

# ИЗВЕСТИЯ ВЫСШИХ УЧЕБНЫХ ЗАВЕДЕНИЙ ЧЕРНАЯ МЕТАЛЛУРГИЯ

## IZVESTIYA. FERROUS METALLURGY

[fermet.misis.ru](http://fermet.misis.ru)

2023 Том 66 № 6  
Vol. No.

### МЕТАЛЛУРГИЧЕСКИЕ ТЕХНОЛОГИИ

Прогнозирование содержания углерода в металле  
заклывительного периода продувки в кислородном конвертере  
с использованием нейросети

Оценка эффективности электроплавки  
металлизированного сидеритового концентрата

### МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЕ

Анализ зоны контакта системы «покрытие/подложка»,  
подвергнутой облучению импульсным электронным пучком

Исследование структуры и анизотропии механических свойств  
стального изделия, полученного методом послойной  
электродуговой проволоочной 3D-печати

# ИЗВЕСТИЯ ВЫСШИХ УЧЕБНЫХ ЗАВЕДЕНИЙ ЧЕРНАЯ МЕТАЛЛУРГИЯ

Научно-технический журнал

Издается с января 1958 г. Выпускается 6 раз в год

2023 Том 66 № 6  
Vol. No.

# IZVESTIYA FERROUS METALLURGY

Scientific and Technical Journal

Published since January 1958. Issued 6 times a year

# ИЗВЕСТИЯ ВЫСШИХ УЧЕБНЫХ ЗАВЕДЕНИЙ ЧЕРНАЯ МЕТАЛЛУРГИЯ

www.fermet.misis.ru

ISSN 0368-0797 (Print) ISSN 2410-2091 (Online)

## Варианты названия:

Известия вузов. Черная металлургия

Izvestiya. Ferrous Metallurgy

## Учредители:



## Редакционная коллегия:

**Г. В. Ашихмин**, д.т.н., профессор, ОАО «Ин-т Цветметобработка», г. Москва  
**С. О. Байсанов**, д.т.н., профессор, ХМИ им. Ж.Абишева, г. Караганда, Республика Казахстан  
**В. Д. Белов**, д.т.н., профессор, НИТУ МИСИС, г. Москва  
**А. А. Бродов**, к.экон.н., ФГУП «ЦНИИчермет им. И.П. Бардина», г. Москва  
**Е. П. Волынкина**, д.т.н., советник, ОЮЛ «Кузбасская Ассоциация переработчиков отходов», г. Новокузнецк  
**С. М. Горбатюк**, д.т.н., профессор, НИТУ МИСИС, г. Москва  
**К. В. Григорович**, академик РАН, д.т.н., ИМЕТ им. А.А. Байкова РАН, г. Москва  
**В. Е. Гролов**, д.ф.-м.н., профессор, СибГИУ, г. Новокузнецк  
**А. Н. Дмитриев**, д.т.н., профессор, академик РАЕН, академик АИН РФ, г. Екатеринбург  
**А. В. Дуб**, д.т.н., профессор, ЗАО «Наука и инновации», г. Москва  
**В. И. Жучков**, д.т.н., профессор, ИМЕТ УрО РАН, г. Екатеринбург  
**Р. Ф. Зингер**, д.т.н., профессор, Институт Фридриха-Александра, Германия  
**М. Зиниград**, д.т.н., профессор, Институт Ариэля, Израиль  
**В. И. Золотухин**, д.т.н., профессор, ТулГУ, г. Тула  
**А. Г. Колмаков**, д.т.н., чл.-корр. РАН, ИМЕТ им. А.А. Байкова РАН, г. Москва  
**В. М. Колокольцев**, д.т.н., профессор, МГТУ им. Г.И. Носова, г. Магнитогорск  
**М. В. Костина**, д.т.н., ИМЕТ им. А.А. Байкова РАН, г. Москва  
**К. Л. Косырев**, д.т.н., профессор, АО «НПО «ЦНИИТМаш», г. Москва  
**Ю. А. Курганова**, д.т.н., профессор, МГТУ им. Н.Э. Баумана, г. Москва  
**Х. Линн**, ООО «Линн Хай Терм», Германия  
**В. И. Лысак**, академик РАН, д.т.н., профессор, ВолгГТУ, г. Волгоград

В соответствии п. 5 Правил формирования перечня ВАК журнал «Известия вузов. Черная металлургия» входит в перечень ведущих рецензируемых научных журналов и изданий, публикация в которых учитывается при защитах кандидатских и докторских диссертаций как индексируемый в МБД.

## Главный редактор:

**Леопольд Игоревич Леонтьев**, академик РАН, советник, Президиум РАН; д.т.н., профессор, НИТУ «МИСИС»; главный научный сотрудник, Институт металлургии УрО РАН  
Россия, 119049, Москва, Ленинский просп., д. 4, стр. 1, Национальный исследовательский технологический университет «МИСИС»

## Заместитель главного редактора:

**Евгений Валентинович Протопопов**, д.т.н., профессор, Сибирский государственный индустриальный университет г. Новокузнецк

## Издатель:

Национальный исследовательский технологический университет «МИСИС»

## Адреса подразделений редакций:

### в Москве

Россия, 119049, Москва, Ленинский просп., д. 4, стр. 1  
Национальный исследовательский технологический университет «МИСИС»  
Тел.: +7 (495) 638-44-11 E-mail: ferrous@isis.ru

### в Новокузнецке

Россия, 654007, Новокузнецк,  
Кемеровская обл. – Кузбасс, ул. Кирова, зд. 42  
Сибирский государственный индустриальный университет  
Тел.: +7 (3843) 74-86-28 E-mail: redjizvz@sibsiu.ru

**В. П. Мешалкин**, академик РАН, д.т.н., профессор, РХТУ им. Д.И. Менделеева, г. Москва  
**Р. Р. Мулюков**, д.ф.-м.-н., профессор, чл.-корр. ФГБУН ИПСМ РАН, г. Уфа  
**С. А. Никулин**, д.т.н., профессор, чл.-корр. РАЕН, НИТУ МИСИС, г. Москва  
**А. Х. Нурулгалеев**, д.т.н., профессор, КГИУ, г. Караганда, Республика Казахстан  
**О. И. Островский**, д.т.н., профессор, Университет Нового Южного Уэльса, Сидней, Австралия  
**Л. Пиетрелли**, д.т.н., Итальянское национальное агентство по новым технологиям, энергетике и устойчивому экономическому развитию, Рим, Италия  
**И. Ю. Пышминцев**, д.т.н., РосНИТИ, г. Челябинск  
**А. И. Рудской**, академик РАН, д.т.н., профессор, СПбПУ Петра Великого, г. Санкт-Петербург  
**Б. А. Сивак**, к.т.н., профессор, АО АХК «ВНИИМЕТМАШ», г. Москва  
**Л. М. Симонян**, д.т.н., профессор, НИТУ МИСИС, г. Москва  
**Л. А. Смирнов**, академик РАН, д.т.н., профессор, ОАО «Уральский институт металлов», г. Екатеринбург  
**С. В. Солодов**, к.т.н., НИТУ МИСИС, г. Москва  
**Н. А. Спирин**, д.т.н., профессор, УрФУ, г. Екатеринбург  
**Г. Танг**, Институт перспективных материалов университета Циньхуа, г. Шеньжень, Китай  
**М. В. Темлянецев**, д.т.н., профессор, СибГИУ, г. Новокузнецк  
**М. Р. Филонов**, д.т.н., профессор, НИТУ МИСИС, г. Москва  
**И. В. Чуманов**, д.т.н., профессор, ЮУрГУ, г. Челябинск  
**О. Ю. Шешуков**, д.т.н., профессор, УрФУ, г. Екатеринбург  
**М. О. Шпайдель**, д.ест.н., профессор, Швейцарская академия материаловедения, Швейцария  
**А. Б. Юрьев**, д.т.н., ректор, СибГИУ, г. Новокузнецк  
**В. С. Юсупов**, д.т.н., профессор, ИМЕТ им. А.А. Байкова РАН, г. Москва

**Индексирование:** Scopus, Russian Science Citation Index (RSCI), Research Bible, Chemical Abstracts, OCLC и Google Scholar

Зарегистрирован Федеральной службой по надзору в сфере связи и массовых коммуникаций ПИ № ФС77-35456.



Статьи доступны под лицензией Creative Commons Attribution 4.0 License.

# IZVESTIYA FERROUS METALLURGY

www.fermet.misis.ru

ISSN 0368-0797 (Print) ISSN 2410-2091 (Online)

## Alternative title:

Izvestiya vuzov. Chernaya metallurgiya

## Founders:



## Editor-in-Chief:

**Leopol'd I. Leont'ev**, Academician, Adviser of the Russian Academy of Sciences; Dr. Sci. (Eng.), Prof., NUST "MISIS"; Chief Researcher, Institute of Metallurgy UB RAS, Moscow

4 Leninskii Ave., Moscow 119049, Russian Federation  
National University of Science and Technology "MISIS"

## Deputy Editor-in-Chief:

**Evgenii V. Protopopov**, Dr. Sci. (Eng.), Prof., Siberian State Industrial University, Novokuznetsk

## Publisher:

National University of Science and Technology "MISIS"

## Editorial Office Address:

### in Moscow

4 Leninskii Ave., Moscow 119049, Russian Federation  
National University of Science and Technology "MISIS"  
Tel.: +7 (495) 638-44-11

E-mail: fermet.misis@mail.ru, ferrous@sisis.ru

### in Novokuznetsk

42 Kirova Str., Novokuznetsk, Kemerovo Region – Kuzbass  
654007, Russian Federation  
Siberian State Industrial University  
Tel.: +7 (3843) 74-86-28 E-mail: redjizvz@sibsiu.ru

## Editorial Board:

**German V Ashikhmin**, Dr. Sci. (Eng.), Prof., JSC "Institute Tsvetmetobrabotka", Moscow

**Sailaubai O. Baisanov**, Dr. Sci. (Eng.), Prof., Abishev Chemical-Metallurgical Institute, Karaganda, Republic of Kazakhstan

**Vladimir D. Belov**, Dr. Sci. (Eng.), Prof., NUST MISIS, Moscow

**Anatolii A. Brodov**, Cand. Sci. (Econ.), Bardin Central Research Institute for Ferrous Metallurgy, Moscow

**Il'ya V Chumanov**, Dr. Sci. (Eng.), Prof., South Ural State Research University, Chelyabinsk

**Andrei N. Dmitriev**, Dr. Sci. (Eng.), Prof., Academician, RANS, A.M. Prokhorov Academy of Engineering Sciences, Institute of Metallurgy, Ural Branch of RAS, Ural Federal University, Yekaterinburg

**Aleksei V. Dub**, Dr. Sci. (Eng.), Prof., JSC "Science and Innovations", Moscow

**Mikhail R. Filonov**, Dr. Sci. (Eng.), Prof., NUST MISIS, Moscow

**Sergei M. Gorbatyuk**, Dr. Sci. (Eng.), Prof., NUST MISIS, Moscow

**Konstantin V. Grigorovich**, Academician of RAS, Dr. Sci. (Eng.), Baikov Institute of Metallurgy and Materials Science of RAS, Moscow

**Victor E. Gromov**, Dr. Sci. (Eng.), Prof., Siberian State Industrial University, Novokuznetsk

**Aleksei G. Kolmakov**, Dr. Sci. (Eng.), Corresponding Member of RAS, Baikov Institute of Metallurgy and Materials Science of RAS, Moscow

**Valerii M. Kolokol'tsev**, Dr. Sci. (Eng.), Prof., Magnitogorsk State Technical University, Magnitogorsk

**Mariya V. Kostina**, Dr. Sci. (Eng.), Baikov Institute of Metallurgy and Materials Science of RAS, Moscow

**Konstantin L. Kosyrev**, Dr. Sci. (Eng.), Prof., JSC "NPO "TSNIITMash", Moscow

**Yuliya A. Kurganova**, Dr. Sci. (Eng.), Prof., Bauman Moscow State Technical University, Moscow

**Linn Horst**, Linn High Therm GmbH, Hirschbach, Germany

**Vladimir I. Lysak**, Academician of RAS, Dr. Sci. (Eng.), Prof., Rector, Volgograd State Technical University, Volgograd

**Valerii P. Meshalkin**, Dr. Sci. (Eng.), Academician of RAS, Prof., D.I. Mendeleyev Russian Chemical-Technological University, Moscow

**Radik R. Mulyukov**, Dr. Sci. (Phys.-Chem.), Prof., Corresponding Member of RAS, Institute of Metals Superplasticity Problems of RAS, Ufa

**Sergei A. Nikulin**, Dr. Sci. (Eng.), Prof., Corresponding Member of RANS, NUST MISIS, Moscow

**Asylbek Kh. Nurumgaliev**, Dr. Sci. (Eng.), Prof., Karaganda State Industrial University, Karaganda, Republic of Kazakhstan

**Oleg I. Ostrovski**, Dr. Sci. (Eng.), Prof., University of New South Wales, Sydney, Australia

**Loris Pietrelli**, Dr., Scientist, Italian National Agency for New Technologies, Energy and Sustainable Economic Development, Rome, Italy

**Igor' Yu. Pyshmintsev**, Dr. Sci. (Eng.), Russian Research Institute of the Pipe Industry, Chelyabinsk

**Andrei I. Rudskoi**, Academician of RAS, Dr. Sci. (Eng.), Prof., Rector, Peter the Great Saint-Petersburg Polytechnic University, Saint-Petersburg

**Oleg Yu. Sheshukov**, Dr. Sci. (Eng.), Prof., Ural Federal University, Yekaterinburg

**Laura M. Simonyan**, Dr. Sci. (Eng.), Prof., NUST MISIS, Moscow

**Robert F. Singer**, Dr. Sci. (Eng.), Prof., Friedrich-Alexander University, Germany

**Boris A. Sivak**, Cand. Sci. (Eng.), Prof., VNIIMETMASH Holding Company, Moscow

**Leonid A. Smirnov**, Dr. Sci. (Eng.), Prof., Academician of RAS, OJSC "Ural Institute of Metals", Yekaterinburg

**Sergei V. Solodov**, Cand. Sci. (Eng.), NUST MISIS, Moscow

**Speidel Marcus**, Dr. Natur. Sci., Prof., Swiss Academy of Materials, Switzerland

**Nikolai A. Spirin**, Dr. Sci. (Eng.), Prof., Ural Federal University, Yekaterinburg

**Tang Guoi**, Institute of Advanced Materials of Tsinghua University, Shenzhen, China

**Mikhail V. Temlyantsev**, Dr. Sci. (Eng.), Prof., Siberian State Industrial University, Novokuznetsk

**Ekaterina P. Volynkina**, Dr. Sci. (Eng.), Advisor, ALE "Kuzbass Association of Waste Processors", Novokuznetsk

**Aleksei B. Yur'ev**, Dr. Sci. (Eng.), Rector, Siberian State Industrial University, Novokuznetsk

**Vladimir S. Yusupov**, Dr. Sci. (Eng.), Prof., Baikov Institute of Metallurgy and Materials Science of RAS, Moscow

**Vladimir I. Zhuchkov**, Dr. Sci. (Eng.), Prof., Institute of Metallurgy, Ural Branch of RAS, Ural Federal University, Yekaterinburg

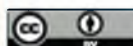
**Michael Zinigrad**, Dr. Sci. (Physical Chemistry), Prof., Rector, Ariel University, Israel

**Vladimir I. Zolotukhin**, Dr. Sci. (Eng.), Prof., Tula State University, Tula

*In accordance with paragraph 5 of the Rules for the formation of the Higher Attestation Commission list journal "Izvestiya. Ferrous metallurgy" is included in the list of leading peer-reviewed scientific journals, publication in which is taken into account in the defense of candidate and doctoral dissertations, as indexed in international data bases.*

**Indexed:** Scopus, Russian Science Citation Index (RSCI), Research Bible, Chemical Abstracts, OCLC and Google Scholar

Registered in Federal Service for Supervision in the Sphere of Mass Communications **PI number FS77-35456**.



Articles are available under Creative Commons Attribution 4.0 License.

СОДЕРЖАНИЕ

CONTENTS

МЕТАЛЛУРГИЧЕСКИЕ ТЕХНОЛОГИИ

- Шакиров М.К., Протопопов Е.В., Зимин А.В., Турчанинов Е.Б.** Прогнозирование содержания углерода в металле заключительного периода продувки в кислородном конвертере с использованием нейросети ..... 638
- Уманский А.А., Байдин В.В., Симачев А.С., Думова Л.В., Сафонов С.О.** Исследования процессов формирования микроструктуры мелющих шаров из рельсовой стали в зависимости от параметров закалочной среды ..... 645
- Вусихис А.С., Леонтьев Л.И., Чесноков Ю.А.** Оценка эффективности электроплавки металлized siderite концентрата ..... 653

МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЕ

- Почивалов Ю.И.** Структура и свойства малолегированной стали 10Г2ФБЮ после прокатки в рельефных валках в условиях электропластичности ..... 659
- Ефимов М.О., Иванов Ю.Ф., Громов В.Е., Шлярова Ю.А., Панченко И.А.** Анализ зоны контакта системы «покрытие/подложка», подвергнутой облучению импульсным электронным пучком ..... 666
- Данилов В.И., Орлова Д.В., Горбатенко В.В., Данилова Л.В.** Процессы Людерса и Портевена-Ле Шателля в аустенитно-мартенситной TRIP-стали ..... 673
- Зоря И.В., Полетаева Г.М., Ракитин Р.Ю.** Теоретическая прочность аустенита при наличии в кристалле поры или вакансий: молекулярно-динамическое исследование ..... 681
- Яреско С.И., Гусева Г.В., Щербakov В.И., Казакевич П.В.** Структура и износные характеристики чугуна после лазерной модификации поверхности ... 688
- Дмитриев А.Н., Смирнова В.Г., Вязникова Е.А., Витькина Г.Ю., Смирнов А.С.** Влияние структуры неофлюсованных обожженных титаномagnetитовых окатышей на их прочность при статическом сжатии ..... 696
- Башенко Л.П., Почетуха В.В., Михайличенко Т.А.** Влияние отпуска на структуру наплавленных покрытий из быстрорежущей стали ..... 705
- Власов И.В., Гордиенко А.И., Кузнецова А.Е., Семенчук В.М.** Исследование структуры и анизотропии механических свойств стального изделия, полученного методом послойной электродуговой проволоочной 3D-печати ..... 709
- Крыжевич Д.С., Корчуганов А.В., Зольников К.П.** Взаимодействие трещины с границей зерен в бикристаллах железа ..... 718

METALLURGICAL TECHNOLOGIES

- Shakirov M.K., Protopopov E.V., Zimin A.V., Turchaninov E.B.** Prediction of carbon content in the metal of final blow period in BOF using neural network ..... 638
- Umanskii A.A., Baidin V.V., Simachev A.S., Dumova L.V., Safonov S.O.** Formation of microstructure in rail steel grinding balls depending on quenching medium parameters ..... 645
- Vusikhis A.S., Leont'ev L.I., Chesnokov Yu.A.** Evaluating the efficiency of metallized siderite concentrate electric melting ..... 653

MATERIALS SCIENCE

- Pochivalov Yu.I.** Structure and properties of low-alloy steel 10G2FBYu after rolling in embossed rolls under conditions of electroplasticity ..... 659
- Efimov M.O., Ivanov Yu.F., Gromov V.E., Shlyarova Yu.A., Panchenko I.A.** Analysis of contact zone of coating-substrate system exposed to irradiation with a pulse electron beam ..... 666
- Danilov V.I., Orlova D.V., Gorbatenko V.V., Danilova L.V.** Lüders and Portevin-Le Chatelier processes in austenitic-martensitic TRIP steel ..... 673
- Zorya I.V., Poletaev G.M., Rakitin R.Yu.** Theoretical strength of austenite in the presence of a pore or vacancies in the crystal: molecular dynamics study ..... 681
- Yares'ko S.I., Guseva G.V., Shcherbakov V.I., Kazakevich P.V.** Structure and wear characteristics of cast iron after laser surface modification ..... 688
- Dmitriev A.N., Smirnova V.G., Vyaznikova E.A., Vit'kina G.Yu., Smirnov A.S.** Effect of structure of unfluxed burnt titanomagnetite pellets on strength under static compression ..... 696
- Bashchenko L.P., Pochetukha V.V., Mikhailichenko T.A.** Influence of tempering on structure of deposited high-speed steel coatings ..... 705
- Vlasov I.V., Gordienko A.I., Kuznetsova A.E., Semenchuk V.M.** Structure and mechanical properties anisotropy of a steel product manufactured by layer-by-layer electric arc wire 3D printing ..... 709
- Kryzhevich D.S., Korchuganov A.V., Zol'nikov K.P.** Interaction of cracks with grain boundaries in iron bicrystals ..... 718

СОДЕРЖАНИЕ (продолжение)

CONTENTS (Continuation)

- Спиридонова К.В., Литовченко И.Ю., Полехина Н.А.,  
Линник В.В., Борисенко Т.А., Чернов В.М., Ле-  
онтьева-Смирнова М.В. Структурно-фазовые  
превращения 12 % хромистой ферритно-мартен-  
ситной стали ЭП-823 ..... 725

ИННОВАЦИИ В МЕТАЛЛУРГИЧЕСКОМ  
ПРОМЫШЛЕННОМ И ЛАБОРАТОРНОМ  
ОБОРУДОВАНИИ, ТЕХНОЛОГИЯХ  
И МАТЕРИАЛАХ

- Одинок В.И., Евстигнеев А.И., Дмитриев Э.А.,  
Карпенко В.А. Моделирование нового процесса  
перемешивания жидкого металла в кристаллизато-  
ре установки непрерывной разливки стали при вра-  
щающейся рубашке с вертикальными ребрами ..... 733

ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ  
МЕТАЛЛУРГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

- Бабенко А.А., Шартдинов Р.Р., Уполовникова А.Г.,  
Сметанников А.Н., Лобанов Д.А., Долматов А.В.  
Влияние основности на физические свойства шла-  
ков системы  $\text{CaO} - \text{SiO}_2 - 18\% \text{Cr}_2\text{O}_3 - 6\% \text{B}_2\text{O}_3 -$   
 $- 3\% \text{Al}_2\text{O}_3 - 8\% \text{MgO}$  ..... 743

ПО МАТЕРИАЛАМ  
МЕЖДУНАРОДНОЙ КОНФЕРЕНЦИИ  
«НАУЧНО-ПРАКТИЧЕСКАЯ ШКОЛА  
ДЛЯ МОЛОДЫХ МЕТАЛЛУРГОВ»

- Гаманюк С.Б., Руцкий Д.В., Зюбан Н.А., Кири-  
чев М.В., Никитин М.С. Физическое моделирова-  
ние влияния доливки расплава в прибыльную часть  
слитка на процесс затвердевания и структурообра-  
зование ..... 750
- Аксенова В.В., Павлов А.В., Марков Г.М. Получение  
рафинировочных глиноземсодержащих флюсов ме-  
тодом спекания из техногенного сырья ..... 760

ИНФОРМАЦИОННЫЕ ТЕХНОЛОГИИ  
И АВТОМАТИЗАЦИЯ  
В ЧЕРНОЙ МЕТАЛЛУРГИИ

- Соломонов К.Н., Тищук Л.И., Горбатьюк С.М., Снит-  
ко С.А., Чиченева О.Н. Моделирование картины  
течения металла при формообразовании поковки из  
плоской заготовки ..... 768

- Указатель статей, помещенных в 2023 г., том 66 ..... 775

- Spiridonova K.V., Litovchenko I.Yu., Polekhina N.A.,  
Linnik V.V., Borisenko T.A., Chernov V.M.,  
Leont'eva-Smirnova M.V. Structural-phase transfor-  
mations of 12 % chromium ferritic-martensitic steel  
EP-823 ..... 725

INNOVATIONS IN METALLURGICAL  
INDUSTRIAL AND LABORATORY  
EQUIPMENT, TECHNOLOGIES  
AND MATERIALS

- Odinokov V.I., Evstigneev A.I., Dmitriev E.A., Karpen-  
ko V.A. Simulation of a new process of mixing liquid  
metal in CCM mold with rotating cooling jacket with  
vertical ribs ..... 733

PHYSICO-CHEMICAL BASICS  
OF METALLURGICAL PROCESSES

- Babenko A.A., Shartdinov R.R., Upolovnikova A.G.,  
Smetannikov A.N., Lobanov D.A., Dolmatov A.V.  
Influence of basicity on physical properties of slags of  
the  $\text{CaO} - \text{SiO}_2 - 18\% \text{Cr}_2\text{O}_3 - 6\% \text{B}_2\text{O}_3 - 3\% \text{Al}_2\text{O}_3 -$   
 $- 8\% \text{MgO}$  system ..... 743

BASED ON THE MATERIALS  
OF THE INTERNATIONAL CONFERENCE  
“SCIENTIFIC AND PRACTICAL SCHOOL FOR  
YOUNG METALLURGISTS”

- Gamanyuk S.B., Rutskii D.V., Zyuban N.A., Kirili-  
chev M.V., Nikitin M.S. Physical modeling of the effect  
of refilling the melt into an ingot knock-off head on so-  
lidification and structure formation ..... 750
- Aksenova V.V., Pavlov A.V., Markov G.M. Production of  
refining alumina containing fluxes by sintering from  
technogenic raw materials ..... 760

INFORMATION TECHNOLOGIES  
AND AUTOMATIC CONTROL  
IN FERROUS METALLURGY

- Solomonov K.N., Tishchuk L.I., Gorbatyuk S.M., Snit-  
ko S.A., Chicheneva O.N. Modeling the pattern of  
metal flow during forming of forgings from a flat billet ... 768

- Index of articles “Izvestiya. Ferrous Metallurgy” for  
2023, vol. 66 ..... 775



УДК 538.951

DOI 10.17073/0368-0797-2023-6-681-687

Оригинальная статья  
Original article

## ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ПРОЧНОСТЬ АУСТЕНИТА ПРИ НАЛИЧИИ В КРИСТАЛЛЕ ПОРЫ ИЛИ ВАКАНСИЙ: МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ

И. В. Зоря<sup>1</sup>, Г. М. Полетаев<sup>2</sup>, Р. Ю. Ракитин<sup>3</sup>

<sup>1</sup> Сибирский государственный индустриальный университет (Россия, 654007, Кемеровская обл. – Кузбасс, Новокузнецк, ул. Кирова, 42)

<sup>2</sup> Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова (Россия, 656038, Алтайский край, Барнаул, пр. Ленина, 46)

<sup>3</sup> Алтайский государственный университет (Россия, 656038, Алтайский край, Барнаул, Комсомольский пр., 100)

✉ zorya.i@mail.ru

**Аннотация.** Методом молекулярной динамики проведено исследование влияния поры разного диаметра, а также соответствующей концентрации отдельных вакансий на теоретическую прочность аустенита при разной температуре. Деформация в модели осуществляется путем сдвига с постоянной скоростью 20 м/с. Рассматривается сдвиг вдоль двух направлений:  $[112]$  и  $[111]$ . Расчетная ячейка аустенита имеет форму прямоугольного параллелепипеда длиной 14,0 нм, высотой 14,0 нм и шириной 5,1 нм. Для описания межатомных взаимодействий использовался ЕАМ потенциал Лау, хорошо воспроизводящий структурные, энергетические и упругие характеристики аустенита. Кривые напряжение – деформация, полученные для обоих рассматриваемых направлений сдвига, имеют аналогичный вид. В отсутствие источников дислокаций пластическая деформация осуществляется путем формирования дислокационных диполей (дислокаций с противоположными векторами Бюргерса). Наличие поры существенно снижает предельную прочность аустенита. Обнаружено, что случайно разбросанные по объему расчетной ячейки одиночные вакансии также приводят к снижению предельной прочности, но, естественно, не так сильно, как пора. Испускание дислокаций порой при деформации происходит путем формирования дислокационных петель, как правило, сразу в двух плоскостях скольжения. Сильнее влияние поры и вакансий на предельную прочность наблюдается при низких температурах. При увеличении температуры влияние дефектов на критическое напряжение, при котором происходит образование дислокаций, снижается. С увеличением размера поры, как и концентрации вакансий, прочность уменьшается. При этом наиболее сильная зависимость наблюдается для пор диаметром до 1 нм. Влияние концентрации вакансий в рассматриваемом диапазоне на предельную прочность оказалось сравнительно более плавное и почти линейное.

**Ключевые слова:** молекулярная динамика, аустенит, дислокация, пора, вакансия, теоретическая прочность

**Для цитирования:** Зоря И.В., Полетаев Г.М., Ракитин Р.Ю. Теоретическая прочность аустенита при наличии в кристалле поры или вакансий: молекулярно-динамическое исследование. *Известия вузов. Черная металлургия*. 2023;66(6):681–687.  
<https://doi.org/10.17073/0368-0797-2023-6-681-687>

## THEORETICAL STRENGTH OF AUSTENITE IN THE PRESENCE OF A PORE OR VACANCIES IN THE CRYSTAL: MOLECULAR DYNAMICS STUDY

I. V. Zorya<sup>1</sup>, G. M. Poletaev<sup>2</sup>, R. Yu. Rakitin<sup>3</sup>

<sup>1</sup> Siberian State Industrial University (42 Kirova Str., Novokuznetsk, Kemerovo Region – Kuzbass 654007, Russian Federation)

<sup>2</sup> Polzunov Altai State Technical University (46 Lenina Ave., Barnaul, Altai Territory 656038, Russian Federation)

<sup>3</sup> Altai State University (100 Komsomol'skii Ave., Barnaul, Altai Territory 656038, Russian Federation)

✉ zorya.i@mail.ru

**Abstract.** The molecular dynamics method was used to study the influence of pores of different diameters, as well as the corresponding concentration of individual vacancies, on the theoretical strength of austenite at different temperatures. The deformation in the model was carried out by shear at a constant rate of 20 m/s. We considered a shear along two directions:  $[112]$  and  $[111]$ . The computational austenite cell had the shape of a rectangular parallelepiped 14.0 nm long, 14.0 nm high, and 5.1 nm wide. To describe interatomic interactions, the Lau EAM potential was used, which reproduces

well the structural, energy, and elastic characteristics of austenite. The stress-strain curves obtained for both considered shear directions had a similar form. In the absence of dislocation sources, plastic deformation was carried out by the formation of dislocation dipoles (dislocations with opposite Burgers vectors). The presence of a pore significantly reduced the yield strength of austenite. In this case, it was found that single vacancies randomly scattered over the volume of the computational cell also lead to a decrease in the yield strength, but, of course, not as much as the pore. The emission of dislocations during deformation occurred by the formation of dislocation loops, as a rule, in two slip planes at once. The effect of pores and vacancies on the yield strength was stronger at low temperatures. As the temperature increased, the effect of defects on the critical stress at which dislocations were formed decreased. With an increase in the pore size, as well as the concentration of vacancies, the yield strength decreased. In this case, the strongest dependence was observed for pores up to 1 nm in diameter. The influence of the concentration of vacancies in the considered range on the yield strength turned out to be comparatively smoother and almost linear.

**Keywords:** molecular dynamics, austenite, dislocation, pore, vacancy, theoretical strength

**For citation:** Zorya I.V., Poletaev G.M., Rakitin R.Yu. Theoretical strength of austenite in the presence of a pore or vacancies in the crystal: molecular dynamics study. *Izvestiya. Ferrous Metallurgy*. 2023;66(6):681–687. <https://doi.org/10.17073/0368-0797-2023-6-681-687>

## ВВЕДЕНИЕ

При пластической деформации в качестве источников дислокаций в поликристаллических материалах помимо границ раздела (границ зерен и их тройных стыков, межфазных границ, поверхностей) важную роль играют поры и микропустоты [1–3]. Однако работ, посвященных исследованию механизмов пластической деформации на атомном уровне с участием пор, сравнительно немного. К настоящему времени с помощью компьютерного моделирования показано, что испускание дислокаций порами при деформации происходит за счет формирования дислокационных петель [3–6], причем авторы работ [5; 6] утверждают, что в ГЦК кристаллах при этом петли формируются одновременно в двух плоскостях скольжения. С увеличением размера поры уменьшается критическое напряжение, при котором происходит образование дислокации [5; 6].

Точечные дефекты, например решеточные вакансии, также, очевидно, приводят к снижению теоретической прочности, однако влияние их концентрации на прочность изучено недостаточно, особенно в сравнении с влиянием их скоплений, в частности, пор. Настоящая работа посвящена сравнительному исследованию методом молекулярной динамики влияния вакансий и поры на теоретическую прочность аустенита в зависимости от температуры и концентрации вакансий или размера поры. Интерес к аустениту вызван тем, что он является основой многих сталей, имеющих большое практическое значение, например, стали Гадфильда [7; 8]. Кроме того, качественные результаты, полученные для аустенита в настоящей работе, очевидно, можно будет распространить на другие металлы с ГЦК кристаллической решеткой.

Ранее [9] методом молекулярной динамики было проведено исследование скорости скольжения краевой и винтовой дислокаций в аустените и стали Гадфильда в зависимости от температуры и скорости деформирования. Была рассчитана энергия образования рассматриваемых дислокаций. Настоящее исследование является продолжением работы [9].

## ОПИСАНИЕ МОДЕЛИ

Расчетная ячейка аустенита в молекулярно-динамической модели имела форму прямоугольного параллелепипеда (рис. 1) длиной 14,0 нм, высотой 14,0 нм и шириной 5,1 нм. Количество атомов изначально составляло 87 040. Ориентация координатных осей соответствовала следующим кристаллографическим направлениям в ГЦК решетке:  $x$  –  $[110]$ ,  $y$  –  $[112]$ ,  $z$  –  $[111]$ . В работе рассматривался сдвиг вдоль двух направлений: оси  $y$  (как показано на рис. 1) и оси  $z$ . Сдвиг в модели инициировался путем смещения атомов в приграничных областях (на рис. 1 выделены темно-серым цветом). Атомы в этих областях на противоположных сторонах расчетной ячейки в процессе компьютерного эксперимента перемещались в противоположных направлениях с постоянной скоростью 20 м/с. В работе [9] при моделировании особенностей скольжения дислокации в аустените это значение было

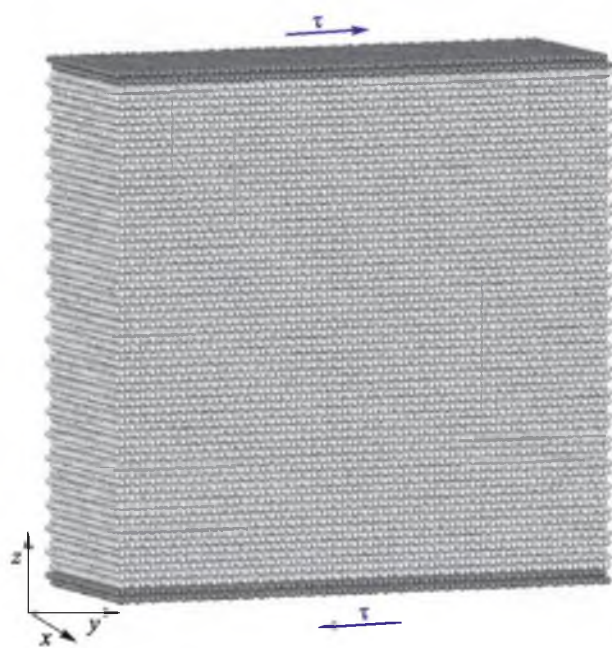


Рис. 1. Расчетная ячейка для моделирования сдвига вдоль оси  $y$  (направления  $[112]$ ) в ГЦК железе

Fig. 1. Calculation cell for modeling the shift along the  $y$  axis (direction  $[112]$ ) in the FCC iron

выбрано как оптимальное для моделирования сдвига методом молекулярной динамики. Движение остальных атомов в расчетной ячейке никак не ограничивалось, оно описывалось классическими уравнениями движения Ньютона. Граничные условия вдоль остальных осей использовались периодические.

Для описания межатомных взаимодействий в аустените использовался ЕАМ потенциал Лая [10], хорошо воспроизводящий структурные, энергетические и упругие характеристики аустенита [10; 11]. Шаг интегрирования по времени в методе молекулярной динамики составлял 2 фс [12 – 14]. Температуру задавали через начальные скорости атомов согласно распределению Максвелла. При задании температуры обязательным являлся учет теплового расширения кристаллической решетки [13 – 15]. Для используемого в работе потенциала межатомного взаимодействия коэффициент теплового расширения равен  $18 \cdot 10^{-6} \text{ K}^{-1}$ , что хорошо согласуется со справочными данными [11]. Для сохранения температуры постоянной в процессе моделирования использовался термостат Нозе-Гувера. На всем интервале варьирования температуры (от 100 до 1500 К) тип кристаллической решетки ГЦК сохранялся постоянным, полиморфное превращение в настоящей работе не учитывалось.

Пора создавалась в центре расчетной ячейки путем удаления атомов в сферической области. Диаметр поры варьировался в пределах 0,6 – 2,0 нм. Вакансии вводились путем удаления случайных атомов по всему объему расчетной ячейки, кроме приграничных слоев (на рис. 1 выделены темно-серым). Рассматриваемые значения концентрации вакансий соответствовали количеству удаленных атомов при создании пор. После введения дефектов следовала процедура релаксации структуры до достижения равновесного состояния.

## РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

На рис. 2 изображены зависимости напряжение – деформация для двух рассматриваемых ориентаций сдвига с постоянной скоростью 20 м/с при температуре 300 К для бездефектного кристалла (1), кристалла, содержащего 79 случайно разбросанных по объему вакансий (2), и кристалла, содержащего пору диаметром 1,2 нм (3). Количество вакансий было равно количеству удаленных атомов при создании рассматриваемой поры и соответствовало в данном случае концентрации 0,09 %.

Теоретическая прочность кристаллов металлов на сдвиг, как известно, очень высока и может достигать более 10 ГПа [1; 5; 6; 16; 17]. Введение всего одной дислокации в чистый кристалл в молекулярно-динамической модели снижает прочность до нескольких сотен МПа [18]. Как видно из рис. 2, пластическая деформация в чистом кристалле аустенита при температуре 300 К начиналась при сдвиге как вдоль оси  $y$ , так и вдоль оси  $z$ , примерно при том же значении деформации

(12,0 – 12,5 %) и напряжения (9,0 – 9,5 ГПа). Следует подчеркнуть, что идеальный кристалл изначально не содержал каких-либо источников образования дислокаций, даже свободной поверхности. В связи с этим область упругой деформации была сравнительно очень большой.

В отсутствие источников дислокаций пластическая деформация осуществлялась путем формирования дислокационных диполей (дислокаций с противоположными векторами Бюргерса). Полные дислокации сразу формировались в виде пары частичных дислокаций Шокли, разделенных дефектом упаковки. Расстояние между частичными дислокациями, как правило, составляло несколько нанометров, что согласуется с результатами моделирования других авторов [19 – 21]. Наряду с дислокационными диполями, при дальнейшей деформации интенсивно проходил также процесс образования деформационных двойников.

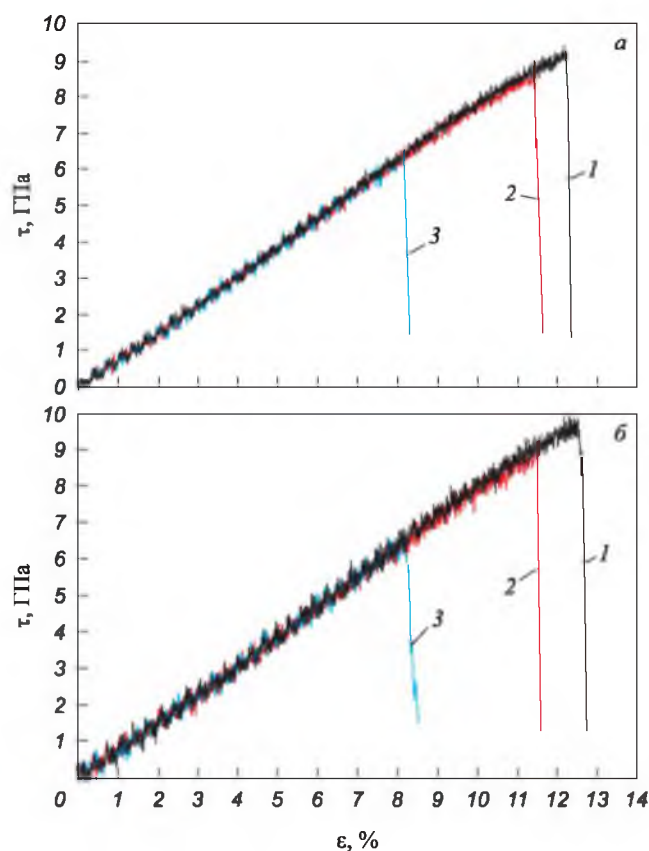


Рис. 2. Зависимости напряжение – деформация при температуре 300 К при сдвиге вдоль оси  $y$  (направления  $[112]$ ) (а) и при сдвиге вдоль оси  $z$  (направления  $[111]$ ) (б): 1 – в чистом кристалле ГЦК железа; 2 – при наличии 79 вакансий, случайно разбросанных по объему расчетной ячейки; 3 – при наличии поры диаметром 1,2 нм

Fig. 2. Stress – strain dependences at a temperature of 300 K when shifted along the  $y$  axis (direction  $[112]$ ) (a) and when shifted along the  $z$  axis (direction  $[111]$ ) (b): 1 – in a pure FCC iron crystal; 2 – in the presence of 79 vacancies, randomly scattered over the volume of the calculation cell; 3 – in the presence of a pore with a diameter of 1.2 nm

Как можно видеть на рис. 2, наличие поры диаметром 1,2 нм существенно снижает теоретическую прочность: пластический сдвиг и образование дислокаций происходят при существенно более низких значениях деформации и напряжения (примерно 8,5 % и 6 ГПа соответственно). При этом случайно разбросанные по объему расчетной ячейки вакансии при том же количестве, что и в поре, влияют на предел прочности значительно слабее, однако, что является интересным результатом, все же снижают его: дислокации образуются при деформации примерно 11,5 % и напряжении 8,5 ГПа. Таким образом, даже простые точечные дефекты (вроде вакансий) снижают теоретическую прочность кристалла.

Испускание дислокаций порой при деформации происходило путем формирования дислокационных петель, что согласуется с результатами моделирования других авторов [3 – 6]. Примеры образования подобных петель из поры диаметром 1,2 нм при сдвиге вдоль осей  $y$  и  $z$  приведены на рис. 3. Можно видеть, что петли формируются в двух плоскостях скольжения, на что указывали также авторы работ [5; 6]. Для изображения дислокаций в расчетной ячейке использовался визуализатор среднего расстояния до ближайших атомов (дает представление о наличии локального растяжения и косвенно о распределении свободного объема). Для каждого атома проводили расчет среднего расстояния до ближайших атомов. Если среднее расстояние незначительно отличалось от расстояния, соответствующего идеальному

кристаллу, атом не выделяли цветом; в противном случае атом закрашивали в тот или иной оттенок.

Температура, как известно, влияет на упругие свойства материала и вероятность образования дислокаций при деформации. Модули упругости в широком диапазоне температур уменьшаются с ростом температуры почти линейно [22 – 24], что обычно связывают с тепловым расширением [22]. Пластическая деформация с ростом температуры в большинстве материалов начинается при меньших значениях напряжения [24 – 26].

На рис. 4 изображены зависимости предельной прочности от температуры при сдвиге вдоль осей  $y$  и  $z$ . Зависимости приведены для бездефектного кристалла (1), кристалла, содержащего 79 случайно разбросанных по объему вакансий (2), и кристалла, содержащего пору диаметром 1,2 нм (3). Во всех случаях с ростом температуры действительно прочность падает. При этом следует отметить важную особенность: при повышении температуры степень влияния дефектов на теоретическую прочность снижается. Отличия значений предельной прочности для случаев с бездефектным кристаллом, с вакансиями и порой уменьшаются с ростом температуры, стремясь к одному значению (пересечения зависимостей, видимо, следует ожидать при температуре плавления).

На рис. 5 изображены зависимости предельной прочности при температуре 300 К при сдвиге вдоль осей  $y$  и  $z$  (рис. 5, б) от количества (%) удаленных из

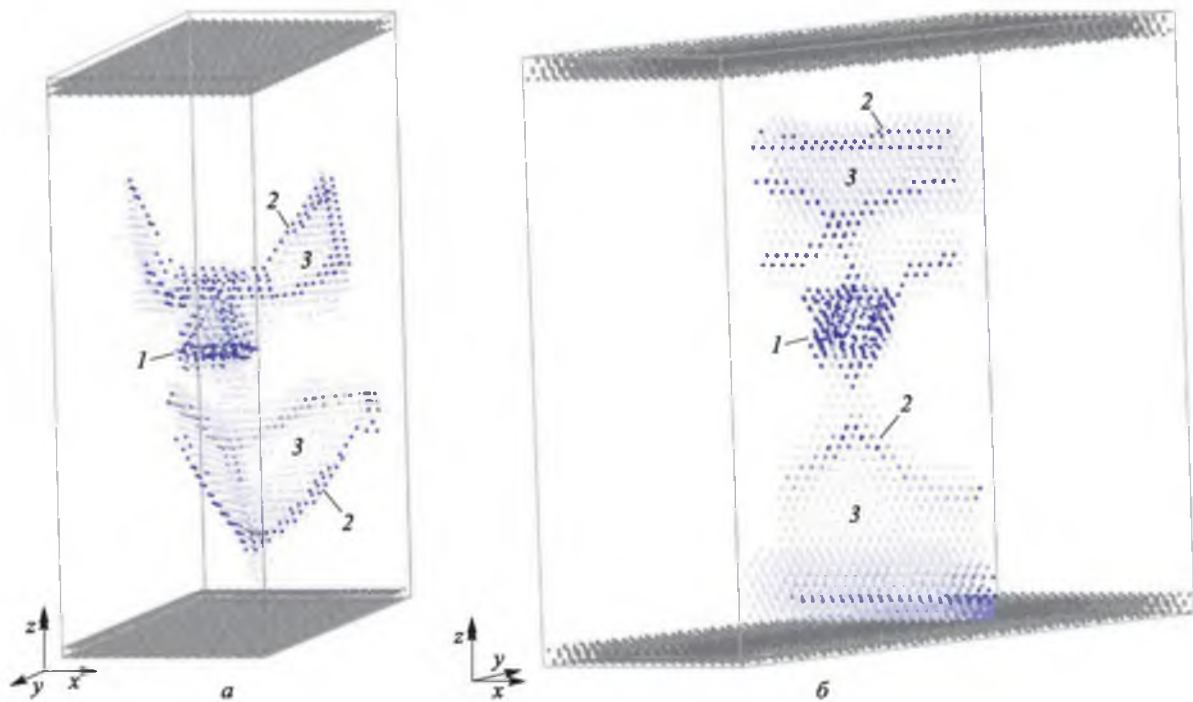


Рис. 3. Испускание дислокаций порой в виде дислокационных петель при сдвиге вдоль оси  $y$  (а) и оси  $z$  (б): 1 – пора; 2 – частичная дислокация; 3 – дефект упаковки

Fig. 3. Emission of dislocations by a pore in the form of dislocation loops when shifted along the  $y$  axis (а) and when shifted along the  $z$  axis (б): 1 – pore; 2 – partial dislocation; 3 – packaging defect

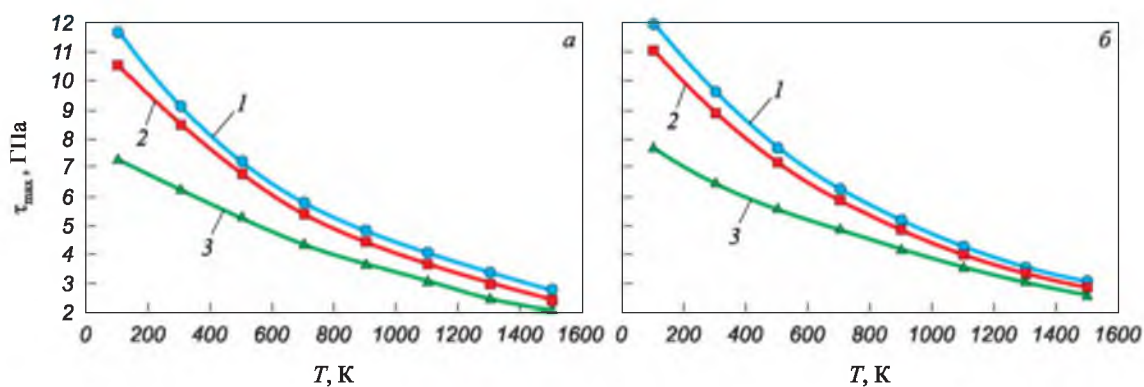


Рис. 4. Зависимости прочности от температуры при сдвиге вдоль оси  $y$  (направления  $[112]$ ) (а) и при сдвиге вдоль оси  $z$  (направления  $[111]$ ) (б):  
1 – в чистом кристалле ГЦК железа; 2 – при наличии 79 вакансий, случайно разбросанных по объему расчетной ячейки; 3 – при наличии поры диаметром 1,2 нм

Fig. 4. Dependences of strength on temperature when shifted along the  $y$  axis (direction  $[112]$ ) (a) and when shifted along the  $z$  axis (direction  $[111]$ ) (b):  
1 – in a pure FCC iron crystal; 2 – in the presence of 79 vacancies randomly scattered over the volume calculation cell; 3 – in the presence of a pore with a diameter of 1.2 nm

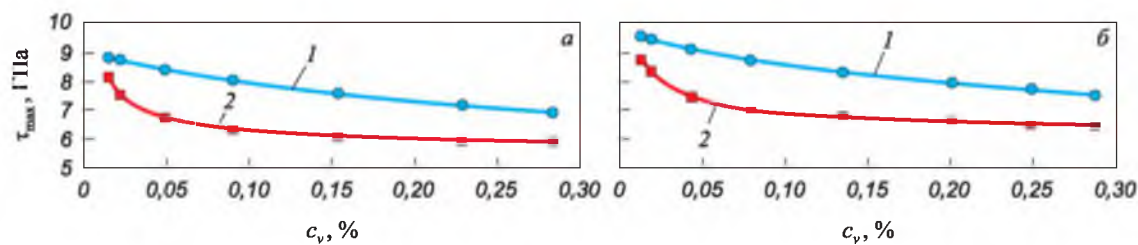


Рис. 5. Зависимости прочности при температуре 300 К от количества удаленных из расчетной ячейки атомов в виде случайно разбросанных вакансий (1) или поры (2) при сдвиге вдоль оси  $y$  (направления  $[112]$ ) (а) и при сдвиге вдоль оси  $z$  (направления  $[111]$ ) (б)

Fig. 5. Dependences of strength at temperature of 300 K on the number of atoms removed from the calculated cell in the form of randomly scattered vacancies (1) or pores (2) when shifted along the  $y$  axis (directions  $[112]$ ) (a) and when shifted along the  $z$  axis (directions  $[111]$ ) (b)

расчетной ячейки атомов  $c_v$  в виде отдельных случайно разбросанных вакансий или пор (зависимости 1 и 2 соответственно на рис. 2, 4). Для сравнения: при диаметре поры 1,0 нм  $c_v = 0,05\%$ , при диаметре поры 1,2 нм  $c_v = 0,09\%$ , при диаметре 1,6 нм  $c_v = 0,23\%$ .

Как можно видеть, с ростом как концентрации вакансий, так и радиуса пор прочность снижается. При этом наиболее сильная зависимость наблюдается для малых размеров пор: примерно до 1 нм. При дальнейшем увеличении радиуса поры прочность продолжает снижаться, но гораздо слабее, чем при малых размерах поры. Влияние концентрации вакансий в рассматриваемом диапазоне на теоретическую прочность более плавное и почти линейное.

## Выводы

Методом молекулярной динамики проведено исследование влияния поры разного диаметра, а также соответствующей концентрации отдельных вакансий на теоретическую прочность аустенита при разной

температуре. Деформация в модели осуществлялась путем сдвига с постоянной скоростью 20 м/с. Рассматривался сдвиг вдоль двух направлений:  $[112]$  и  $[111]$ . Зависимости напряжение – деформация, полученные для обоих направлений сдвига, имели аналогичный вид. В отсутствие источников дислокаций пластическая деформация осуществлялась путем формирования дислокационных диполей (дислокаций с противоположными векторами Бюргерса). Наличие поры существенно снижало предельную прочность аустенита. Обнаружено, что случайно разбросанные по объему расчетной ячейки одиночные вакансии также приводят к снижению предельной прочности, но, естественно, не так сильно, как пора. Испускание дислокаций порой при деформации происходило путем формирования дислокационных петель, как правило, сразу в двух плоскостях скольжения. Сильнее влияние поры и вакансий на предельную прочность наблюдалось при низких температурах. При увеличении температуры влияние дефектов на критическое напряжение, при котором происходило образование дислокаций, снижа-

лось. С увеличением размера поры, как и концентрации вакансий, прочность уменьшалась. При этом наиболее сильная зависимость наблюдалась для пор диаметром до 1 нм. Влияние концентрации вакансий в рассматриваемом диапазоне на предельную прочность оказалось сравнительно более плавное и почти линейное.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ / REFERENCES

1. Seppälä E.T., Belak J., Rudd R.E. Three-dimensional molecular dynamics simulations of void coalescence during dynamic fracture of ductile metals. *Physical Review B*. 2005;71(6):064112. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.71.064112>
2. Bobylev S.V., Morozov N.F., Ovid'ko I.A. Dislocation emission by pores in nanocrystalline metals. *Physics of the Solid State*. 2007;49(6):1098–1103. <https://doi.org/10.1134/S1063783407060133>
3. Ruestes C.J., Bringa E.M., Stukowski A., Rodríguez Nieva J.F., Tang Y., Meyers M.A. Plastic deformation of a porous bcc metal containing nanometer sized voids. *Computational Materials Science*. 2014;88:92–102. <http://dx.doi.org/10.1016/j.commatsci.2014.02.047>
4. Wang Y., Bi W., Deng L., Zhang X., Tang J., Wang L. Study on the relationship between surface and dislocation of nanoporous copper under cyclic shear loading. *AIP Advances*. 2022;12(3):035318. <https://doi.org/10.1063/5.0085569>
5. Traiviratana S., Bringa E.M., Benson D.J., Meyers M.A. Void growth in metals: Atomistic calculations. *Acta Materialia*. 2008;56(15):3874–3886. <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2008.03.047>
6. Bringa E.M., Traiviratana S., Meyers M.A. Void initiation in fcc metals: Effect of loading orientation and nanocrystalline effects. *Acta Materialia*. 2010;58(13):4458–4477. <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2010.04.043>
7. Zhang F.C., Lv B., Wang T.S., Zheng C.L., Zhang M., Luo H.H., Liu H., Xu A.Y. Explosion hardening of Hadfield steel crossing. *Materials Science and Technology*. 2010;26(2):223–229. <https://doi.org/10.1179/174328408X363263>
8. Chen C., Lv B., Ma H., Sun D., Zhang F. Wear behavior and the corresponding work hardening characteristics of Hadfield steel. *Tribology International*. 2018;121:389–399. <https://doi.org/10.1016/j.triboint.2018.01.044>
9. Зоря И.В., Поletaев Г.М., Ракитин Р.Ю. Энергия и скорость скольжения краевой и винтовой дислокаций в аустените и стали Гадфильда: молекулярно-динамическое моделирование. *Известия вузов. Черная металлургия*. 2022;65(12):861–868. <https://doi.org/10.17073/0368-0797-2022-12-861-868>  
Zorya I.V., Poletaev G.M., Rakitin R.Yu. Energy and velocity of sliding of edge and screw dislocations in austenite and Hadfield steel: Molecular dynamics simulation. *Izvestiya. Ferrous Metallurgy*. 2022;65(12):861–868. (In Russ.). <https://doi.org/10.17073/0368-0797-2022-12-861-868>
10. Lau T.T., Forst C.J., Lin X., Gale J.D., Yip S., Van Vliet K.J. Many-body potential for point defect clusters in Fe-C alloys. *Physical Review Letters*. 2007;98(21):215501. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.98.215501>
11. Oila A., Bull S.J. Atomistic simulation of Fe-C austenite. *Computational Materials Science*. 2009;45(2):235–239. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2008.09.013>
12. Chen C., Zhang F., Xu H., Yang Z., Poletaev G.M. Molecular dynamics simulations of dislocation-coherent twin boundary interaction in face-centered cubic metals. *Journal of Materials Science*. 2022;57:1833–1849. <https://doi.org/10.1007/s10853-021-06837-7>
13. Poletaev G.M. Self-diffusion in liquid and solid alloys of the Ti–Al system: Molecular-dynamics simulation. *Journal of Experimental and Theoretical Physics*. 2021;133(4):455–460. <https://doi.org/10.1134/S1063776121090041>
14. Poletaev G.M., Novoselova D.V., Kaygorodova V.M. The causes of formation of the triple junctions of grain boundaries containing excess free volume in fcc metals at crystallization. *Solid State Phenomena*. 2016;247:3–8. <https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/SSP.247.3>
15. Poletaev G.M., Zorya I.V. Influence of light impurities on the crystal-melt interface velocity in Ni and Ag. Molecular dynamics simulation. *Technical Physics Letters*. 2020;46(6):575–578. <https://doi.org/10.1134/S1063785020060231>
16. Bukreeva K.A., Iskandarov A.M., Dmitriev S.V., Umeno Y., Mulyukov R.R. Theoretical shear strength of FCC and HCP metals. *Physics of the Solid State*. 2014;56(3):423–428. <https://doi.org/10.1134/S1063783414030081>
17. Li P.-T., Yang Y.-Q., Xia Zh., Luo X., Jin N., Gao Y., Liu G. Molecular dynamic simulation of nanocrystal formation and tensile deformation of TiAl alloy. *RSC Advances*. 2017;7:48315–48323. <https://doi.org/10.1039/C7RA10010H>
18. Krasnikov V.S., Kuksin A.Yu., Mayer A.E., Yanilkin A.V. Plastic deformation under high-rate loading: the multiscale approach. *Physics of the Solid State*. 2010;52(7):1386–1396. <https://doi.org/10.1134/S1063783410070115>
19. Zhao Sh., Osetsky Yu.N., Zhang Y. Atomic-scale dynamics of edge dislocations in Ni and concentrated solid solution NiFe alloys. *Journal of Alloys and Compounds*. 2017;701:1003–1008. <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2017.01.165>
20. Rodney D., Ventelon L., Clouet E., Pizzagalli L., Willaime F. Ab initio modeling of dislocation core properties in metals and semiconductors. *Acta Materialia*. 2017;124:633–659. <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2016.09.049>
21. Hunter A., Beyerlein I.J., Germann T.C., Koslowski M. Influence of the stacking fault energy surface on partial dislocations in fcc metals with a three-dimensional phase field dislocations dynamics model. *Physical Review B*. 2011;84(14):144108. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.84.144108>
22. Штремель М.А. Прочность сплавов. Ч. 1. Дефекты решетки. Москва: Металлургия; 1982:280.
23. Киттель Ч. Введение в физику твердого тела. Москва: Наука, 1978:792.  
Kittel Ch. *Elementary Solid State Physics*. John Wiley & Sons; 1962:339.
24. Guo J., Wen B., Melnik R., Yao Sh., Li T. Molecular dynamics study on diamond nanowires mechanical properties: Strain rate, temperature and size dependent effects. *Diamond and Related Materials*. 2011;20(4):551–555. <https://doi.org/10.1016/j.diamond.2011.02.016>
25. Tachibana T., Furuya H., Koizumi M. Dependence on strain rate and temperature shown by yield stress of uranium dioxide. *Journal of Nuclear Science and Technology*. 1976;13(9):497–502. <https://doi.org/10.1080/18811248.1976.9734063>

26. Cereceda D., Diehl M., Roters F., Raabe D., Perlado J.M., Marian J. Unraveling the temperature dependence of the yield strength in single-crystal tungsten using atomistically-

informed crystal plasticity calculations. *International Journal of Plasticity*. 2016;78:242–265.  
<https://doi.org/10.1016/j.ijplas.2015.09.002>

## Сведения об авторах

## Information about the Authors

**Ирина Васильевна Зоря**, д.ф.-м.н., доцент, заведующий кафедрой теплогазоводоснабжения, водоотведения и вентиляции, Сибирский государственный индустриальный университет  
**ORCID:** 0000-0001-5748-813X  
**E-mail:** zorya.i@mail.ru

**Геннадий Михайлович Полетаев**, д.ф.-м.н., профессор, заведующий кафедрой высшей математики, Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова  
**ORCID:** 0000-0002-5252-2455  
**E-mail:** gmpoletaev@mail.ru

**Роман Юрьевич Ракитин**, к.ф.-м.н., доцент, директор колледжа, Алтайский государственный университет  
**ORCID:** 0000-0002-6341-2761  
**E-mail:** movehell@gmail.ru

**Irina V. Zorya**, Dr. Sci. (Phys.-Math.), Assist. Prof, Head of the Chair of Heat-Gas-Water Supply, Water Disposal and Ventilation, Siberian State Industrial University  
**ORCID:** 0000-0001-5748-813X  
**E-mail:** zorya.i@mail.ru

**Gennadii M. Poletaev**, Dr. Sci. (Phys.-Math.), Prof, Head of the Chair of Advanced Mathematics, Polzunov Altai State Technical University  
**ORCID:** 0000-0002-5252-2455  
**E-mail:** gmpoletaev@mail.ru

**Roman Yu. Rakitin**, Cand. Sci. (Phys.-Math.), Assist. Prof, Director of College, Altai State University  
**ORCID:** 0000-0002-6341-2761  
**E-mail:** movehell@gmail.ru

## Вклад авторов

## Contribution of the Authors

**И. В. Зоря** – постановка задачи, анализ литературных источников, обработка результатов, написание основного текста статьи.

**Г. М. Полетаев** – постановка задачи, разработка компьютерной модели, анализ литературных источников, обработка результатов, редактирование финальной версии статьи.

**Р. Ю. Ракитин** – создание компьютерной модели, проведение расчетов и получение результатов, получение рисунков и графиков для статьи.

**I. V. Zorya** – problem statement, analysis of literary sources, processing of results, writing the main text.

**G. M. Poletaev** – problem statement, development of a computer model, analysis of literary sources, processing of results, editing the final version of the article.

**R. Yu. Rakitin** – creating a computer model, performing calculations, obtaining results, obtaining drawings and graphs.

Поступила в редакцию 06.02.2023  
После доработки 27.02.2023  
Принята к публикации 20.07.2023

Received 06.02.2023  
Revised 27.02.2023  
Accepted 20.07.2023

Над номером работали:

*Л.И. Леонтьев, главный редактор*

*Е.В. Протопопов, заместитель главного редактора*

*Е.А. Ивани, заместитель главного редактора*

*Л.П. Бащенко, заместитель ответственного секретаря*

*Е.Ю. Потапова, заместитель главного редактора по развитию*

*О.А. Долицкая, научный редактор*

*Е.М. Запольская, ведущий редактор*

*А.О. Гашникова, ведущий редактор*

*В.В. Расенец, верстка, иллюстрации*

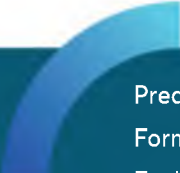
*Г.Ю. Острогорская, менеджер по работе с клиентами*

---

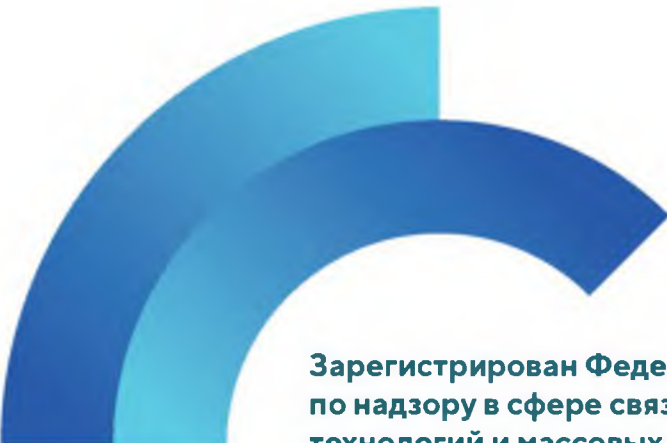
Подписано в печать 25.12.2023. Формат 60×90 <sup>1</sup>/<sub>8</sub>. Бум. офсетная № 1.  
Печать цифровая. Усл. печ. л. 15,25. Заказ 18897. Цена свободная.

---

Отпечатано в типографии Издательского Дома МИСИС.  
119049, Москва, Ленинский пр-кт, д. 4, стр. 1.  
Тел./факс: (499) 236-76-17



Prediction of carbon content in the metal of final blow period in BOF using neural network  
Formation of microstructure in rail steel grinding balls depending on quenching medium parameters  
Evaluating the efficiency of metallized siderite concentrate electric melting  
Structure and properties of low-alloy steel 10G2FBYu after rolling in embossed rolls under conditions of electroplasticity  
Analysis of contact zone of coating-substrate system exposed to irradiation with a pulse electron beam  
Lüders and Portevin–Le Chatelier processes in austenitic-martensitic TRIP steel  
Theoretical strength of austenite in the presence of a pore or vacancies in the crystal: molecular dynamics study  
Structure and wear characteristics of cast iron after laser surface modification  
Effect of structure of unfluxed burnt titanomagnetite pellets on strength under static compression  
Influence of tempering on structure of deposited high-speed steel coatings  
Structure and mechanical properties anisotropy of a steel product manufactured by layer-by-layer electric arc wire 3D printing  
Interaction of cracks with grain boundaries in iron bicrystals  
Structural-phase transformations of 12 % chromium ferritic-martensitic steel EP-823  
Simulation of a new process of mixing liquid metal in CCM mold with rotating cooling jacket with vertical ribs  
Influence of basicity on physical properties of slags of the  $\text{CaO} - \text{SiO}_2 - 18\% \text{Cr}_2\text{O}_3 - 6\% \text{B}_2\text{O}_3 - 3\% \text{Al}_2\text{O}_3 - 8\% \text{MgO}$  system  
Physical modeling of the effect of refilling the melt into an ingot knock-off head on solidification and structure formation  
Production of refining alumina containing fluxes by sintering from technogenic raw materials  
Modeling the pattern of metal flow during forming of forgings from a flat billet  
Index of articles “Izvestiya. Ferrous Metallurgy” for 2023, vol. 66



**Зарегистрирован Федеральной службой  
по надзору в сфере связи, информационных  
технологий и массовых коммуникаций.  
Свидетельство о регистрации  
ПИ № ФС77-35456.**

**Подписной индекс 70383.**

