

2. Коттон Х.К., Харт П.Х., Грабе С.Е. Подводная сварка морских сооружений. - Судостроение. - 1983. - 128 с.
3. Мельник Ю.П., Савич И.М., Глухова Е.В. Особенности термического цикла сварки низкоуглеродистой стали под водой // Автоматическая сварка. - 1976. -№1.
4. Грецкий Ю.Я., Максимов С.Ю., Кравченко Н.В. Содержание водорода в металле шва при подводной сварке электродами с флюоритно-карбонатным покрытием // Автоматическая сварка. -1994. -№4. -С.57.
5. Герцрикен С. Д. Диффузия в металлах и сплавах в твердой фазе // С. Д. Герцрикен, И. Я. Дехтяр. – М.: Физматгиз. -1960. – 38 с.
6. Влияние скорости охлаждения на искажение кристаллической решетки при сварке под водой и на воздухе / И.М.Савич, Н.Л.Карета, А.А.Гришанов, В.Н.Сладкова // Автомат сварка, 1982, №5. С.8-9.

Присяжнюк П.М., Шлапак Л.С., Гавкалюк В.І.

(ІФНТУГ, м. Івано-Франківськ)

**МОДЕЛЮВАННЯ ВПЛИВУ РОЗЧИНЕНОГО ВОДНЮ НА ПРУЖНІ
ХАРАКТЕРИСТИКИ ФЕРИТУ**

E-mail: pavlo1752010@gmail.com

Явище водневого окрихчення конструкційних сталей на даний час інтенсивно досліджується як із теоретичної, так із експериментальної точки зору. Зокрема у праці [1] проведено аналіз існуючих концепцій щодо його причин виникнення та наведено моделі, які дозволяють проводити ефективно прогнозування рівня фізико-механічних характеристик наводнених сталей із застосуванням методів механіки деформівного середовища. Серед вихідних даних для такого роду розрахунків важливе значення має рівень пружних констант, який визначається напруженим станом кристалічної структури за рівноважних та нерівноважних умов. Серед відомих методів моделювання кристалічної структури для умов взаємодії сталей із водневмісними середовищами раціонально

використовувати методи, які враховують проходження хімічних реакцій. До таких методів відноситься моделювання із використанням реакційноздатного потенціалу ReaxFF [2], інтегрованого у програмний пакет Amsterdam Modelling Suite (AMS), який дозволяє проводити оптимізацію геометрії із одночасним розрахунком тензора пружності. У даному дослідженні кристалічну структуру наводненого фериту моделювали у вигляді надгратки із 432 атомами Fe, а також 6 атомами C та 4 атомами H, які розміщували в октаедричних порожнинах, симетрично розташованих відносно центрального атома Fe. Результати розрахунку модулів пружності для даної структури, а також для чистого α -Fe та фериту наведено на рис. 1 та показують, хорошу відповідність між розрахованими та експериментальними даними [3]. Із розрахованих даних видно також, що за наявності розчиненого водню спостерігається підвищення значення усіх пружних констант типове для першої стадії наводнення низьколегованих сталей [1], відповідно запропонований метод оцінки властивостей може бути використаний для ширшого кола конструкційних матеріалів, що експлуатуються у водневовмісних середовищах.

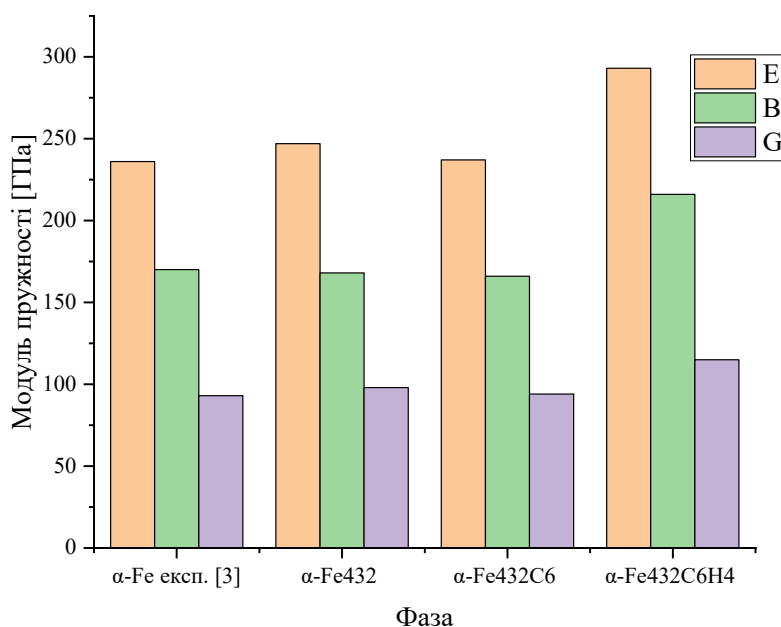


Рис. 1. Значення модулів пружності для α -Fe та фериту різного формульного складу за результатами розрахунку та за даними [3]

Література:

1. Панасюк В. Концепція декогезивного впливу водню на метали // *Фізико-Хімічна Механіка Матеріалів*, no. 50, № 2, pp. 7–15, 2014.
2. van Duin A. C. T., Dasgupta S., Lorant F., Goddard W. A. ReaxFF: A Reactive Force Field for Hydrocarbons // *J. Phys. Chem. A*, vol. 105, no. 41, pp. 9396–9409, 2001, doi: 10.1021/jp004368u.
3. Wang Z., Shi X., Yang X.-S., Liu Z., Shi S.-Q., Ma X. The Effects of Hydrogen Distribution on the Elastic Properties and Hydrogen-Induced Hardening and Softening of α -Fe // *Appl. Sci.*, vol. 10, no. 24, 8958, 2020, doi: 10.3390/app10248958.

Псярнецька Т. О.¹, Цисар М. О.¹, Бабак А. М.²

(¹ІНМ ім. Бакуля НАН України; ²КПІ ім. Ігоря Сікорського, м. Київ)

**КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ЯК БАЗА ДЛЯ ВИЗНАЧЕННЯ
ТЕХНОЛОГІЧНИХ ПАРАМЕТРІВ ІНЖЕКЦІЙНОГО ЛИТТЯ ЗАГОТОВОК
З ПЛАСТИФІКОВАНИХ КЕРАМІЧНИХ МАТЕРІАЛІВ У ФОРМІ КУЛІ**

E-mail: ps_tetiana@ukr.net

Важливою частиною виготовлення якісних заготовок з пластифікованих керамічних матеріалів методом інжекційного формування є підтримка стабільного температурного градієнту [1]. Оскільки процес заповнення форми і остигання відбувається в закритому середовищі, то дослідити його можливо лише за рахунок комп'ютерного моделювання. Так задача моделювання при розрахунку температурних полів розглядає лише половину кулі і вважається вісесиметричною, відповідно достатньо провести розрахунок для сегменту і симетрично його відобразити [2]. Експериментальне підтвердження комп'ютерних розрахунків пов'язано з випробовуваними на перерізах зразків у вигляді кулі, що проходять крізь вісь обертання. Дослідження проводились методом мікроіндентування, як непрямим, оскільки він є достатньо чутливим для визначення ущільнення матеріалу в результаті процесу заповнення форми [3].

При постановці експериментальної задачі було зроблено ряд припущень: