диапазон циклических механических давлений для образцов № 1 и 2 составлял от 73 до 579 МПа с шагом 43–50 МПа.
2. Образцы № 3, 3', 4, 4' основного металла прямого участка той же трубы пароперегревателя (в районе точки б рис. 1). Образцы № 3' и 4' полировались. Образцы № 3 и 4 – не полированные.
3. Образцы № 5, 6, 7 и 10 стали марки 12Х1МФ, изготовленные из трубы $\varnothing 20 \times 2$, подвергались предварительному нагреву термическими циклами (термоциклированию). Каждый образец циклически нагревался и охлаждался до заданных температур 155 раз. Границы термоциклирования составляли:

- образец № 5 – 500–900 °С;
- образец № 6 – 100–500 °С;
- образец № 7 – 500–1000 °С;
- образец № 10 – 500–780 °С.

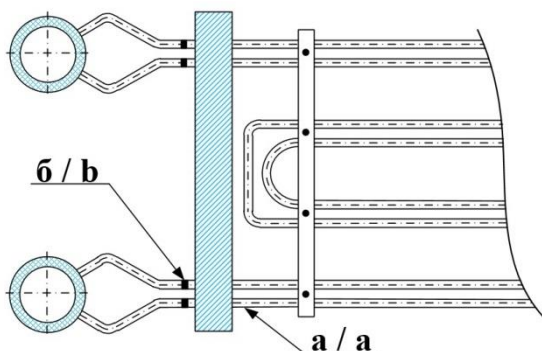


Рис. 1. Фрагмент схемы горизонтального пароперегревателя парового котла: а) место разрушения трубы; б) место сварного шва

Fig. 1. Fragment of the boiler horizontal superheater diagram: а) place of tube failure; б) place of weld seam

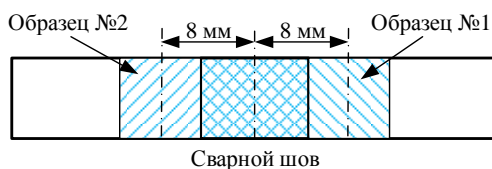


Рис. 2. Схема вырезки образцов

Fig. 2. Diagram of specimen cutout

- Образцы № 8 и 9 стали марки 12Х1МФ изготовлены из той же трубы, что и образцы № 5, 6, 7 и 10. Образцы № 8 и 9 не подвергались внешнему воздействию.
- Образцы № 11–15 стали марки 12Х1МФ из трубы $\varnothing 34 \times 4$ и длиной 600 мм. Образец № 11 вырезан из области трещины. Образец № 12 вырезан из зоны пластического течения. Образец № 13 вырезан из зоны, находящейся на прямом участке вдали от зоны раскрытия трубы. Образец № 14 вырезан из зоны, находящейся на противоположной стороне от зоны раскрытия трубы. Образец № 15 вырезан непосредственно из зоны сварного шва, находящегося далеко от зоны раскрытия трубы.

6. Образец № 16 стали марки 12Х1МФ был подвержен механическому циклическому деформированию в пределах до 462 МПа (первый шаг составлял 68 МПа, остальные 23 значения давления выполнены с шагом порядка 17 МПа).

7. Образцы № 17 и 18 стали марки 12Х1МФ, изготовленные из трубы $\varnothing 20 \times 3,5$, эксплуатировались в пароперегревателе в составе энергетического котла в пределах 25000–30000 часов при 560 °С. Образцы вырезаны из трубы выходного участка пароперегревателя четвертой ступени.

Образец № 18 был выбран для испытания механическим циклическим деформированием. Шаги давления были следующими: 0 МПа; 125 МПа; 250 МПа; 370 МПа; 470 МПа; 500 МПа. После всех циклических нагрузок была проведена восстановительная термическая обработка (ВТО):

- нагрев до 1000 °С;
- выдержка 40 мин;
- охлаждение $>5-8$ град/мин;
- отпуск 720 °С 1 час, скорость охлаждения после отпуска не лимитируется.

Химический состав стали 12Х1МФ: 0,08–0,15 С; 0,9–1,2 Cr; 0,25–0,35 Mo; 0,15–0,30 V; 0,4–0,7 Mn; 0,17–0,37 Si; $\leq 0,25$ Ni; $\leq 0,2$ Cu; $\leq 0,025$ S; $\leq 0,030$ P; остальное железо.

Методика эксперимента

Методика исследований включала испытания образцов после механического микродеформирования, термоциклирования, образцов, состаренных в естественных условиях, образцов после длительной эксплуатации, полированных образцов и образцов из зоны сварного шва и околошовной зоны.

Механическое циклическое деформирование

Механическому циклическому деформированию подвергались образцы № 1, 2, 16, 18.

Методика исследований циклическим механическим деформированием имитировала процессы механической усталости и заключалась в воспроизведении типичных для поверхностей нагрева процессов нагружения, создающих неоднородные внутренние напряжения. Это сводилось к циклическому деформированию образца на гидравлическом прессе с возрастающей нагрузкой в каждом очередном цикле нагружения (рис. 3). Время нагружения в каждом цикле составляло 15 с для всех образцов.

Термоциклирование

Термоциклированию подвергались образцы № 5, 6, 7 и 10, вырезанные из трубы после длительного (14 лет) естественного старения.

Каждый цикл включал «нагрев до максимальной температуры цикла – охлаждение до минимальной температуры цикла» (рис. 4). Охлаждение до минимальной температуры цикла производилось на воздухе. Для этого образец извлекался из печи. Минимальная температура цикла контролировалась пирометром. Каждый цикл «нагрев–охлаждение» выполнялся примерно в течение 2–3 мин. Циклы воспроизводились. Общее время термоциклирования каждого образца составляло порядка 5–6 часов (рис. 4).

Термоциклирование осуществлялось в среде атмосферного воздуха в лабораторной печи с автоматическим регулированием с максимальной температурой 1250 °С. В комплекте с печью использовались платиновые–платиновые термопары. Совместно с термопарами работали приборы (потенциометры), входящие в комплект печи, с классом точности 1,5. Исправность работы термопары и приборов контролировалась мультиметром повышенной точности Sanwa PC500a.

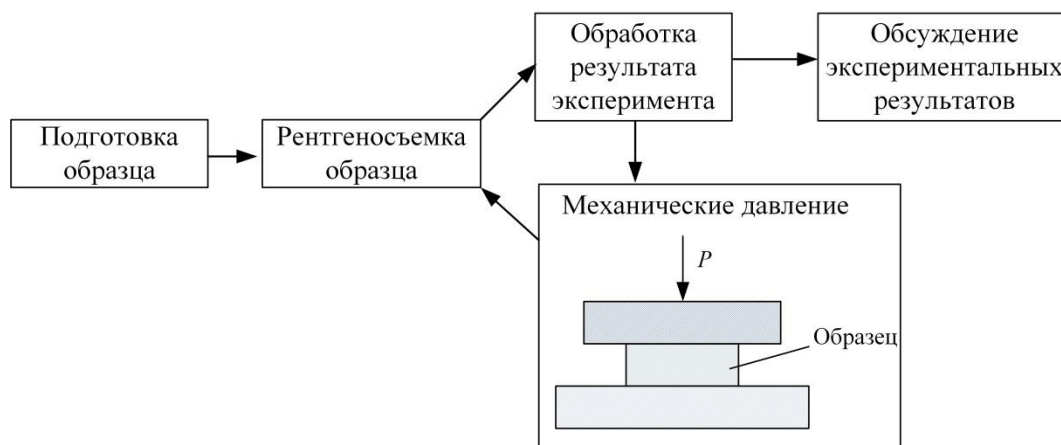


Рис. 3. Схема холодного циклического деформирования

Fig. 3. Diagram of cyclic cold deformation



Рис. 4. Схема термоциклирования (по вертикальной оси отложена произвольная температура цикла)

Fig. 4. Diagram of thermal cycling (the arbitrary cycle temperature is plotted along the vertical axis)

Рентгенометрические исследования

Рентгенометрические исследования выполнены на рентгеновском аппарате ДРОН (дифрактометр рентгеновский) с применением рентгеновской трубки с медным антикатодом при средней длине волны рентгеновского излучения $\lambda_{CuK\alpha_{cp}} = 1,54178 \text{ \AA}$. Излучение трубки монохроматизировано никелевым фильтром. Скорость вращения детектора в эксперименте равнялась 0,5 град/минуту, для повышения точности измерения углов дифракции сканирование производилось через 0,1 град. Экспозиция при измерении фона составляла 20 с.

Во всех экспериментах измеряемыми величинами являются: интегральная интенсивность дифракционных рефлексов, угол дифракции, период идентичности элементарных кристаллических ячеек, на основании которых устанавливаются все диагностические параметры.

Среднеквадратичные смещения атомов \bar{U}^2 рассчитывались по экспериментальным значениям интегральных интенсивностей дифракционных линий (110) образца и эталона на основании выражения (1) [22, 23]. Для этого в качестве образца-свидетеля применялся специально подготовленный идеально-мозаичный поликристаллический образец (эталон) из стали 12Х1МФ.

Характеристическая температура θ оценивалась на основании выражения (2).

Интегральная интенсивность дифракционных линий определялась как площадь под кривой профиля дифракционной линии (рис. 5).

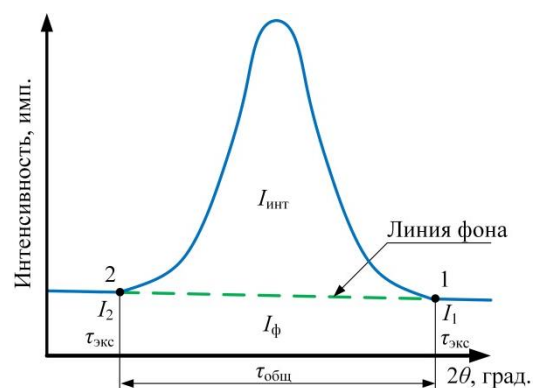


Рис. 5. Схема измерения интегральной интенсивности дифракционной линии

Fig. 5. Diagram of measurement of the diffraction line integrated intensity

Интегральная интенсивность рассчитывалась по выражению:

$$I_{\text{инт}} = I_{\Sigma} - I_{\phi}, \text{ имп.},$$

где I_{Σ} – суммарная интенсивность, включающая площадь под кривой профиля дифракционной линии и площадь фона, имп.; I_{ϕ} – суммарная интенсивность фона, которая определяется по выражению:

$$I_{\phi} = \frac{I_1 + I_2}{2 \cdot \tau_{\text{экс}}} \cdot \tau_{\text{общ}}, \text{ имп.},$$

где $\tau_{\text{экс}}$ – время набора импульсов в точках 1 и 2 (в работе 20 с); I_1, I_2 – интенсивность за время $\tau_{\text{экс}}$ в точках 1 и 2 (за 20 с); $\tau_{\text{общ}}$ – общее время набора импульсов от точки 1 до точки 2 (рис. 5), с.

Определение параметра элементарной кристаллической ячейки a производится из выражения:

$$a_i = d_i \sqrt{H_i^2 + K_i^2 + L_i^2}, \text{ \AA},$$

где d – межплоскостное расстояние, \AA; H, K, L – индексы Миллера плоскости.

На основании угла дифракции θ по формуле Вульфа–Брэгга устанавливается межплоскостное расстояние d :

$$\lambda = 2d \cdot \sin \theta \rightarrow d = \frac{\lambda}{2 \cdot \sin \theta}, \text{ \AA},$$

где λ – длина волны (1,54178 \AA); θ – угол дифракции, град.

Определение зональных макронапряжений первого рода σ_I осуществляется на основании закона Гука по установленным значениям параметров элементарных кристаллических ячеек.

Для исходного образца без давления в качестве эталона выбран образец стали 12Х1МФ, отожженный при 1000 °С, $a_0 = 2,8731 \text{ \AA}$:

$$\sigma_I = \frac{a_i - a_0}{a_0} \cdot E, \text{ МПа.}$$

Для всех остальных образцов зональные напряжения определяются по формуле:

$$\sigma_I = \frac{a_i - a_{i-1}}{a_{i-1}} \cdot E, \text{ МПа,}$$

где a_i – текущий параметр элементарной ячейки, \AA; a_{i-1} – предыдущий параметр элементарной ячейки, \AA; E – модуль нормальной упругости для стали 12Х1МФ (213000 МПа).

Обсуждение экспериментальных результатов

Изменение \bar{U}^2 при холодном циклическом микродеформировании (образцы № 1 и 2)

На рис. 6, 7 представлены экспериментальные результаты, отражающие влияние циклических нагрузок на среднеквадратичные отклонения \bar{U}^2 в образцах № 1 и 2 из околошовной зоны сварного узла [25].

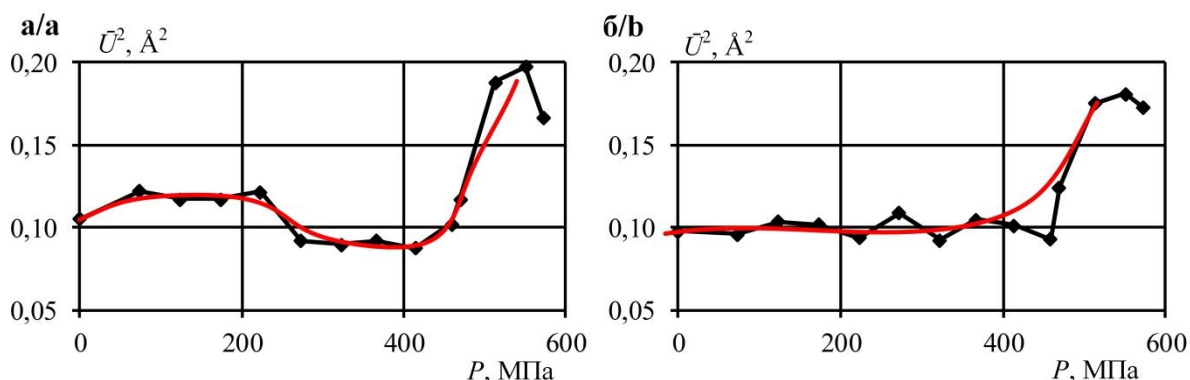


Рис. 6. Изменение среднеквадратичных отклонений атомов \bar{U}^2 при циклическом деформировании [25]: а) наружная сторона; б) внутренняя (образец № 1, рис. 2)

Fig. 6. Variation of RMSD \bar{U}^2 during cyclic deformation [25]: a) external side; b) internal side (Specimen No. 1, Fig. 2)

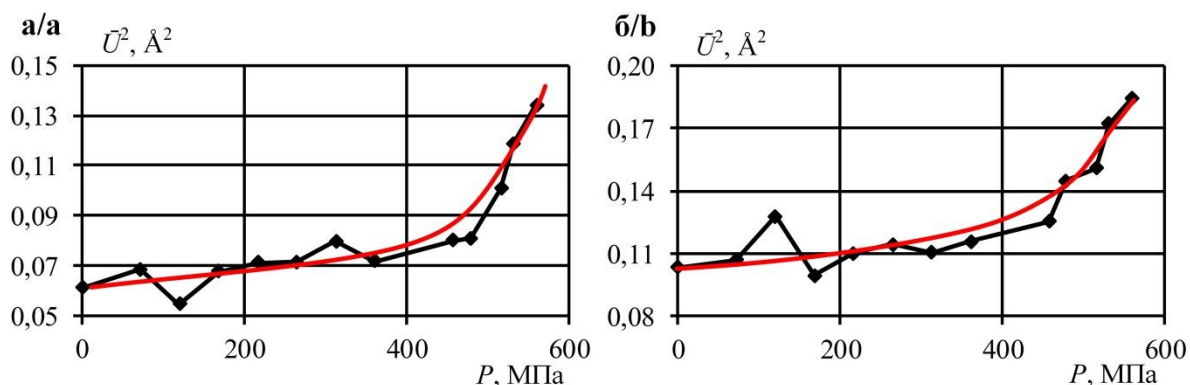


Рис. 7. Изменение среднеквадратичных отклонений атомов \bar{U}^2 при циклическом деформировании [25]: а) наружная сторона; б) внутренняя (образец № 2, рис. 2)

Fig. 7. Variation of RMSD \bar{U}^2 during cyclic deformation [25]: a) external side; b) internal side (Specimen No. 2, Fig. 2)

Для интерпретации полученных результатов (рис. 6, 7) принята модель колебаний атомов как связанных между собой маятников. Среднеквадратичные смещения \bar{U}^2 отражают коллективные колебательные свойства атомов вследствие наличия в твердом теле связанных состояний. Связанность маятников между собой определяет среднюю амплитуду колебаний \bar{U}^2 . Атомы, не связанные с другими, возникающие при разрывах межатомных связей, совершают свое независимое движение. Средняя колебательная амплитуда при этом возрастает. Изменение связанности атомов сопровождается эффектами изменения \bar{U}^2 и, соответственно, характеристической температуры.

Видно (рис. 6, 7), что \bar{U}^2 неоднородны для образцов № 1 и 2 как по разные стороны от оси сварного шва, так и для разных сторон одного и того же образца: на наружной стороне образца № 1 среднеквадратичные отклонения \bar{U}^2 изменяются от значений 0,11 до 0,09 Å^2 в диапазоне внешних нагрузок до 400 МПа (рис. 6, а), при этом среднеквадратичные отклонения \bar{U}^2 на внутренней поверхности осциллируют от 0,095 до 0,11 Å^2 (рис. 6, б). На наружной стороне образца № 2 среднеквадратичные отклонения \bar{U}^2 изменяются от значений 0,06 до 0,075 Å^2 (рис. 7, а), а на внутренней поверхности от 0,115 до 0,125 Å^2 (рис. 7, б).

Кроме того, среднеквадратичные отклонения \bar{U}^2 монотонно возрастают (рис. 6, 7), начиная с внешних давлений порядка 330–400 МПа, то есть при достижении предела текучести $\sigma_{0,2}$ (равного для стали 12Х1МФ $\sigma_{0,2}=330$ МПа при 20 °С [26]). Рост колебательной амплитуды свидетельствует об увеличении свободных несвязанных атомов, разрывах межатомных связей и накоплении точечных дефектов.

Максимум \bar{U}^2 наблюдается при внешнем давлении порядка 550 МПа (рис. 6, 7), которое соответствует пределу прочности σ_B ($\sigma_B=520$ МПа для стали 12Х1МФ при 20 °С [26]). У образца № 1 максимальные отклонения \bar{U}^2 при $P = \sigma_B$ составляют 0,2 и 0,18 Å^2 для наружной и внутренней сторон соответственно (рис. 6). У образца № 2 максимальные отклонения при разрушающем напряжении равны 0,14 и 0,18 Å^2 для наружной и внутренней сторон образца соответственно (рис. 7).

На рис. 8 представлен вид поверхностей образца № 1 после деформирования разрушающим давлением 550 МПа. На внутренней стороне образца наблюдаются следы коротких глубоких трещин, язв, питтинга и волн пластического течения материала (рис. 8, а). На наружной поверхности видны четкие следы хрупких продольных трещин (рис. 8, б).

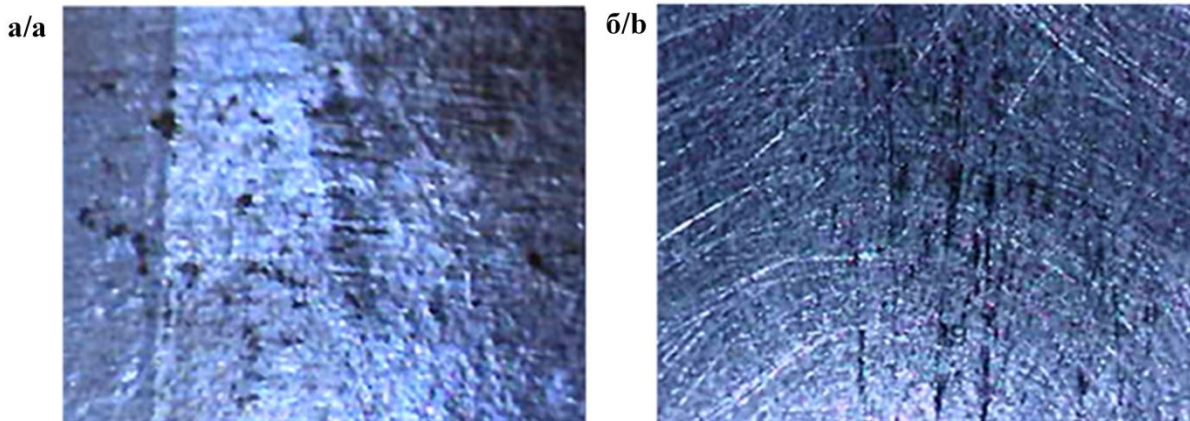


Рис. 8. Вид поверхностей образца № 1 после давления 550 МПа ($\times 20$): а) внутренняя сторона образца; б) наружная сторона образца

Fig. 8. Appearance of surfaces of Specimen No. 1 after 550 MPa pressure ($\times 20$): а) internal side of the specimen; б) external side of the specimen

Таким образом, результаты на рис. 6, 7 отражают связь среднеквадратичных отклонений (микромасштабный уровень свойств) с макромеханическими характеристиками $\sigma_{0,2}$ и σ_B (макромасштабный уровень свойств). Поскольку условный предел текучести и временное сопротивление разрушению связаны с прочностью и разрушением, то и среднеквадратичные отклонения атомов – один из критериев прочности межатомных связей, могут быть использованы в качестве критерия поврежденности и признака достижения предельных состояний. Параметр \bar{U}^2 может служить также характеристикой текущего индивидуального физического состояния металла.

Определение среднеквадратичных отклонений \bar{U}^2 полированных поверхностей

Полирование поверхности в значительной степени изменяет интегральную интенсивность дифракционных рефлексов, которая связана как с \bar{U}^2 , так и с θ .

Свойства поверхности, полученные полированием, представлены в табл. 1.

Результаты в табл. 1 показывают, что полирование поверхности образцов уменьшает величину \bar{U}^2 и, соответственно, увеличивает характеристическую температуру и силы межатомного взаимодействия, что можно связать с формированием при полировании аморфного слоя, обладающего повышенной прочностью, твердостью и упругостью по сравнению с кристаллическими материалами.

Таблица. Среднеквадратичные смещения \bar{U}^2 и характеристические температуры θ образцов основного металла из прямых участков трубы (по рис. 1). Сталь 12Х1МФ

Table. Root-mean-square deviations \bar{U}^2 and the Debye temperatures θ of parent metal specimens from the straight tube sections (in Fig. 1). 12Cr1MoV Steel

Исследуемый образец Specimen under study	$\bar{U}^2, \text{Å}^2$	θ, K
№ 3 не полированный No. 3 unpolished	0,1336	477
№ 3' полированный No. 3' polished	0,1137	517
№ 4 не полированный No. 4 unpolished	0,0975	558
№ 4' полированный No. 4' polished	0,0827	606

Анализ образцов на различных стадиях истощения ресурса

Результаты, представленные на рис. 9, иллюстрируют, что образцы, имеющие разную историю происхождения и находящиеся на различных стадиях истощения ресурса, имеют существенно разные значения среднеквадратичных отклонений атомов \bar{U}^2 .

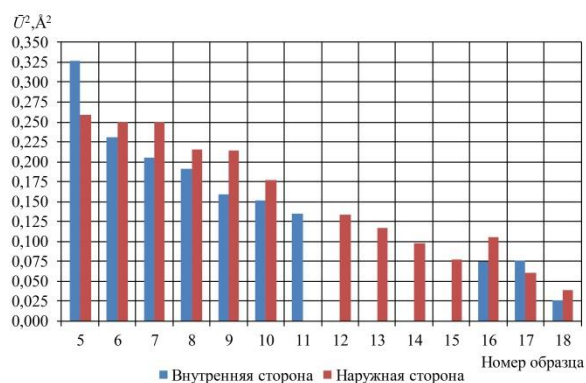


Рис. 9. Среднеквадратичные отклонения \bar{U}^2 образцов на различных стадиях истощения ресурса

Fig. 9. RMSD \bar{U}^2 of specimens at different life cycle stages

В целом для всех представленных образцов среднеквадратичные отклонения достаточно высоки. Наибольшие значения \bar{U}^2 наблюдаются у образцов, подвергнутых предварительному термоциклированию, – это образцы № 5, 6, 7 и 10, для которых \bar{U}^2 составляют 0,325, 0,25, 0,25 и 0,175 Å^2 соответственно. Образцы № 8 и 9 из той же трубы также обладают высокими значениями \bar{U}^2 , но меньшими, чем у образцов № 5, 6 и 7 после термоциклирования. Образцы № 11–15 вырезаны из разных зон раскрытия трещины, имеют промежуточные значения \bar{U}^2 и, по-видимому, упрочнены за счет эффектов пластического течения металла в зоне раскрытия трещины. Образец № 16 подвергнут механическому циклическому деформированию до максимального давления 462 МПа. Среднеквадратичные отклонения для него, равные порядка 0,1 Å^2 , примерно соответствуют значениям \bar{U}^2 для холоднодеформированных образцов № 1 и 2 при тех же давлениях (рис. 6, 7).

Наименьшими значениями \bar{U}^2 обладают образцы № 17 и 18.

На рис. 10 представлены экспериментальные значения внутренних макронапряжений I рода для образцов № 5–18. Распределение напряжений в образцах подтверждает базовую гипотезу, что прочность определяется разрушениями, связанными с разрывом межатомных связей и увеличением колебательной амплитуды атомов. Разрушения на всех его этапах сопровождаются релаксацией напряжений [27–29]. Видно, что внутренние напряжения для образцов № 5, 6 и 7, имеющих наибольшие значения \bar{U}^2 , находятся в сжимающей области деформаций. Переход в область сжатия возможен при полной разрядке напряжений (релаксации). Механизмом релаксации напряжений является образование микротрещин, то есть разрушение [27–29]. Образец № 10, также подвергнутый термоциклированию, как раз находится в стадии релаксации внутренних напряжений.

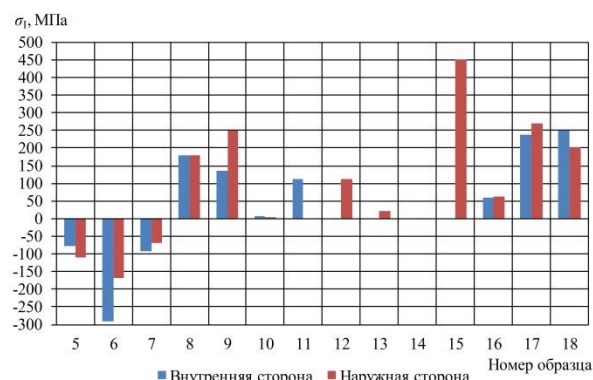


Рис. 10. Внутренние макронапряжения I рода для образцов на различных стадиях истощения ресурса

Fig. 10. First-kind internal macrostresses for specimens at different life cycle stages

Что же общего между графиками, изображенными на рис. 9 и 10?

Общей является сама физическая природа механизмов увеличения колебательной амплитуды атомов и релаксации внутренних напряжений, определяемая силами сцепления между атомами, ответственными за прочность и разрушение.

Все прочие образцы (рис. 10) обладают растягивающими напряжениями. Наибольшие растягивающие напряжения порядка 450 МПа наблюдаются у образца № 15, вырезанного непосредственно из зоны сварного шва, традиционно слабого места, имеющего высокие сварочные остаточные напряжения, приводящие к разрушению.

Дальнейшие исследования сводились к тому, чтобы образец № 18 из ряда № 5–18, обладающий наименьшими значениями среднеквадратичных отклонений, подвергнуть испытаниям циклическим деформированием вплоть до разрушающих напряжений (520 МПа). Исходные значения внутренних напряжений образца № 18 составляют порядка 200–250 МПа (рис. 10).

Цель данного фрагмента исследований – получить представление о ресурсе сил межатомных связей, о начальных стартовых параметрах \bar{U}^2 , способных обеспечить такой ресурс и о возможностях восстановления структуры, поврежденной в процессе деформирования. Результаты представлены на рис. 11.

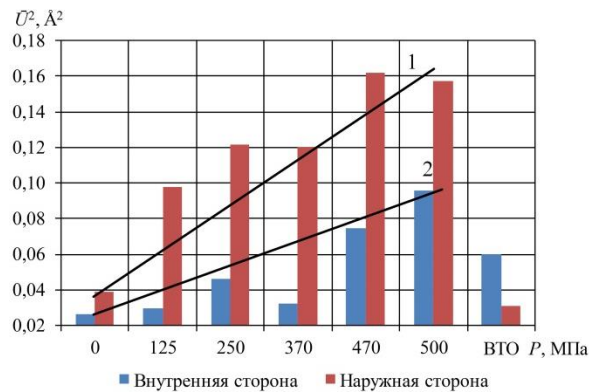


Рис. 11. Изменение среднеквадратичных отклонений атомов \bar{U}^2 при циклическом деформировании образца № 18

Fig. 11. Change of RMSD \bar{U}^2 during cyclic deformation of Specimen No. 18

Видно, что по мере увеличения нагрузки происходит расшатывание и ослабление связей, значения колебательной амплитуды увеличиваются до максимальных (рис. 11). ВТО благоприятно отражается на прочностных характеристиках – среднеквадратичные отклонения от максимальных $0,16 \text{ \AA}^2$ уменьшаются до $0,06 \text{ \AA}^2$ (на внутренней стороне), однако не достигают исходных значений $0,025 \text{ \AA}^2$ (рис. 11). Это можно связать с тем, что в структуре при деформировании возникают дефекты от ультракоротких микротрещин до микротрещин, которые не устраняются при ВТО.

По результатам ВТО становится понятно, что разрыв межатомных связей – процесс неодновременный. В каждый данный момент разрушаются не все связи, а лишь отдельная их часть оказывается доведенной до предельного состояния. Степень восстановления структуры после ВТО является своеобразной мерой накопленной поврежденности. Так, из рис. 11 очевидно, что микроповреждения в наибольшей степени затрагивают внутреннюю поверхность, поскольку она хуже восстанавливается, чем внешняя.

На рис. 12 представлен процесс релаксации внутренних напряжений образца № 18 с переходом их через нуль в сжимающую область.

Смена знака напряжений отмечается при 370 МПа, то есть при напряжениях, близких к пределу текучести ($\sigma_{0,2}=330 \text{ МПа}$ для стали 12Х1МФ). По мере возрастания нагрузки увеличиваются и напряжения сжатия, что связывается с образованием новых поверхностей раздела (субмикротрещин) при каждом акте нагружения. Восстановительная термическая обработка привела к восстановлению разорванных связей

или возникновению новых. Это проявляется в том, что внутренние напряжения I рода после ВТО из области сжимающих напряжений переместились в область растягивающих и понизились до 75 МПа по сравнению с исходными значениями ($200\text{--}250 \text{ МПа}$) (рис. 12).

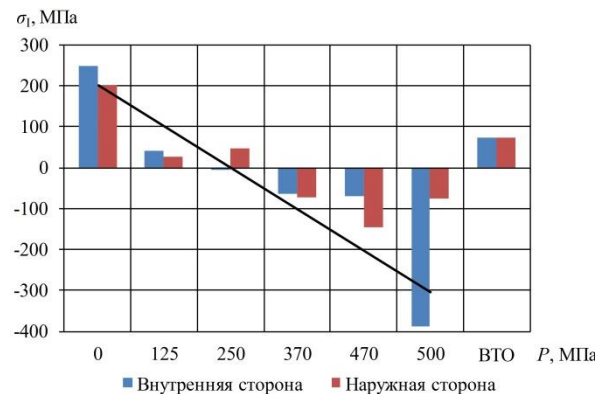


Рис. 12. Изменение внутренних напряжения I рода для образца № 18 при циклическом деформировании

Fig. 12. Change of the first kind internal stresses of Specimen No. 18 during cyclic deformation

Выводы

1. При циклическом механическом нагружении в деформируемом теле возрастают среднеквадратичные смещения атомов, характеризующие изменения структурных состояний системы на наномасштабном уровне.
2. Согласно принятой модели увеличение колебательной амплитуды атомов \bar{U}^2 связано с ослаблением и разрывом межатомных связей и накоплением дефектов.
3. Разрыв межатомных связей и накопление дефектов подтверждается процессом релаксации собственных внутренних напряжений I рода.
4. Максимум \bar{U}^2 при циклическом деформировании достигается при давлениях, соответствующих макромеханической характеристике – пределу прочности, который лимитируется прочностью межатомных связей.
5. Колебательная амплитуда атомов \bar{U}^2 имеет смысл показателя микроповрежденности и интенсивности деградации структуры.
6. Колебательная амплитуда атомов \bar{U}^2 – диагностический признак наступления предельного состояния.
7. При значениях \bar{U}^2 , достигаемых на участке деформаций до предела текучести, возможно восстановление исходной структуры, контролируемое по среднеквадратичным отклонениям атомов и внутренним напряжениям I рода.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 18-08-01265.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Gnevko A.I. Nature of fracture of metals and its analogs in the behavior of other kinds of matter // *Metal Science and Heat Treatment*. – 2008. – V. 50. – P. 149–163.
2. Лимар О.В., Фоминых В.А. Построение диаграмм растяжения металла труб по их нормативным характеристикам // *Трубопроводный транспорт: теория и практика*. – 2017. – № 3. – С. 34–37.
3. Welding-associated failures in power boilers / I. El-Mahallawi, W. Khalifa, M. El-Saady, M.R. El-Koussy // *Handbook of Materials Failure Analysis with Case Studies from the Chemicals, Concrete and Power Industries*. – Giza, Egypt: Department of Metallurgical Engineering, Cairo University, 2006. – P. 387–410.
4. Selection and analysis of material for boiler pipes in a steam plant / V. Lazić, D. Arsić, R.R. Nikolić, D. Rakić, S. Aleksandrović, M. Djordjević, B. Hadzima // *Procedia Engineering*. – 2016. – V. 149. – P. 216–223.
5. Failure analysis of a steam pipe weld used in power generation plant / Q. Chu, M. Zhang, J. Li, Y. Chen, H. Luo, Q. Wang // *Engineering Failure Analysis*. – 2014. – V. 44. – P. 363–370.
6. Bogachev V.A., Pshechenkova T.P., Shumovskaya M.A. Investigations of structural transformation within metal (austenite chromium-manganese steel) at the external surface of steam superheating tubes // *Thermal Engineering*. – 2016. – V. 63. – № 1. – P. 294–298.
7. Lokoshchenko A.M. Results of studying creep and long-term strength of metals at the Institute of Mechanics at the Lomonosov Moscow State University (to Yu.N. Rabotnov's Anniversary) // *Journal of Applied Mechanics and Technical Physics*. – 2014. – V. 55. – P. 118–135.
8. Structural instability in the early decomposition of supersaturated austenite solid solution / A.A. Makeev, L.L. Lyubimova, A.S. Zavorin, A.A. Tashlykov // *Steel in Translation*. – 2009. – V. 39. – P. 1048–1055.
9. Changes in the state of heat-resistant steel induced by repeated hot deformation / L.L. Lyubimova, R.N. Fisenko, A.A. Tashlykov, R.B. Tabakaev // *Metals and Materials International*. – 2018. – V. 24. – P. 121–129.
10. Паркус Г. Неустановившиеся температурные напряжения. – М.: Изд-во «Физматгиз», 1963. – 252 с.
11. Grin'E.A., Chernyshev V.V., Bochkarev V.I. Topical problems associated with reliability and safety of equipment at thermal power stations // *Thermal Engineering*. – 2018. – V. 65. – P. 515–523.
12. Investigation into the cyclic strength of the bodies of steam shutoff valves from 10Kh9MFB-Sh steel / V.N. Skorobogatikh, S.A. Kunavin, D.A. Prudnikov, I.A. Shchenkova, A.M. Bazhenov, V.A. Zadoinyi, G.L. Starkovskii // *Thermal Engineering*. – 2018. – V. 65. – P. 106–110.
13. Gladshtein V.I., Troitsky A.I., Lyubimov A.A. Evaluation of the long-term operating life of chromium-molybdenum-vanadium steel components with respect to micro-damage // *Power Technology and Engineering*. – 2018. – V. 52. – P. 336–341.
14. Panasyuk V., Dmytrakh I. Some actual problems of fracture mechanics of materials and structures // *Recent Advances Mechanics*. – Dordrecht: Springer Netherlands, 2011. – P. 413–435.
15. Махутов Н.А., Гаденин М.М., Колпишон Э.Ю. Оценка промышленной безопасности объектов тяжелого машиностроения по критериям рисков // *Тяжелое машиностроение*. – 2017. – № 10. – С. 2–10.
16. Диагностика прочности металлических конструкций / Н.Л. Вернези, А.А. Веремеенко, Е.Г. Веремеенко, А.М. Хутыз // *Новые технологии*. – 2012. – № 4. – С. 43–48.
17. Ziman J.M. Principles of the theory of solids. – Cambridge: Cambridge University Press, 1972. – 435 p.
18. Harrison W.A. Solid state theory. – USA: Courier Corporation, 1980. – 554 p.
19. Ibach H., Lüth H. Solid-state physics. – Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2009. – 515 p.
20. Ермаков С.С. Физика металлов и дефекты кристаллического строения. – Л.: Изд-во ЛГУ, 1989. – 271 с.
21. Wert C.A., Thomson R.M. Physics of solids. – New York: McGraw-Hill, 1964. – 436 p.
22. Горелик С.С., Скаков Ю.А., Растрогов Л.Н. Рентгенографический и электронно-оптический анализ. – М.: Изд-во МИСИС, 2002. – 360 с.
23. Русаков А.А. Рентгенография металлов. – М.: Атомиздат, 1977. – 480 с.
24. Woodruff D.P., Delchart T.A. Modern techniques of surface science. – Cambridge: Cambridge University Press, 1994. – 586 p.
25. Структурные аспекты циклической прочности / А.С. Заворин, Л.Л. Любимова, А.А. Ташлыков, К.В. Буваков // *Известия Томского политехнического университета. Инжиниринг георесурсов*. – 2018. – Т. 329. – № 11. – С. 124–135.
26. Масленков С.Б., Масленкова Е.А. Стали и сплавы для высоких температур: Справочник в двух книгах. – М.: Металлургия, 1991. – 382 с.
27. Friedel J., Cullity B.D., Crussard C. Study of the surface tension of a grainboundary in a metal as a function of the orientation of the two grains which the boundary separates // *Acta Metallurgica*. – 1953. – V. 1. – P. 79–92.
28. Иванова В.С. Разрушение металлов. Достижения отечественного металловедения. – М.: Металлургия, 1979. – 168 с.
29. Регель В.Р., Слущер А.И., Тамашевский Э.Е. Кинетическая природа прочности твердых тел. – М.: Наука, 1974. – 560 с.

Поступила 15.10.2020 г.

Информация об авторах

Заворин А.С., доктор технических наук, профессор научно-образовательного центра И.Н. Бутакова Инженерной школы энергетики Национального исследовательского Томского политехнического университета.

Любимова Л.Л., кандидат технических наук, доцент научно-образовательного центра И.Н. Бутакова Инженерной школы энергетики Национального исследовательского Томского политехнического университета.

Буваков К.В., кандидат технических наук, доцент научно-образовательного центра И.Н. Бутакова Инженерной школы энергетики Национального исследовательского Томского политехнического университета.

Фисенко Р.Н., инженер организационного отдела Инженерной школы энергетики Национального исследовательского Томского политехнического университета.

Ташлыков А.А., кандидат технических наук, доцент научно-образовательного центра И.Н. Бутакова Инженерной школы энергетики Национального исследовательского Томского политехнического университета.

Артамонов А.И., кандидат технических наук, доцент научно-образовательного центра И.Н. Бутакова Инженерной школы энергетики Национального исследовательского Томского политехнического университета.

UDC 621.184.2-192

ROOT-MEAN-SQUARE DEVIATIONS OF ATOMIC POSITIONS – NANOSCALE INDICATOR OF SURFACE CONDITION

Alexander S. Zavorin¹,
zavorin@tpu.ru

Lyudmila L. Lyubimova¹,
lll@tpu.ru

Konstantin V. Buvakov¹,
buvakov@tpu.ru

Roman N. Fisenko¹,
ronifis@tpu.ru

Alexander A. Tashlykov¹,
tashlykov@tpu.ru

Alexander I. Artamontsev¹,
a_art @tpu.ru

¹ National Research Tomsk Polytechnic University,
30, Lenin avenue, Tomsk, 634050, Russia.

The study relevance is associated with the need of increasing the reliability of welded joints in steam power plants, hence with a rational use of product materials due to improvement and development of methods for studying the physical characteristics.

Purpose of the study is to introduce the new nanoscale structural criteria of the third kind to assess the surface condition.

Object of the study is specimens of heat-resistant steel tubular heating surfaces of steam boilers.

Methods include physical modeling of operating conditions by thermal cycling in the MIMP-10UE electric furnace, cyclic cold deformation by means of a hydraulic press, roentgenometry of specimens with evaluation of the root-mean-square deviations and internal structural stresses using the DRON X-ray diffractometers, analysis of surface morphology with the portable electron microscope PENSCOPE with 20x magnification.

Results. Experimental studies, related to quantitative evaluation of the amplitude of atomic vibration and its evolution during cyclic thermal and mechanical loads, resulted in introduction of a new diagnostic parameter – the amplitude of atomic vibration \bar{U}^2 , reflecting the fundamental nature of interatomic bonds. Correlation between the root-mean-square deviations of atoms (the microscale level of properties), which are the microstructural characteristics of the third kind, and the macromechanical characteristics $\sigma_{0.2}$ and σ_B (the macroscale level of properties) was demonstrated. As the offset yield point and ultimate strength point are related to strength and breaking, then the root-mean-square deviations of atoms can be used as an indicator for damage and an indicator of limit states. The parameter \bar{U}^2 can also be a characteristic of the current physical state of metal. The new method for assessment of current and limit states was suggested. It was shown that structure restoration is monitored at the atomic microscale level, using the vibration amplitude and the stresses of the first kind.

Key words:

Steel, heating surface, cyclic mechanical deformation, thermal cycling, X-ray diffraction, root-mean-square deviations, internal stresses of the first kind.

The research was financially supported by the RFBR within the scientific project no. 18-08-01265.

REFERENCES

- Gnevko A.I. Nature of fracture of metals and its analogs in the behavior of other kinds of matter. *Metal Science and Heat Treatment*, 2008, vol. 50, pp. 149–163.
- Limar O.V., Fominykh V.A. Designing the Load-elongation curve diagram for pipelines according to the accepted standards. *Truboprovodny transport teoriya i praktika*, 2017, no. 3, pp. 34–37. In Rus.
- El-Mahallawi I., Khalifa W., El-Saady M., El-Koussy M.R. Welding-associated failures in power boilers. *Handbook of Materials Failure Analysis with Case Studies from the Chemicals, Concrete and Power Industries*. Giza, Egypt, Department of Metallurgical Engineering, Cairo University, 2006. pp. 387–410.
- Lazić V., Arsić D., Nikolić R.R., Rakić D., Aleksandrović S., Djordjević M., Hadzima B. Selection and analysis of material for boiler pipes in a steam plant. *Procedia Engineering*, 2016, vol. 149, pp. 216–223.
- Chu Q., Zhang M., Li J., Chen Y., Luo H., Wang Q. Failure analysis of a steam pipe weld used in power generation plant. *Engineering Failure Analysis*, 2014, vol. 44, pp. 363–370.
- Bogachev V.A., Pshechenkova T.P., Shumovskaya M.A. Investigations of structural transformation within metal (austenite chromium-manganese steel) at the external surface of steam superheating tubes. *Thermal Engineering*, 2016, vol. 63, no. 1, pp. 294–298.
- Lokoshchenko A.M. Results of studying creep and long-term strength of metals at the Institute of Mechanics at the Lomonosov Moscow State University (to Yu.N. Rabotnov's Anniversary). *Journal of Applied Mechanics and Technical Physics*, 2014, vol. 55, pp. 118–135.
- Makeev A.A., Lyubimova L.L., Zavorin A.S., Tashlykov A.A. Structural instability in the early decomposition of supersaturated austenite solid solution. *Steel in Translation*, 2009, vol. 39, pp. 1048–1055.

9. Lyubimova L.L., Fisenko R.N., Tashlykov A.A., Tabakaev R.B. Changes in the state of heat-resistant steel induced by repeated hot deformation. *Metals and Materials International*, 2018, vol. 24, pp. 121–129.
10. Parkus G. *Neustanovivshiesya temperaturnye napryazheniya* [Unsteady thermal stresses]. Moscow, Fizmatgiz Publ., 1963. 252 p.
11. Grin E.A., Chernyshev V.V., Bochkarev V.I. Topical problems associated with reliability and safety of equipment at thermal power stations. *Thermal Engineering*, 2018, vol. 65, pp. 515–523. In Rus.
12. Skorobogatikh V.N., Kunavin S.A., Prudnikov D.A., Shchenkova I.A., Bazhenov A.M., Zadoyni V.A., Starkovskii G.L. Investigation into the Cyclic Strength of the Bodies of Steam Shutoff Valves from 10Kh9MFB-Sh Steel. *Thermal Engineering*, 2018, vol. 65, pp. 106–110. In Rus.
13. Gladstein V.I., Troitsky A.I., Lyubimov A.A. Chromium-molybdenum-vanadium steel components with respect to micro-damage. *Power Technology and Engineering*, 2018, vol. 52, pp. 336–341.
14. Panasyuk V., Dmytrakh I. Some actual problems of fracture mechanics of materials and structures. *Recent Advances Mechanics*. Dordrecht, Springer Netherlands Publ., 2011. pp. 413–435.
15. Makhutov N.A., Gadenin M.M., Kolpishon E.Y. Otsenka promyshlennoy bezopasnosti obyektov tyazhelogo mashinostroeniya po kriteriyam riskov [Safety evaluation of heavy engineering facilities by risk criteria]. *Tyazheloye Mashinostroyeniye*, 2017, no. 10, pp. 2–10.
16. Vernezi N.L., Veremeenko A.A., Veremeenko E.G., Khoutzy A.M. Diagnostika prochnosti metallicheskih konstruksiy [Diagnostics of strength of metal structures]. *Novye Tekhnologii*, 2012, no. 4, pp. 43–48. In Rus.
17. Ziman J.M. *Principles of the theory of solids*. Cambridge, Cambridge University Press Publ., 1972. 435 p.
18. Harrison W.A. *Solid state theory*. USA, Courier Corporation Publ., 1980. 554 p.
19. Ibach H., Lüth H. *Solid-State Physics*. Berlin, Heidelberg, Springer Berlin Heidelberg, 2009. 515 p.
20. Ermakov S.S. *Fizika metallov i defekty kristallicheskogo stroeniya* [Physics of metals and crystal structure defects]. Leningrad, Leningr. Univ. Publ., 1989. 271 p.
21. Wert C.A., Thomson R.M. *Physics of solids*. New York, McGraw-Hill, 1964. 436 p.
22. Gorelik S.S., Skakov Y.A., Rastorguev L.N. *Rentgenograficheskiy i elektronno-opticheskiy analiz* [X-ray and electron-optical analysis]. Moscow, MISIS Publ., 2002. 358 p.
23. Rusakov A.A. *Rentgenografiya metallov* [X-ray analysis for metals]. Moscow, Atomizdat Publ., 1977. 480 p.
24. Woodruff D.P., Delchart T.A. *Modern techniques of surface science*. Cambridge, Cambridge University Press, 1994. 586 p.
25. Zavorin A.S., Lyubimova L.L., Tashlykov A.A., Buvakov K.V. Structural aspects of cyclical strength of a superheater weldment. *Bulletin of the Tomsk Polytechnic University. Geo Assets Engineering*, 2018, vol. 329, no. 11, pp. 124–135. In Rus.
26. Maslenkov S.B., Maslenkova E.A. *Stali i splavy dlya vysokikh temperatur* [Steel and alloys for high temperatures]. Moscow, Metallurgiya Publ., 1991. 382 p.
27. Friedel J., Cullity B.D., Crussard C. Study of the surface tension of a grainboundary in a metal as a function of the orientation of the two grains which the boundary separates. *Acta Metallurgica*, 1953, vol. 1, pp. 79–92.
28. Ivanova V.S. *Razrusheniye metallov. Dostizheniya otechestvennogo metallovedeniya* [Failure of metals. Achievements of domestic metallurgy]. Moscow, Metallurgiya Publ., 1979. 168 p.
29. Regel V.R., Slucker A.I., Tamashevskiy E.E. *Kineticheskaya priroda prochnosti tverdykh tel* [Kinetic nature of strength of solid bodies]. Moscow, Nauka Publ., 1974. 560 p.

Received: 15 October 2020.

Information about the authors

Alexander S. Zavorin, Dr. Sc., professor, National Research Tomsk Polytechnic University.

Lyudmila L. Lyubimova, Cand. Sc., associate professor, National Research Tomsk Polytechnic University.

Konstantin V. Buvakov, Cand. Sc., associate professor, National Research Tomsk Polytechnic University.

Roman N. Fisenko, engineer, National Research Tomsk Polytechnic University.

Alexander A. Tashlykov, Cand. Sc., associate professor, National Research Tomsk Polytechnic University.

Alexander I. Artamontsev, Cand. Sc., associate professor, National Research Tomsk Polytechnic University.