

УДК 519.6

DOI: 10.15587/1729-4061.2014.27988

Вивчений вплив властивостей та поведінки індивідуальних ланок полімерної молекули на властивості ентропійної еластичності полімеру. В моделюванні методом Монте-Карло проведена оцінка ентропійного вкладу в загальну еластичну силу. Результати атомарного моделювання порівнюються з результатами аналітичної моделі для полімерів. Розглядаються межі лінійних та нелінійних еластичних режимів та залежності від молекулярної ваги та геометричних параметрів молекули

Ключові слова: Монте-Карло, модель, моделювання, ентропія, еластичність, полімери, мономери, властивості, радіус, гірація

Исследовано влияние свойств и поведения индивидуальных звеньев полимерной молекулы на свойства энтропийной эластичности полимера. В моделировании методом Монте-Карло произведена оценка энтропийного вклада в общую эластичную силу. Результаты атомарного моделирования сравниваются с результатами аналитической модели для полимеров. Рассматриваются границы линейных и нелинейных эластичных режимов и зависимости от молекулярного веса и геометрических параметров молекулы

Ключевые слова: Монте-Карло, модель, моделирование, энтропия, эластичность, полимеры, мономеры, свойства, радиус, гирация

МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО СВОЙСТВ ЭНТРОПИЙНОЙ ЭЛАСТИЧНОСТИ МОЛЕКУЛ ПОЛИМЕРОВ В АТОМАРНОМ РАЗРЕШЕНИИ

М. В. Гранкин

Аспирант

Кафедра информатики

Приазовский государственный технический университет

ул. Университетская 7, г. Мариуполь,

Донецкая обл., Украина, 87500

E-mail: theflint@gmail.com

А. А. Каргин

Доктор технических наук, профессор

Кафедра компьютерных технологий

Донецкий национальный университет

ул. Университетская, 24, г. Донецк, Украина, 83001

E-mail: kargin@dongu.donetsk.ua

Э. Г. Карпов

Доктор технических наук, профессор

Факультет гражданского инженерного дела и

материаловедения

Университет Иллинойса в Чикаго

2095 Engineering Research Facility

842 W. Taylor Street (M/C 246)

Chicago, Illinois 60607-7023, USA

E-mail: ekarpov@uic.edu

1. Введение

Все полимеры, за исключением находящихся в кристаллическом или стеклообразном состоянии, обладают свойством высокоэластичности. Упругость обычных твердых тел связана с изменением равновесного расстояния между молекулами и, соответственно, внутренней энергии образца. Полимеры состоят из длинных полимерных цепей. Упругость полимерных сеток складывается из упругостей отдельных субцепей, шитых в сетку. Растяжение меняет равновесное расстояние между концами субцепей, переводя их из более вероятного состояния в менее вероятное. Таким образом, эластичность полимеров имеет энтропийную природу. Высокоэластичность – наиболее яркое проявление специфических свойств полимерных ма-

териалов, ее природа связана с фундаментальными свойствами идеальных полимерных цепей. Энергия идеальной полимерной цепи равна нулю. Под действием внешней силы цепь растягивается и принимает менее вероятную конформацию, вследствие этого ее энтропия уменьшается. Таким образом, и упругость одиночной цепи (полимерной молекулы) имеет чисто энтропийную природу.

Теоретическое предсказание механических свойств полимерных молекул, в особенности сложных биомолекул (белков, липидов и т. п.) [1, 2], затруднено из-за влияния эффектов энтропийной эластичности. Энтропийная эластичная сила возникает благодаря вырождению функции потенциальной энергии молекулы в конфигурационном пространстве. Энтропийно-зависимый член – TS , где S – энтропия, T – температура

системы, может давать значительный вклад в свободную энергию F полимерной цепи и даже превышать межатомную потенциальную энергию U , когда молекулярная цепь подвергается внешним механическим нагрузкам. Подход, основанный на методе Монте-Карло для вычисления S , позволяет достичь атомарного разрешения для молекулярной структуры, в отличие от аналитических методов.

2. Анализ литературных данных и постановка проблемы

Существующие современные аналитические методы оценок энтропийной эластичности [3, 4], используют уравнение свободной термодинамической энергии Гельмгольца [5, 6], $F=U-TS$ в качестве базовой физической характеристики системы, выполняющей механическую работу при постоянной T . Однако, эти методы мало внимания отводят изучению и моделированию эластичных свойств отдельных молекул в атомарном приближении [7]. Энтропийная эластичность определяется термически индуцированными стохастическими переходами между различными геометрическими конфигурациями полимерной цепи, которые постоянно происходят в материале на атомарном уровне. Анализ этих геометрических конформаций с целью получения зависимости энтропии от деформации сложен из-за большого числа внутренних степеней свободы и высокого уровня вырождения межатомной функции потенциальной энергии даже в случае простых полимерных цепей.

Стохастический подход к изучению энтропийных эластичных свойств полимерных цепочек, основанный на методе Монте-Карло [8, 9], позволяет рассчитывать поведение отдельных атомов в молекуле для определения вклада энтропийной составляющей в общую эластичную силу полимерных молекул. С помощью моделирования в [10] были получены диаграммы растяжения для группы молекул с вырожденными профилями потенциальной энергии. Энтропийные эластичные свойства рассчитывались путем воспроизведения функции плотности вероятности для конфигурационной энтропии молекул. Результаты моделирования сравнивались с аналитической моделью для подобных полимеров. Линейный режим энтропийных эластичных сил наблюдается в широком диапазоне молекулярных параметров в соответствии с общей аналитической моделью [3]. Однако современные атомные модели демонстрируют, что общепринятая непрерывная линейность энтропийной эластичности не проявляет себя при очень малых и очень больших удлинениях молекул под внешней нагрузкой. Границы линейного режима зависят от угла атомных связей. Детальное изучение таких процессов требует привлечения стохастического моделирования, в основу которого может быть положен метод Монте-Карло [8, 9].

3. Цель и задачи исследования

Цель работы – применение эффективного стохастического подхода к изучению энтропийных

эластичных свойств индивидуальных полимерных цепочек, основанный на методе Монте-Карло и расчет поведения отдельных атомов в молекуле для определения вклада энтропийной составляющей в общую эластичную силу полимерных молекул. Задачи работы: получение, путем численного моделирования, диаграмм растяжения для групп молекул с вырожденным профилем потенциальной энергии и сравнение результатов моделирования на атомарном уровне с результатами аналитической модели. Определение границы линейных и нелинейных эластичных режимов и зависимости от молекулярного веса и геометрических параметров молекулы. Разработка алгоритма и создание программы для исследования энтропийных эластичных свойств полимерных цепочек методом Монте-Карло.

4. Энтропийная эластичность линейных полимерных молекул

В присутствии значительных энтропийных эффектов, эластический отклик физической системы при постоянной температуре T на внешнюю нагрузку определяется потенциалом свободной термодинамической энергии системы с подобным откликом [3]. Введем переменную L , обозначающую расстояние между двумя конечными точками молекулы полимерной цепи, подверженной действию внешних сил f . Изменение свободной энергии может быть записано как $\partial F = -f\partial L$. Правая часть здесь представляет элементарную механическую работу внешних сил на сокращение или удлинение молекулы. С учетом термодинамического определения потенциала Гельмгольца свободной энергии [5, 6]:

$$f = -\frac{\partial F}{\partial L} = -\frac{\partial(U-TS)}{\partial L} = -\frac{\partial U}{\partial L} + T\frac{\partial S}{\partial L}. \quad (1)$$

Из (1) следует, что изменение внутренней энергии при постоянной T может происходить только благодаря изменениям потенциальной энергии атомных взаимодействий из-за вариаций длин и углов связей в полимерной молекуле. Первый член в правой части уравнения (1) представляет обычную эластичную силу (f_U), а второй член это энтропийная эластичная сила (f_S). Энтропийная сила зависит от геометрических трансформаций молекулы. Если подобная трансформация происходит при неизменной потенциальной энергии молекулы, то изменяющаяся энтропия является единственным вкладом в f :

$$\frac{\partial U}{\partial L} = 0: f = f_S = T\frac{\partial S}{\partial L}. \quad (2)$$

Выражение $\partial U/\partial L = 0$ в (2) представляет «идеальный эластомер», где f_S значительно превосходят энергетические эластичные силы. Растяжение или сжатие цепи «идеального эластомера» не связано с изменениями длин или углов молекулярных связей, а рассматривается как результат переориентации индивидуальных блоков в молекуле относительно друг друга. Например, для молекулы этана C_2H_6 это симметричная трансформация поворота группы $3H$ вокруг

связи С–С. Общая форма соответствующего вращательного потенциала

$$U_\phi = U_0[1 - \cos(3\phi)], \tag{3}$$

где угол ϕ описывает ориентацию двух групп 3Н в молекуле относительно друг друга. Три минимума потенциальной энергии соответствуют трем стабильным ориентациям групп 3Н атомов водорода под углами $\phi=0, 120$ и 240 . Существование нескольких молекулярных конфигураций с идентичными значениями потенциальной энергии в локальных повторяющихся группах приводит к сильному вырождению функции общей потенциальной энергии молекулы. Под действием внешней нагрузки, молекула может реагировать изменением своей конфигурации с последующим уменьшением энтропии, вместо запасания потенциальной энергии как обычное эластичное тело.

Зависимость молекулярной энтропии от длины растяжения, $S(L)$, может быть введена с использованием отношения Больцмана $S(L) = k_B \ln w(L)$, где k_B – постоянная Больцмана, и введением зависимости функции конфигурационной вероятностной плотности w от параметра L . С учетом (2):

$$f_s(L) = k_B T \frac{\partial}{\partial L} \ln w(L). \tag{4}$$

В случае очень большого числа мономеров, когда расстояние между двумя соседними мономерами становится пренебрежимо малым по сравнению с общей длиной полимерной цепи, можно принять, что L является распределенной в пространстве величиной. Распределение для L тогда может быть получено путем установки центра прямоугольной системы координат в начало полимерной молекулы и анализа позиции конечной точки мономера в этой системе. Каждая из координат свободного конца является случайным числом, нормально распределенным вокруг нуля с некоторым отклонением a , которое зависит от внутренних свойств молекулы. Функция плотности распределения вероятности для параметра L между двумя нагруженными конечными точками полимерной цепи является сферическим нормальным распределением вычисляется по формуле [11]:

$$w(L) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{L^2}{a^3} e^{-L^2/2a^2}. \tag{5}$$

Из распределения (5) $L_0 = a\sqrt{2}$, $\bar{L} = a\sqrt{8/\pi}$, где L_0 – длина молекулы без действия внешней силы (релаксированная длина молекулы). Аналитическое распределение (5) дает энтропию и энтропийную силу, согласно отношению Больцмана и (4), в виде:

$$S(L) = \text{const} + k_B \left(2 \ln \frac{L}{a} - \frac{L^2}{2a^2} \right),$$

$$f_s(L) = T \frac{\partial S}{\partial L} = k_B T \left(\frac{2}{L} - \frac{L}{a^2} \right). \tag{6}$$

Как видно, энтропийная сила линейна по отношению к L в случаях, когда $L > L_0$, так как член $2/L$ много меньше $-L/a^2$ и им можно пренебречь.

5. Применение метода Монте-Карло для моделирования поведения звеньев полимера

В рамках аналитической модели параметр отклонения a для распределения в уравнении (5) не может быть объяснен, так как модель не принимает во внимание внутреннюю атомную структуру полимера. Более того, полагая величину L непрерывной, подразумевается возможность существования полимерной цепи с критически малым радиусом кривизны, невозможным в фактической структуре атомных связей в полимере.

Рассмотрим модель полимерной цепи, представленную на рис. 1, где вектора A , B и C демонстрируют пространственную ориентацию внутримonomерных связей, как, например, связь С–С в молекуле полиэтилена.

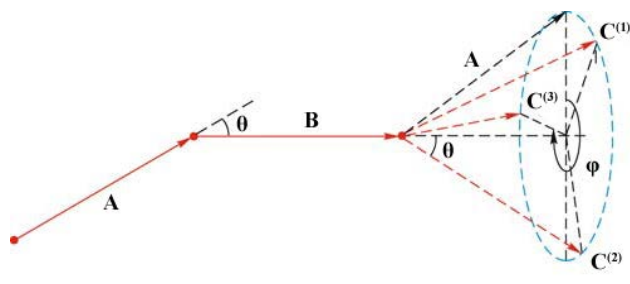


Рис. 1. Относительная ориентация трех внутримonomерных связей (вектора A , B и C) участка полимерной молекулы; θ – угол связи в пространственной структуре молекулы

Угол θ между парой соседних связей внутри мономера, а также длина связи u , являются базовыми характеристиками цепи, определяющими ее свойства энтропийной эластичности. Другим важным параметром является общее количество мономеров N_e в рассматриваемой цепи. Две связи A и B задают плоскость так, что следующая соседняя связь C формирует угол ϕ , равный одному из трех случайных значений, соответствующих наиболее энергетически выгодным конфигурациям для данной локальной группы. В частности, три возможных конфигурации угла ϕ составляют 0° , 120° или 240° для молекулы полиэтилена. Общее число возможных глобальных конфигураций для всей полимерной молекулы с N_e числом мономеров в таком случае будет равно n^{N_e-1} , где n – число возможных углов ϕ_i ($n=3$ в примере выше). Если локальные потенциальные минимумы одинаковы для всех трех значений ϕ , то число 3^{N_e-1} показывает степень вырождения глобального молекулярного потенциала в пространстве конфигураций. Например, при $N_e=1000$ общее число конфигураций составляет $4,4 \times 10^{476}$. Непосредственный анализ такого большого числа конфигураций для оценки формы распределения $w(L)$ затруднителен.

Для этого можно использовать вероятностный метод Монте-Карло путем выборки большого числа случайных молекулярных конфигураций N_0 и построения гистограммы с приближенным распределением $w(L)$. Процедура выборки использует вероятности P_i реализации каждого из углов ϕ_i в локальной группе связей, изображенной на рис. 1. Эти вероятности могут быть найдены как асимптотические ($t \rightarrow \infty$) решения уравне-

ний кинетического баланса с матрицей вероятностей перехода r_{ij} . Значения коэффициентов r_{ij} могут быть получены, зная соответствующие энергии активации вращательных трансформаций исходя из локальных потенциалов в уравнении (3). Так как подход является квазистатическим, достаточно определение относительных вероятностей процессов вместо фактических частотных факторов. Согласно теории переходных состояний, эти относительные вероятности пропорциональны Больцмановским факторам $r_{i,j} \sim \exp(-E_{ij}/k_B T)$. Где E_{ij} – энергия активации перехода $i \rightarrow j$. Асимптотическое решение кинетических уравнений при $t \rightarrow \infty$ может быть найдено путем решения системы линейных уравнений типа

$$\begin{aligned} P_1(r_{12} + r_{13}) &= P_2r_{21} + P_3r_{31}, \\ P_2(r_{21} + r_{23}) &= P_1r_{12} + P_3r_{32}, \\ P_1 + P_2 + P_3 &= 1. \end{aligned} \quad (7)$$

Здесь, последнее уравнение показывает, что система может находиться лишь в одном из трех возможных состояний. На следующем шаге вероятности P_i используются в алгоритме Монте-Карло для создания случайной глобальной конфигурации полимерной молекулы. Примеры конфигураций показаны на рис. 2, для различных углов связей θ . В этом и последующих примерах наборы φ_i и P_i взяты равными $\{0^\circ, 120^\circ, 240^\circ\}$ и $\{1/3, 1/3, 1/3\}$ соответственно.

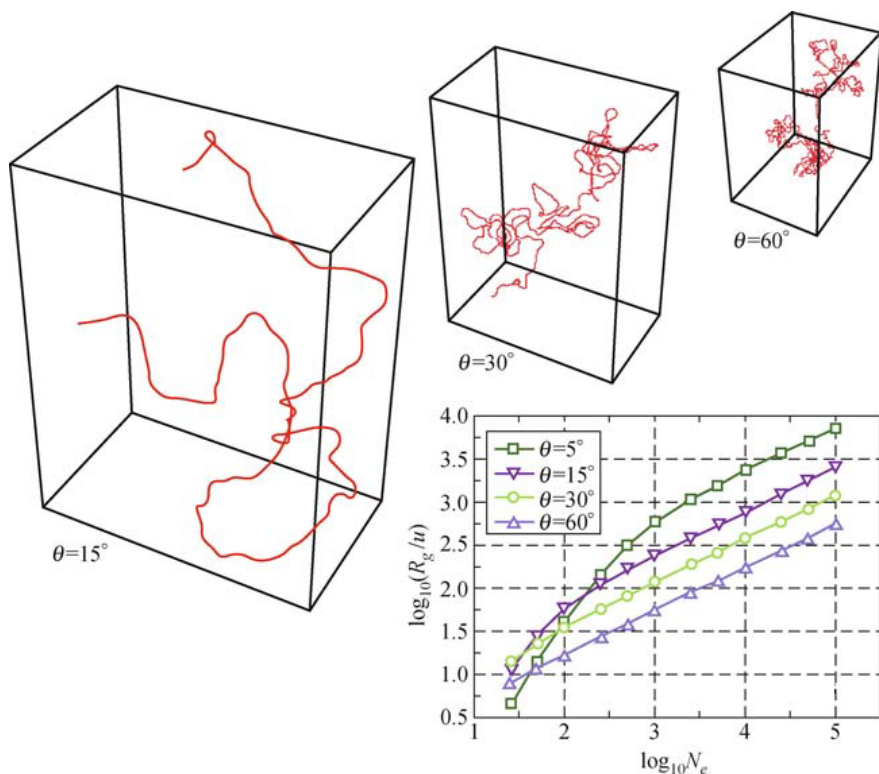


Рис. 2. Примеры геометрической конфигурации молекулы для различных углов связи θ и числа мономеров N_e . Во вставке показана зависимость радиуса гирации от N_e

Как видно из рис. 2, угол связи θ оказывает большое влияние на общую геометрию молекулы. В частности, можно ввести радиус гирации молекулы,

$$\begin{aligned} R_g^2 &= \frac{1}{2N_e^2} \sum_{i,j} (r_i - r_j)^2 \cong \frac{1}{N_e} \sum_{i=1}^N (r_i - \bar{r})^2, \bar{r} = \frac{1}{N_e} \sum_{i=1}^N r_i, \\ R_g^2 &= \frac{1}{2N_e^2} \sum_{i,j} (r_i - r_j)^2 \cong \frac{1}{N_e} \sum_{i=1}^N (r_i - \bar{r})^2, \bar{r} = \frac{1}{N_e} \sum_{i=1}^N r_i, \end{aligned} \quad (8)$$

где r_i – координатный вектор i -го мономера в системе и \bar{r} – центроида молекулы в этой же системе. Радиус гирации R_g это базовый геометрический параметр полимерной цепи, который определяет средний радиус сферического объема, занятого молекулой, описанной определенным набором локальных параметров ($\theta, u, \varphi_i, P_i$). Параметр u задает геометрический масштаб, и был принят равным 1. Поэтому единица измерения длины расчётных величин, на рис. 4, является типичной длиной связи и обычно равняется нескольким ангстремам.

Для каждого заданного интервала значений расчетного параметра L между L_i и $L_i + \Delta L$ метод Монте-Карло дает значение N_i – количество молекулярных конфигураций, которые попадают в границы этого интервала. Затем значение функции распределения $w(L)$ при $L = L_i$ вычисляется как

$$w(L_i) \cong \frac{N_i(L_i, L_i + \Delta L)}{N_0 \Delta L}. \quad (9)$$

Точность этого приближения растет при увеличении N_0 и уменьшении ΔL . Примеры этого распределения показаны в виде гистограммы на рис. 3 для различных θ . Эти гистограммы сравниваются с аналитическим распределением (5) рассчитанным для тех же значений L_0 , что и численное распределение. Формы дискретного и непрерывного распределений сильно различаются при малых θ (порядка 5–10), как видно на рис. 3, б, тогда как при углах больших 30, они совпадают (рис. 3, а)

Так как распределение $w(L)$ определяет свойства энтропийной и эластичной функций, атомарная модель демонстрирует существенные отклонения в физическом поведении от непрерывной модели для малых θ . Действительно, численный расчет зависимостей энтропийной (рис. 4, а, рис. 4, в) и эластичной (рис. 4, б, рис. 4, г) сил дает результаты для полимерной цепи из 1000 мономеров под различными углами θ . Здесь общее число дискретных молекулярных конфигураций $N_0 = 10^5$. Поведение f_S в атомарной модели подобно ее поведению в непрерывной модели, однако для очень малых и очень больших углов f_S нелинейна не только при малых L , как в непрерывной модели, но и при больших L . Более того, f_S для молекул с малым радиусом гирации (плотно упакованные

полимеры), т.е. для молекул с большим значением θ , линейна в режимах растяжения и разворачивания (рис. 4, б), тогда как для очень слабо упакованных молекул (малые θ) f_S линейна в режиме сжатия (рис 4, з).

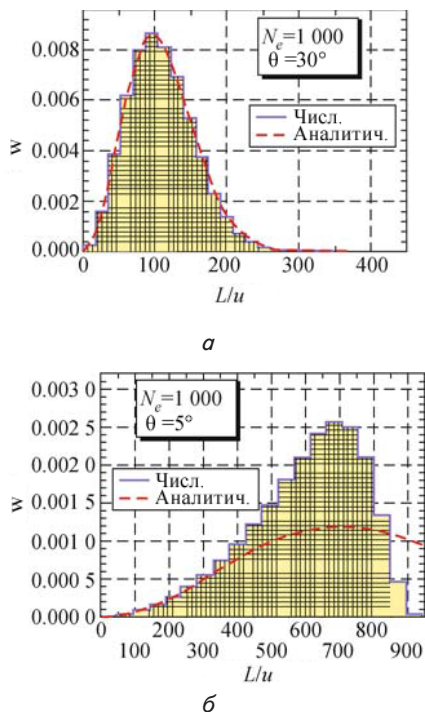


Рис. 3. Сравнение распределения $w(L)$, полученного путем численного моделирования (уравнение (9)), и решения аналитической модели (уравнение (5)) для различных углов связи θ : а – $\theta=30^\circ$; б – $\theta=5^\circ$

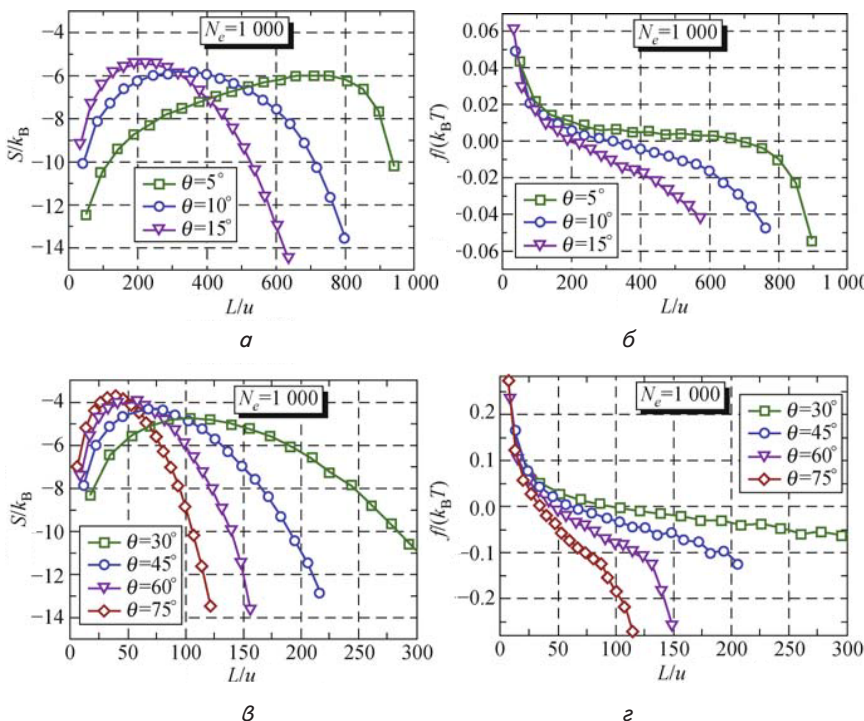


Рис. 4. Зависимость молекулярной энтропии и энтропийной эластичной силы от L/u для различных углов связи θ : а, б – для малых θ ; в, г – для больших θ . u – расстояние между двумя соседними мономерами

Протяженные линейные режимы f_S наблюдались в рассматриваемых полимерах при всех значениях θ в случае небольших удлинений молекулы. Подобно радиусу гирации, релаксированная длина L_0 росла пропорционально $N_e^{1/2}$ при $N_e > 1000$ и асимптотически приближалась к результатам аналитической модели при $N_e \rightarrow \infty$. В это же время значительные расхождения с моделью наблюдались при $N_e < 1000$ и значении углов связи $\theta \leq 15^\circ$.

6. Выводы

Рассмотрен эффективный механизм, использующий метод Монте-Карло, расчета энтропийных эластических свойств полимерных молекул с атомарным разрешением, когда прямой анализ молекулярных конфигураций при $n \geq 3$ и $N_e > 30$ затруднителен. Атомарные параметры, определяющие общие геометрические (радиус гирации) и энтропийно-эластичные свойства (свойство линейности, модуль эластичности и релаксированная длина) полимерной молекулы, включают в себя межмономерную длину связи u и угол θ , набор относительных углов поворота ϕ_i соседних мономеров и набор вероятностей перехода P_i . Эти параметры также определяют степень вырожденности общей потенциальной энергии молекулы в пространстве конфигураций.

Разработан алгоритм и создана программа на основе метода Монте-Карло. С ее помощью на основании численного моделирования построены диаграммы растяжения и проведено сравнение результатов моделирования с результатами, полученными с помощью непрерывной модели полимера. Значительное расхождение с непрерывной моделью наблюдалось при малых углах связей для всех L . Линейность f_S проявлялась в широком диапазоне удлинений, однако, молекулы с малым радиусом гирации (плотно упакованные полимеры) линейны в основном при растяжении или разворачивании, в то время как слабо упакованные молекулы линейны в режиме сжатия. Найдено, что нелинейные режимы наблюдаются не только при сжатии, как предсказывает непрерывный подход, но и для больших растяжений при очень больших и очень малых радиусах гирации. Этот результат не воспроизводится в рамках обычных моделей на основе систем дифференциальных уравнений, а возможен с применением метода Монте-Карло.

Литература

1. Zuckerman, D. M. Statistical Physics of Biomolecules: An Introduction [Text] / D. M. Zuckerman. – CRC Press, 2010. – 356 p. doi: 10.5860/choice.48-2065

2. Bhutani, S. P. Chemistry of Biomolecules [Text] / S. P. Bhutani. – CRC Press, 2010. – 304 p.
3. Stroble, G. The Physics of Polymers: Concepts for Understanding Their Structures and Behavior [Text] / G. Stroble. – Springer, 2007. – 518 p.
4. Broedersz, C. P. Nonlinear elasticity of composite networks of stiff biopolymers with flexible linkers [Text] / C. P. Broedersz, C. Storm, F. C. MacKintosh // Phys. Rev. Lett. – 2008. – Vol. 101, Issue 11. – P. 118103–118107. doi: 10.1103/PhysRevLett.101.118103
5. Landau, L. D. Statistical Physics. 3rd ed. (Course of Theoretical Physics, Vol. 5) [Text] / L. D. Landau, E. M. Lifshitz. – Butterworth-Heinemann, 1980. – 544 p.
6. Laurendeau, N. Statistical Thermodynamics: Fundamentals and Applications [Text] / N. Laurendeau. – Cambridge University Press, 2005. – P. 205–222. doi:10.1017/cbo9780511815928.015
7. Strick, T. R. Stretching of macromolecules and proteins [Text] / T. R. Strick, M. N. Dessinges, G. Charvin // Reports on Progress in Physics. – 2003. – Vol. 66. – P. 1–45. doi: 10.1088/0034-4885/66/1/201.
8. Gardiner, C. W. Handbook of Stochastic Methods [Text] / C. W. Gardiner. – Springer, 2004. – 442 p.
9. Karpov, E. G. Mechano-kinetic coupling approach for functional materials with dynamic internal structure [Text] / E. G. Karpov, S. Chaichenets, W. K. Liu // Philosoph. Mag. Lett. – 2010. – Vol. 90, Issue 7. – P. 471–480. doi: 10.1080/09500831003761933
10. Borsali, R. Soft-Matter Characterization [Text] / R. Borsali, R. Pecora. – Springer, 2008. – 1452 p. doi: 10.1007/978-1-4020-4465-6
11. Karpov, E. G. Atomic Scale Monte-Carlo Studies of Entropic Elasticity Properties of Polymer Chain Molecules [Text] / E. G. Karpov, M. V. Grankin // Adv. in Soft Matter Mech. 2012. – P. 147–163. doi: 10.1007/978-3-642-19373-6_5.

Вивчені особливості впливу високотемпературної витримки на фазовий склад і показники тріщиностійкості спечених сплавів зі структурно-нестабільною зв'язкою та TiC. Сплави систем TiC-Ti-Ni і Ti-Ni-Fe мають високий опір руйнуванню в стані після спікання, але при експлуатації рекомендується уникати дії $t=800...1100$ °C для зменшення ризику окрихчування у зв'язку з виділенням інтерметалідів

Ключові слова: порошковий сплав, карбід титану, спікання, фазовий склад, крихкість, ідентифікація

Изучены особенности влияния высокотемпературной выдержки на фазовый состав и показатели трещиностойкости спеченных сплавов со структурно-нестабильной связкой и TiC. Сплавы систем TiC-Ti-Ni и Ti-Ni-Fe обладают высоким сопротивлением разрушению в состоянии после спекания, но при эксплуатации рекомендуется избегать воздействия $t=800...1100$ °C для уменьшения риска окрихчувания в связи с выделением интерметаллидов

Ключевые слова: порошковый сплав, карбид титана, спекание, фазовый состав, хрупкость, индентирование

УДК 669.017.3+669-138.8; 620.178.15

DOI: 10.15587/1729-4061.2014.27564

ИЗУЧЕНИЕ ВЛИЯНИЯ ТЕРМИЧЕСКОЙ ОБРАБОТКИ НА СТРУКТУРУ И СВОЙСТВА СПЕЧЕННЫХ СПЛАВОВ TiC-Ti-Ni, TiC-Ni-Fe

В. В. Пашинский

Доктор технических наук, доцент, профессор*

E-mail: vvpashynsky@gmail.com

М. Г. Субботина

Аспирант*

E-mail: pbm-box@mail.ru

*Кафедра «Физическое материаловедение»
Донецкий национальный технический университет
ул. Артема, 58, г. Донецк, Украина, 83001

1. Введение

На износ и причины выхода из строя прокатных валков оказывает влияние множество внутренних и внешних факторов. Среди внутренних факторов можно выделить фазовый и структурный состав, определяющие физико-механические свойства материала, из которого изготовлен инструмент. Дефицитность и высокая стоимость сырья для производства классических сплавов WC-Co создали предпосылки для поиска альтернативных составов сплавов, содержащих другие карбиды (например, TiC) и матрицу из никеля, железа,

титана [1]. Однако в системах Ni-Ti, Ti-Fe может происходить ряд фазовых превращений [2], что, безусловно, повлияет на эксплуатационную стойкость инструмента и требует детального изучения.

2. Анализ литературных данных

При выборе сплавов для изготовления прокатных валков необходимо отталкиваться от выбора, во-первых, оптимальных технологических параметров производства, и во-вторых, составов, обеспечивающих