

І.Р. Поворотня, О.А. Сафронова, Р.В. Подольський, Г.А. Кононенко

ОПТИМАЛЬНІ ПАРАМЕТРИ Mn/Si ДЛЯ КОРИГУВАННЯ МЕХАНІЧНИХ ВЛАСТИВОСТЕЙ СТАЛІ ДЛЯ ЗАЛІЗНИЧНИХ ОСЕЙ

Анотація. У проведеній роботі представлено комплексний підхід пошуку оптимального складу сталі в межах відомих марок на основі концепції спрямованого хімічного зв'язку. Даний підхід дозволив враховувати сумарний хімічний склад та аналізувати характер взаємодій між елементами на рівні міжатомних зв'язків, що є критичним для прогнозування властивостей кінцевого матеріалу. Концепція спрямованого хімічного зв'язку базувалась на уявленнях про здатність окремих елементів до електронного перерозподілу в розплаві, що, у свою чергу, впливає на структуру та стабільність системи. Метою дослідження було визначення впливу варіацій у вмісті основних матричних елементів — вуглецю, кремнію та марганцю — на зарядовий стан системи, що представлений узагальненим параметром Z^Y . Цей параметр відображає міру хімічної збалансованості сплаву та є індикатором стабільності електронної будови розплаву. В результаті досліджено чутливість системи до співвідношення Mn/Si як до показника, що визначає електронну та структурну рівновагу. Таким чином, для підвищення параметру Z^Y , збільшення якого призводить до підвищення твердості, необхідно віддавати перевагу збільшенню марганцю після значення Mn/Si на рівні 2,8–3,2, а до цього інтервалу — за рахунок збільшення вмісту кремнію. Співвідношення марганцю до кремнію (Mn/Si) має перебувати в межах 2,8–3,2. При цьому зростання значення Mn/Si понад 3,2 зумовлює домінування впливу марганцю, що може порушити баланс, таким чином, контроль вмісту легувальних елементів, особливо кремнію та марганцю, є важливою умовою формування сталей із прогнозованими властивостями. Результати проведеного моделювання підкреслюють доцільність використання розрахункових підходів у матеріалознавстві. Прогнозне моделювання дозволяє ще на етапі створення хімічного складу сталі забезпечити ефективну адаптацію її структури під задані експлуатаційні характеристики, що сприяє зниженню затрат на експериментальні розробки та скороченню термінів виведення нових сплавів у виробництво.

Ключові слова: залізнична вісь, прогнозне моделювання, кремній, марганець, механічні властивості, хімічний склад.

Вступ. Зазвичай сталі з вмістом вуглецю від 0,40 до 0,60 % використовують для виробництва залізничних коліс і осей. До їх складу вводять легуючі елементи, такі як хром (Cr), марганець (Mn), молібден (Mo) і нікель (Ni), що підвищує прогартовуваність

і покращує можливість термічної обробки, зокрема забезпечує високе зміцнення та стійкість до знеміцнення під час відпуску [1-2]

Додавання марганцю, нікелю, хрому та молібдену позитивно впливає на зносо-стійкість сталі. Водночас їхній вміст слід контролювати з урахуванням економічних і технологічних чинників розробки матеріалу.

Марганець підвищує міцність і покращує прогартовуваність сталі. При вмісті до 2% (мас.) спостерігається зростання тимчасового опору розриву, тоді як підвищення границі плинності відзначається лише до концентрації 1,5% (мас.). Водночас ударна в'язкість знижується зі збільшенням вмісту марганцю, особливо при перевищенні 1,5% (мас.) [3].

Кремній в концентрації до 0,8 – 1,2 % мас. позитивно впливає на структуру, механічні та технологічні властивості сталі: знижує критичну швидкість охолодження і збільшує прогартовуваність, зменшує швидкість розпаду мартенситу, підвищує міцність, твердість і пружні властивості сталі, збільшує опір корозії, але знижує в'язкість за більшого вмісту. Такий вплив кремнію на властивості пов'язаний з його дією на матричну фазу (α -розчин) і карбіди [4].

Зміна вмісту вуглецю, який є одним з основних елементів системи Fe-C у сталі призводить до зростання міцності (твердості, границі плинності, тимчасового опору), але з підвищенням його кількості в сталі знижуються значення пластичних характеристик та ударної в'язкості [5].

Враховуючи особливості діапазонів хімічного складу в рамках марочного є значна важкість не тільки у відтворенні різних комбінацій хімічного складу, але і в визначенні оптимальних комбінацій введення хімічних елементів, їх засвоєння та вплив на кінцеві механічні властивості. Застосування концепції спрямованого хімічного зв'язку дозволяє на етапі розрахунків виявляти оптимальні співвідношення легуючих елементів, що забезпечують бажані фізико-хімічні властивості сплаву. Це дозволяє суттєво скоротити обсяг експериментальних досліджень та знизити витрати на створення нових матеріалів з покращеними характеристиками.

Мета роботи. Дослідження впливу зміни вмісту матричних елементів, а саме вуглецю, кремнію та марганцю на параметр зарядового стану системи – ZY з застосуванням розрахункового експерименту. Розробити рекомендації щодо вмісту основних компонентів вуглецевої сталі для досягнення високої твердості за можливо меншої кількості обробок.

Методика проведення досліджень. Комплексний пошук оптимального складу в межах відомих марок сталей, проведений у дослідженні, базується на концепції спрямованого хімічного зв'язку. Ця концепція розглядає металевий розплав як хімічно цілісну систему та включає факторний аналіз із побудовою моделей для досягнення необхідної рівномірної структурної складової. Оскільки фазові перетворення зумовлені міжатомною взаємодією у багатокомпонентному розплаві, на першому етапі розрахункових досліджень виконується згортка хімічного складу. Це здійснюється шляхом використання інтегральних параметрів стану заряду (Z^Y) та структури (d), які обчислюються

як результат попарної взаємодії всіх m компонентів через розв'язання системи нелінійних рівнянь у кількості $m^2 - m + 1$ [6].

В даній роботі досліджували вплив зміни вмісту компонентів в межах трьох марок сталі для залізничних осей: марка ОС (український стандарт ДСТУ 31334:2009), марка сталі EA1N (європейський стандарт EN 13261:2020), марка F (американський стандарт AAR M-101-2017). Хімічний склад цих сталей наведений в таблиці 1. У випадку, коли нормативні вимоги містять лише максимальні обмеження, для досліджуваних елементів (вуглець, кремній, марганець) як мінімальний вміст задавались значення, які відповідали мінімальним фактичним, відповідно до поточного контролю у промисловому виробництві. Для інших елементів брали фіксовано максимальний припустимий вміст.

Таблиця 1

Хімічний склад сталей, що подавались на розрахунок

Марка сталі	C	Mn	Si	P	S	Ni	Cu	Cr	Mo	V
EA1N	0,34-0,40	0,80-1,20	0,18-0,50	0,020	0,015	0,3	0	0,3	0,08	0
ОС	0,42-0,50	0,60-0,90	0,15-0,35	0,040	0,04	0,3	0,25	0	0	0
F	0,45-0,59	0,70-1,00	0,15-0,45	0,045	0,05	0	0,30	0	0	$\leq 0,08$

Результати досліджень. Розрахунок для сталі марки EA1N здійснювали від мінімального до максимального значення згідно вказаного у таблиці вмісту з відповідним кроком (C з кроком 0,006; Mn з кроком 0,044; Si з кроком 0,035). Вибір саме такого кроку спричинений створенням однакової кількості вимірів для усіх варіантів розрахунку задля забезпечення об'єктивності дослідження. При зміні вмісту вуглецю, вміст марганцю та кремнію брали рівним середньому значенню. У разі зміни марганцю, фіксували на середньому рівні вуглець та кремній. А для зміни кремнію, на середньому рівні зазначали вуглець та марганець.

В результаті застосованих умов було встановлено у попарних зв'язках $Z^Y - C$; $Z^Y - Mn$; $Z^Y - Si$ - тісний зв'язок з високими коефіцієнтами детермінованості ($R^2=0,99$), що представлено на рис.1, а .

Поряд з зазначеними видами зв'язків цінну інформацію несуть графічні зображення, які будуються з приведенням інтервалу значень досліджуваних змінних до єдиного відрізка $[0 \div 1]$ рис.2, б. Оскільки саме таким способом підвищується наочність виявлених впливів, читабельність одразу декількох змінних та співставлення спрямованості впливу однієї змінної відносно іншої. Так найбільший вплив на зростання значень параметру Z^Y має кремній, потім марганець, а вуглець дещо понижує Z^Y у порівнянні з впливом Mn і Si.

З результатами попередніх досліджень було визначено, що за значень зарядового стану системи в інтервалі $1,2 \leq Z^Y \leq 1,21$ відбувається зміна стану, який забезпечує більш високий рівень твердості: до цього інтервалу більша твердість у стані після гарячої пластичної деформації не менше 50% (ГПД), після зазначеного інтервалу – у стані після наступної термічної обробки (ТО) – нормалізації [7]. Тобто для сталей зі складом відповідно до марки EA1N ця точка знаходиться в області поза інтервалом $1,2 \leq Z^Y \leq 1,21$, що свідчить про необхідність проведення термічної обробки для підвищення твердості (рис. 1).

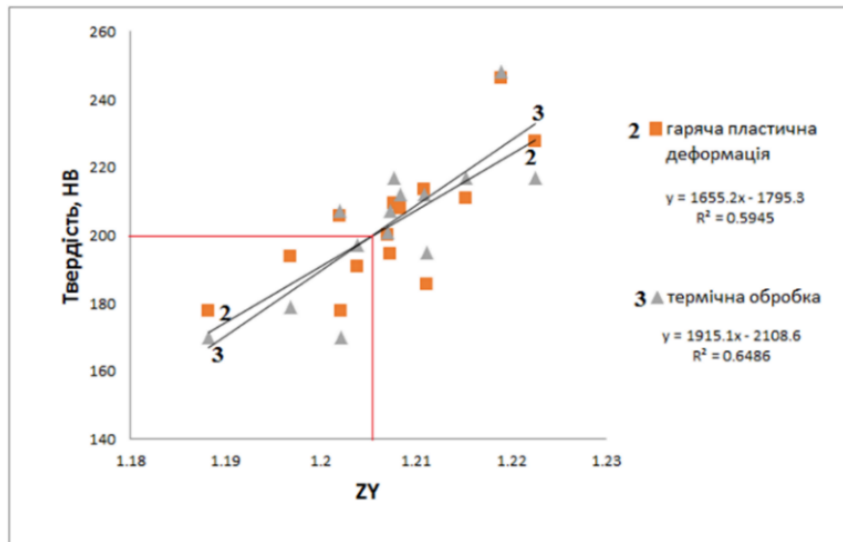


Рисунок 1 – Визначення значення параметру Z^Y , за якого змінюється вплив обробки на рівень твердості зразків дослідної сталі лабораторного виготовлення [7]

Значення Z^Y більші за 1,21 для всіх варіантів хімічного складу сталі в межах вимог до цієї марки. Таким чином, висновок про можливу відмову від проведення нормалізації після гарячої пластичної обробки, є незастосовуваним для цих сталей. Разом з тим, результати досліджень дозволили встановити, що інтенсивність впливу вуглецю, кремнію та марганцю різна. За вмісту цих елементів на рівні 0,5-0,6 у приведених координатах відбувається (рис.2, б) зміна: до цього значення найбільш ефективним елементом, який впливає на значення Z^Y є вуглець, після цього значення, провідну роль вже відіграють концентрації кремнію та разом з ним марганцю. Оскільки за збільшення Z^Y відбувається збільшення твердості, то для сталі марки EA1N може бути рекомендовано досягати ефективного збільшення твердості збільшенням вмісту вуглецю до його значень на рівні 0,37- 0,376%, у подальшому стає більш ефективним з точки зору підвищення твердості збільшення вмісту кремнію та марганцю до максимальних значень в межах марочного складу.

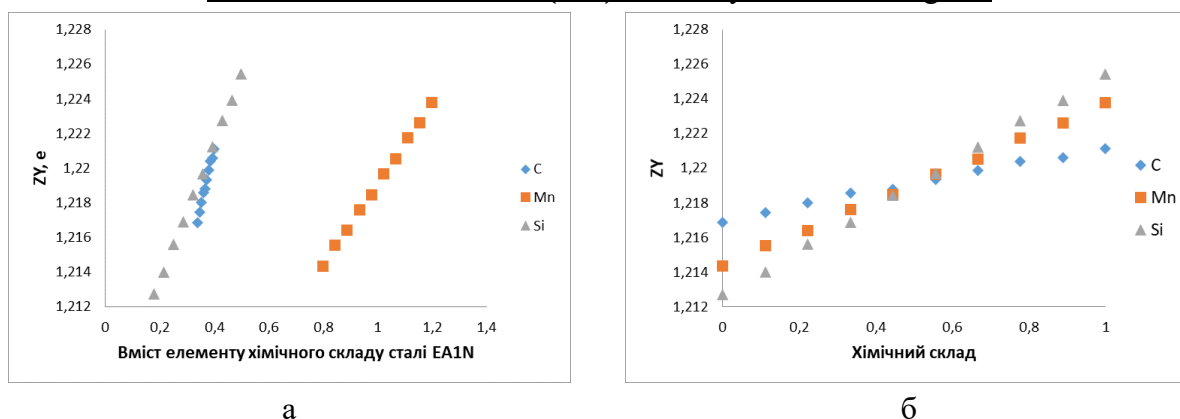


Рисунок 2- Взаємозв'язок зарядового стану системи - Z^Y з елементами хімічного складу сталі марки EA1N (а); вплив матричних елементів (C; Mn; Si) на зміну параметра міжатомної взаємодії - Z^Y (б)

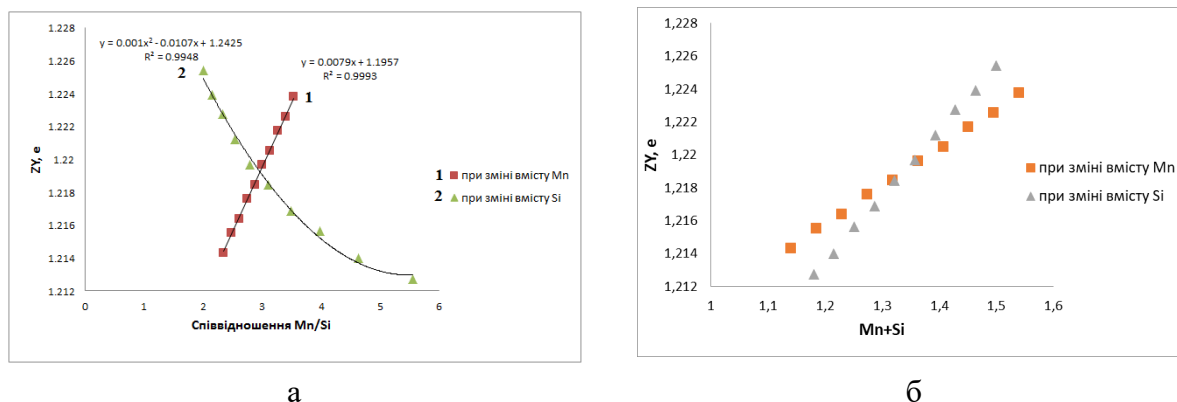


Рисунок 3– Взаємозв'язок зарядового стану сталі EA1N з співвідношенням Mn/Si (а); Взаємозв'язок зарядового стану сталі EA1N з (Mn+Si) (б)

При дослідженні впливу Mn/Si для сталі марки EA1N встановлено, що за значення цього параметру на рівні 2,8-3,2 відбувається зміна найбільш інтенсивного впливу співвідношення елементів на Z^Y сталі. До цього значення найбільший вплив та спадаючий характер функції носить збільшення параметру Mn/Si за рахунок зміни марганцю, а за подальшого збільшення Mn/Si вже стає більш ефективним збільшення вмісту марганцю, який має зростаючий характер. Таким чином, для підвищення параметру Z^Y , збільшення якого призводить до підвищення твердості, необхідно віддавати перевагу збільшенню марганцю після значення Mn/Si на рівні 2,8-3,2, а до цього інтервалу – за рахунок збільшення вмісту кремнію. При цьому найбільші й найменші значення Z^Y досягаються при зміні вмісту саме кремнію в межах марочного складу сталі. Як виходить з аналізу рис. 3а, для досягнення найбільших значень Z^Y , збільшення якого призводить до збільшення твердості, в сталі марки EA1N необхідно використовувати максимальний вміст кремнію в межах марочного за середніх значень марганцю та вуглецю. Трохи менших значень Z^Y , а як наслідок і твердості, можна отримати за максимального вмісту марганцю та середніх значень вуглецю та кремнію.

В результаті дослідження впливу сумарного вмісту кремнію та марганцю на зарядовий стан сталі (рис. 3, б) встановлено, що в інтервалі значень 1,32-1,38 відбувається зміна провідного елементу, що впливає на цей параметр. До вказаного інтервалу найбільший вплив чинить зміна вмісту марганцю, після цього інтервалу – кремнію. Оскільки головна мета досліджень – визначити умови, за яких досягається найбільші значення твердості, а вони відповідають найбільшим значенням параметру Z^Y , то можна рекомендувати дотримуватись наступних принципів: вміст вуглецю доцільно підвищувати до 0,37-0,38 %, подальше підвищення призведе також до підвищення твердості, але більш ефективним є керування вмістом марганцю та кремнію; вміст кремнію має бути максимальним в межах марочного (0,5%), при цьому вміст марганцю має бути на рівні середнього (1,0%). Такий вміст марганцю та кремнію також відповідає найвищим значенням параметру Z^Y (лінія 2 – за середнього значення марганцю, вуглецю та зміні вмісту кремнію) відповідно до рис. 3, який графічно відображає залежність зарядового стану системи від співвідношення марганцю до кремнію. Термічна обробка після гарячої пластичної деформації необхідна для підвищення твердості.

Розрахунок для сталі марки ОС. Хімічний склад досліджуваної сталі ОС відповідає хімічному складу, зазначеному у стандарті ДСТУ 31334:2009.

Зміна матричних елементів здійснювалась від мінімального до максимального значення згідно вказаного у таблиці 1 вмісту з відповідним кроком (C з кроком 0,008; Mn з кроком 0,033; Si з кроком 0,022).

Сталь марки ОС частково входить у вказаний інтервал $1,2 \leq Z^Y \leq 1,21$, а саме нижче червоної лінії на рис.4 дані задовольняють вказану вимогу. Тобто для сталей, хімічний склад яких відповідає умові, додаткова термічна обробка (нормалізація) може не призводити до суттєвого збільшення твердості порівняно зі станом після гарячої пластичної деформації. Усі елементи матричної системи у конкретному випадку для сталі марки ОС призводять до зростання значень параметру Z^Y . Можна бачити з рис. 4, б, що інтенсивність впливу елементів на параметр Z^Y близька, не відбувається зміни найбільш ефективного параметру.

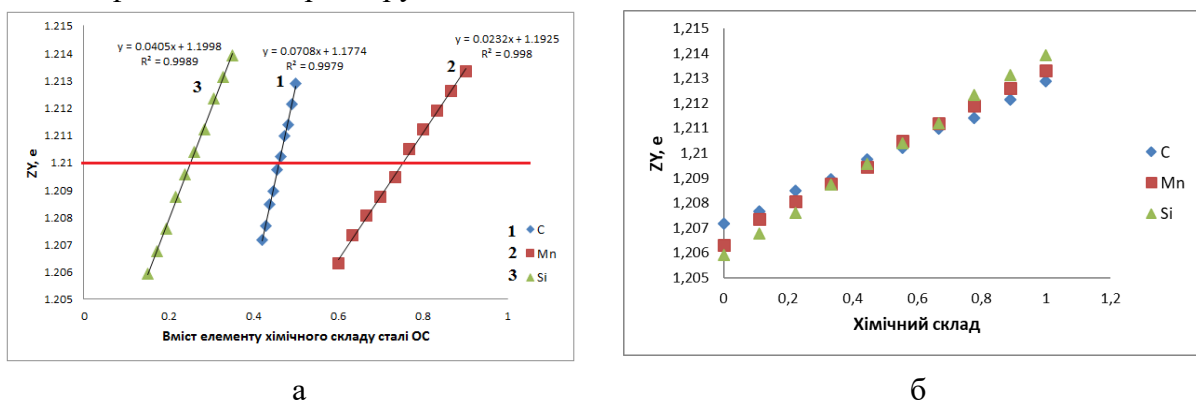


Рисунок 4– Взаємозв'язок зарядового стану системи - Z^Y з елементами хімічного складу сталі марки ОС (а); вплив матричних елементів (C; Mn; Si) на зміну параметра міжатомної взаємодії - Z^Y (б)

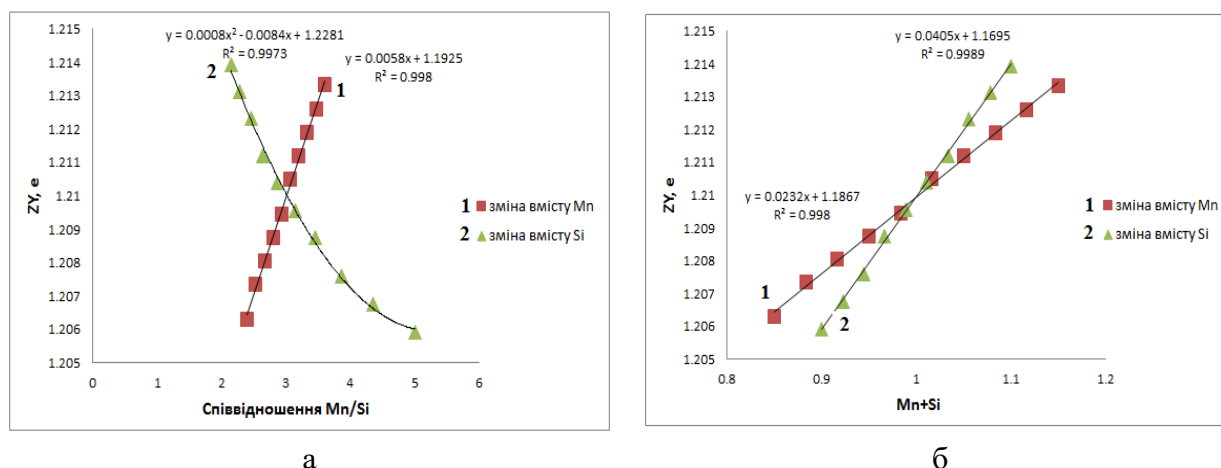


Рисунок 5 – Взаємозв'язок зарядового стану сталі ОС:
а) з співвідношенням Mn/Si; б) з (Mn+Si)

В результаті проведеного математичного експерименту встановлено, що за значень Mn/Si для сталі марки ОС на рівні 2,8-3,2 (так само, як і для попередньо аналізованої сталі EA1N) відбувається зміна найбільш інтенсивного впливу співвідношення елементів на Z^Y сталі. До цього значення найбільший вплив та спадаючий характер функції носить збільшення параметру Mn/Si за рахунок зміни кремнію, а за подальшого збільшення Mn/Si вже стає більш ефективним збільшення вмісту марганцю, який має зростаючий характер. Таким чином, для підвищення параметру Z^Y , збільшення якого призводить до підвищення твердості, необхідно віддавати перевагу збільшенню марганцю після значення Mn/Si на рівні 2,8-3,2, а до цього інтервалу – збільшенню вмісту кремнію. Найбільші значення параметру Z^Y спостерігали за змінювання кремнію при постійних середніх значеннях вуглецю та марганцю, ця закономірність з високою точністю ($R^2=0,997$) описується параболічною функцією.

В результаті дослідження впливу сумарного вмісту кремнію та марганцю на зарядовий стан сталі марки ОС встановлено, що в інтервалі значень 0,98-1,02 відбувається зміна провідного елементу, що впливає на цей параметр. До вказаного інтервалу найбільший вплив чинить зміна вмісту марганцю, після цього інтервалу – кремнію. Задля досягнення максимальних значень твердості (які спостерігається за високих значень параметру Z^Y) залізничних осей марки ОС рекомендовано дотримуватись наступних підходів: виходячи з аналізу рис. 4 та 5 вміст кремнію має бути наближеним до максимального в межах марочного (0,35%), при цьому вміст вуглецю та марганцю може бути на середньому рівні (0,75% марганцю та 0,46% вуглецю). Подальше збільшення вуглецю і марганцю також може дати певний приріст твердості, однак їх вплив не має високої ефективності. Важливо відзначити, що за хімічного складу сталі для якого параметр Z^Y відповідає діапазону 1,20-1,21 вплив термічної обробки (рис. 1) на твердість відсутній. Тому, з точки зору забезпечення максимального рівня твердості за мінімальної кількості обробок, для сталей з хімічним складом, який відповідає вказаній умові (рис. 5, нижче червоної лінії) можна не проводити термічне оброблення після гарячої пластичної деформації. Рівень червоної лінії відповідає середнім значенням вмісту елементів.

Таким чином, за зменшення вмісту кремнію з максимального до середнього є можливість відмовитись від цілого етапу виготовлення осі – термічного оброблення, при цьому твердість матиме задовільний рівень.

Розрахунок для сталі марки F. Хімічний склад досліджуваної сталі F відповідає хімічному складу, зазначеному у стандарті.

Зміна матричних елементів здійснювалась від мінімального до максимального значення згідно вказаного у таблиці 1 вмісту з відповідним кроком (C з кроком 0,016; Mn з кроком 0,033; Si з кроком 0,033).

Сталь марки F можна сказати майже не входить у вказаний інтервал $1,2 \leq Z^Y \leq 1,21$. Нижче червоної лінії на рис. 6 дані задовольняють вказану вимогу. Результати досліджень дозволили встановити, що інтенсивність впливу вуглецю, кремнію та марганцю різна. За вмісту цих елементів на рівні 0,5 - 0,6 у приведених координатах відбувається (рис.2, б) зміна: до цього значення найбільш ефективним елементом, який впливає на значення Z^Y є марганець, після цього значення, провідну роль вже відіграють концентрації кремнію та разом з ним вуглецю, а інтенсивність впливу марганцю стає меншою.

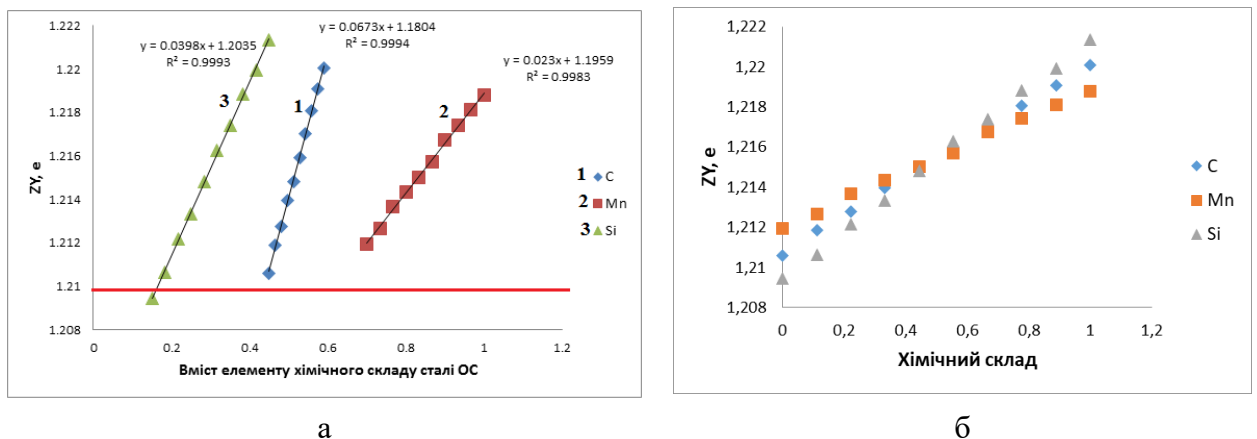


Рисунок 6 – Взаємозв'язок зарядового стану системи - Z^Y з елементами хімічного складу сталі марки F (а); вплив матричних елементів (C; Mn; Si) на зміну параметра міжатомної взаємодії - Z^Y (б)

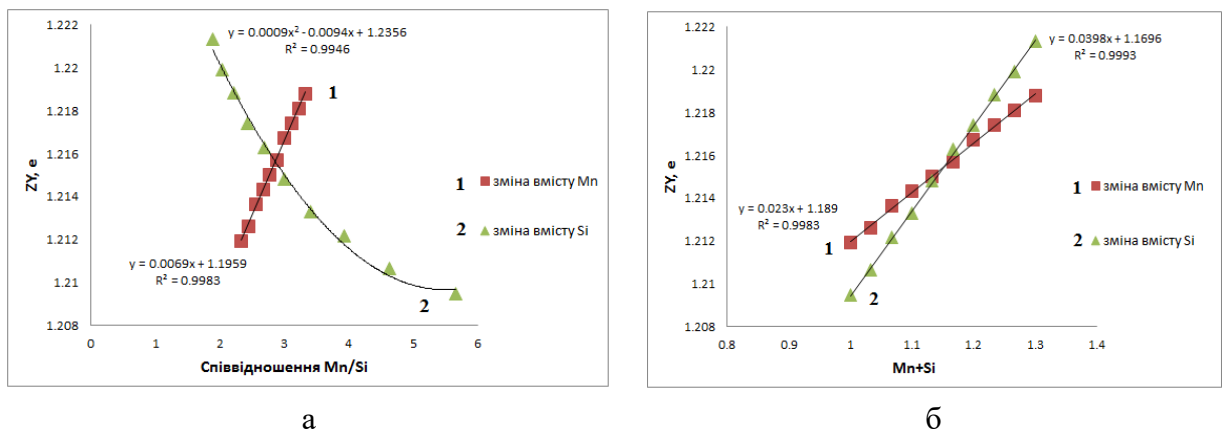


Рисунок 7 - Взаємозв'язок зарядового стану сталі F: а) з співвідношенням Mn/Si; б) з сумою (Mn+Si)

В результаті проведеного математичного експерименту встановлено, що за значень Mn/Si для сталі марки F на рівні 2,8-3,2 (так само, як і для попередньо аналізованих сталей EA1N та OC) відбувається зміна найбільш інтенсивного впливу співвідношення елементів на Z^Y сталі. До цього значення найбільший вплив та спадаючий характер функції носить збільшення параметру Mn/Si за рахунок зміни кремнію, а за подальшого збільшення Mn/Si вже стає більш ефективним збільшення вмісту марганцю, який має зростаючий характер. Таким чином, для підвищення параметру Z^Y , збільшення якого призводить до підвищення твердості необхідно віддавати перевагу збільшенню марганцю після значення Mn/Si на рівні 2,8-3,2, а до цього інтервалу – за рахунок збільшення вмісту кремнію.

В результаті дослідження впливу сумарного вмісту кремнію та марганцю на зарядовий стан сталі F встановлено, що в інтервалі значень 1,14-1,18 відбувається зміна провідного елементу, що впливає на цей параметр. До вказаного інтервалу найбільший вплив чинить зміна вмісту марганцю, після цього інтервалу – кремнію.

Таким чином, в результаті розрахункового експерименту можна зробити рекомендації щодо підходів до обрання раціонального хімічного складу в межах марки F: з точки зору забезпечення максимальної твердості, яка прямо пов'язана зі збільшенням параметру Z^Y необхідно обирати максимальне значення кремнію (рис. 7, 8) на рівні близько 0,45 % мас. та вміст вуглецю та марганцю не нижче середнього, при цьому наступна термічна обробка після гарячої деформації також сприятиме підвищенню твердості. Для сталі, склад якої відповідає Z^Y менше 1,21 з мінімальним вмістом кремнію та вмістом вуглецю і марганцю нижче середнього, нормалізація після гарячої пластичної деформації не призведе до суттєвого підвищення твердості, тому з позицій забезпечення достатньої твердості за мінімальної кількості обробок такий підхід також може бути використаний на практиці.

Висновки. Розроблені загальні рекомендації щодо вибору раціонального хімічного складу. Для забезпечення максимальної твердості може бути використаний раціональний підхід: вміст кремнію має бути наближеним до максимального рівня в межах марочного, вміст вуглецю і марганцю – не нижче середнього. Для сталей марок EA1N, частково марки OC та F наступна термічна обробка після гарячої пластичної деформації забезпечує підвищення твердості. Для сталі марки OC та F за певного хімічного складу наступна нормалізація не призведе до суттєвого підвищення твердості, тобто може бути забезпечений достатній рівень твердості без проведення вказаного етапу виробництва.

ЛІТЕРАТУРА

1. Clarke A.J., Miller M., Field R., Coughlin D., Gibbs P., Clarke K.D., Alexander D., Powers K., Papin A.P., Krauss G. Atomic and nanoscale chemical and structural changes in quenched and tempered 4340 steel. *Acta Materialia*. 2014. Vol. 77. P.17–27.
<https://doi.org/10.1016/j.actamat.2014.05.032>
2. López Ríos M., Socorro Perdomo P.P., Voiculescu I., Geanta V., Crăciun V., Boerasu I., & Mirza Rosca J.C. Effects of nickel content on the microstructure, microhardness and corrosion behavior of high-entropy AlCoCrFeNi alloys. *Scientific Reports*. 2020. Vol. 10. P. 21119.

3. Posonskyi S.F. The effect of manganese and carbon on the mechanical properties of the welded layer of the bucket teeth of the Hadfield steel excavator. *Problems of Tribology*. 2024. Vol. 29. P. 65-71.
4. Коковихин Ю.И. Технология сталепроволочного производства :учебн. для студентов вузов. Киев : Ин-т систем. исслед. образования, 1995. 608 с.
5. Узлов И.Г., Гасик М.И., Есаулов А.Т., Мирошниченко Н.Г., Пройдак Ю.С. Колесная сталь. К.:Техніка, 1985. 168 с.
6. Togobitska D., Belkova A. New approach to evaluating the thermodynamic consistency of melts in the "Metal-Slag" system based on interatomic interaction parameters. *Lithuanian Journal of Physics*. 2024. Vol. 64. P. 58-71. DOI: 10.3952/physics.2024.64.1.6
7. Поворотня І. Р., Сафронова О. А., Подольський Р. В., Олійник Е. В. Вплив хімічного складу на фазову структуру і твердість вуглецевої сталі для залізничних осей після деформації та термічної обробки. *Фундаментальні та прикладні проблеми чорної металургії*. 2024. Вип. 38. С. 656-671. <https://doi.org/10.52150/2522-9117-2024-38-656-671>.

REFERENCES

1. Clarke, A.J., Miller, M., Field, R., Coughlin, D., Gibbs, P., Clarke K.D., Alexander D., Powers K., Papin A.P., & Krauss G. (2014). Atomic and nanoscale chemical and structural changes in quenched and tempered 4340 steel. *Acta Materialia*, 77, 17–27. <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2014.05.032>
2. López Ríos, M., Socorro Perdomo, P.P., Voiculescu, I., Geanta, V., Crăciun, V., Boerasu, I., & Mirza Rosca, J.C. (2020). Effects of nickel content on the microstructure, microhardness and corrosion behavior of high-entropy AlCoCrFeNi_x alloys. *Scientific Reports*, 10, 21119. <https://doi.org/10.1038/s41598-020-78108-5>
3. Posonskyi, S.F. (2024). The effect of manganese and carbon on the mechanical properties of the welded layer of the bucket teeth of the Hadfield steel excavator. *Problems of Tribology*, 29, 65-71. <https://doi.org/10.31891/2079-1372-2024-113-3-65-71>
4. Kokovihin, Yu.I. (1995). Tehnologiya staleprovolochnogo proizvodstva :uchebn. dlya studentov vuzov [Tehnologiya staleprovolochnogo proizvodstva :uchebn. dlya studentov vuzov]. Tehnologiya staleprovolochnogo proizvodstva :uchebn. dlya studentov vuzov [in Russian].
5. Uzlov, I.G., Gasik, M.I., Esaulov, A.T., Miroshnichenko, N.G., & Proydak, Yu.S. (1985). Kolesnaya stal [Wheel steel]. Kyiv: Tekhnika [in Russian].
6. Togobitska, D., & Belkova, A. (2024). New approach to evaluating the thermodynamic consistency of melts in the "Metal-Slag" system based on interatomic interaction parameters. *Lithuanian Journal of Physics*, 64, 58-71. <https://doi.org/10.3952/physics.2024.64.1.6>
7. Povorotnia, I.R., Safronova, O.A., Podolskyi, R.V., & Oliinyk, E.V. (2024). Vplyv khimichnoho skladu na fazovu strukturu i tverdist vuhletsevoi stali dlia zaliznychnykh osei pislia deformatsii ta termichnoi obrobky [Injection of a chemical warehouse onto the phase structure and hardness of carbon steel for sliding axes after deformation and thermal processing]. *Fundamentalni ta prykladni problemy chornoj metalurhii*, 38, 656-671. <https://doi.org/10.52150/2522-9117-2024-38-656-671>.

Received 26.05.2025.

Accepted 30.05.2025.

Optimal Mn/Si parameters for adjusting the mechanical properties of steel for railway axles

The work presented a comprehensive approach to finding the optimal steel composition within known grades based on the concept of directional chemical bonding. This approach

made it possible to take into account the overall chemical composition and to analyze the nature of interactions between elements at the level of interatomic bonds, which is critical for predicting the properties of the final material. The concept of directed chemical bonding was based on the idea of the ability of individual elements to undergo electronic redistribution in the melt, which in turn affects the structure and stability of the system. The aim of the study was to determine the effect of variations in the content of the main matrix elements — carbon, silicon, and manganese - on the charge state of the system, represented by the generalized parameter Z^Y . This parameter reflects the degree of chemical balance in the alloy and serves as an indicator of the stability of the melt's electronic structure. As a result, the sensitivity of the system to the Mn/Si ratio was investigated as an indicator defining electronic and structural equilibrium. Thus, to enhance the Z^Y parameter, whose increase leads to improved hardness, it is necessary to prioritize manganese content after the Mn/Si ratio reaches 2.8–3.2, while below this interval — through an increase in silicon content. The manganese-to-silicon ratio (Mn/Si) should be within the range of 2.8–3.2. An increase in Mn/Si beyond 3.2 causes manganese to dominate, which may disrupt the balance. Therefore, controlling the content of alloying elements, especially silicon and manganese, is a key condition for producing steels with predictable properties. The results of the modeling emphasize the feasibility of using computational approaches in materials science. Predictive modeling allows for the effective adaptation of steel structure to the specified performance characteristics already at the stage of chemical composition design. This contributes to reducing experimental development costs and shortening the time to bring new alloys into production.

Keywords: railway axle, predictive modeling, silicon, manganese, mechanical properties, chemical composition.

Поворотня Ірина Романівна – канд. техн. наук, науковий співробітник Інституту чорної металургії ім. З.І. Некрасова НАН України, Дніпро, Україна.

Сафронова Олена Анатоліївна – аспірантка, науковий співробітник Інституту чорної металургії ім. З.І. Некрасова НАН України, Дніпро, Україна.

Подольський Ростислав Вячеславович – докт. філ., в.о зав. відділу проблем деформаційно-термічної обробки конструкційних сталей Інституту чорної металургії ім. З.І. Некрасова НАН України, Дніпро, Україна.

Кононенко Ганна Андріївна - докт. техн. наук, ст. досл., старший науковий співробітник Інституту чорної металургії ім. З.І. Некрасова НАН України, професор НТУ «Дніпровська Політехніка», Дніпро, Україна.

Povorotnia Irina – Cand.Tech.Sci., researcher of the Institute of Iron and Steel of Z.I. Nekrasov NAS of Ukraine.

Safronova Olena – PhD-student, researcher of the Institute of Iron and Steel of Z.I. Nekrasov NAS of Ukraine.

Podolskyi Rostyslav – PhD, Acting Head of the Department of Problems of Deformation and Heat Treatment of Structural Steels of the Institute of Iron and Steel of Z.I. Nekrasov NAS of Ukraine.

Kononenko Ganna - Doct. technical science, sen.resear., Senior Researcher at the Z.I. Nekrasov Institute of Ferrous Metallurgy of the NAS of Ukraine, Professor at the National Technical University "Dnipro Polytechnic", Dnipro, Ukraine.