

9. Нигматулин Р. И. Основы механики гетерогенных сред.— М.: Наука, 1978.
10. Джонс У. Модели турбулентных течений с переменной плотностью и горением // Методы расчета турбулентных течений: Пер. с англ./Под ред. В. Колльмана.— М.: Мир, 1984.
11. Деревич И. В., Ерошенко В. М., Зайчик Л. И. Влияние частиц на интенсивность турбулентного переноса запыленного газа // ИФЖ.— 1983.— Т. 45, № 4.
12. Деревич И. В., Зайчик Л. И. Осаждение частиц из турбулентного потока // Изв. АН СССР. МЖГ.— 1988.— № 5.
13. Шрайбер А. А., Милютин В. М., Яценко В. П. Гидромеханика двухкомпонентных потоков с твердым полидисперсным веществом.— Киев: Наук. думка, 1980.
14. Роди В. Модели турбулентности окружающей среды // Методы расчета турбулентных течений: Пер. с англ./Под ред. В. Колльмана.— М.: Мир, 1984.
15. Naqvi K. B., Mork K. J., Waldenstrom S. Reduction of Fokker — Plank equation with an absorbing or reflecting boundary to the diffusion equation and radiation boundary condition // Phys. Rev. Letters.— 1982.— V. 49, N 5.
16. Friedlander S. K., Johnstone H. F. Deposition of suspended particles from turbulent gas streams // Ind. Engng. Chem.— 1957.— V. 49, N 7.
17. Launder B. E., Spalding D. B. The numerical computation of turbulent flows // Comp. Meth. Appl. Mech. Eng.— 1974.— V. 3, N 1.
18. McCoy D. D., Hanratty T. J. Rate of deposition of droplets in annular two-phase flow // Intern. J. Multiphase Flow.— 1977.— V. 3, N 4.
19. Алексеенко С. В., Пронайло М. Я., Юрлагин А. В. Исследования турбулентного течения жидкости в прямоугольном канале с боковыми входами // Изв. СО АН СССР. Сер. техн. наук.— 1988.— № 7, вып. 2.
20. Патанкар С. Численные методы решения задач теплообмена и динамики жидкости: Пер. с англ./Под ред. В. Д. Виленского.— М.: Энергоатомиздат, 1984.
21. Patankar S. V., Spalding D. B. A calculation procedure for heat, mass and momentum transfer in three-dimensional parabolic flows // Intern. J. Heat Mass Transfer.— 1972.— V. 15, N 10.

г. Москва

Поступила 17/X 1989 г.,
в окончательном варианте — 30/I 1991 г.

УДК 533.6 + 533.9

В. И. Кирко, В. И. Мариловцев, И. И. Пак

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ЗАТВЕРДЕВАНИЯ РАСПЛАВА НА ПОВЕРХНОСТИ ВЕЩЕСТВА

В настоящее время получили широкое распространение динамические методы термической обработки металлов и сплавов. Особый интерес представляют технологии термообработки материалов в быстропотекающих процессах, связанных с использованием современных устройств — лазерных, взрывных и т. д. [1]. Подобные процессы характеризуются действием на вещество высоких значений давления и температуры. При этом в материале происходят различные структурные и фазовые превращения, протекающие в экстремальных условиях нагревания и охлаждения [2]. В этой связи появляется возможность получения материалов с заданными полезными свойствами. В частности, практическую реализацию получили метастабильные материалы с аморфной или мелкодисперсной структурой [3].

Проведение экспериментальных исследований закономерностей термической обработки при сверхбыстрых скоростях нагревания и охлаждения сопряжено с определенными трудностями, а в некоторых случаях не представляется возможным. Теоретический анализ тепловых процессов, как правило, проводят на основе классических математических моделей теплопроводности, задач типа Стефана [4]. Однако для удовлетворительных оценок количественных и качественных характеристик структурообразования вещества необходимо рассматривать кинетику процесса образования новой фазы.

Данная работа посвящена численному анализу образования аморфных и мелкокристаллических структур в тонких приповерхностных слоях расплава при резком охлаждении.

Тонкий слой расплава на поверхности вещества можно получить воздействием концентрированных потоков энергии [2]. Высокая скорость

охлаждения достигается за счет теплоотвода в глубь холодной подложки. Структура затвердевшего расплава зависит от динамики температурного режима, величины скорости охлаждения и теплофизических характеристик вещества. Действительно, кинетика образования новой кристаллической фазы переохлажденного расплава определяется его вязкостью и временем релаксации, которые возрастают с падением температуры.

Зарождение новой фазы осуществляется флуктуационно или спонтанно в зависимости от степени переохлаждения.

В случае быстрого переохлаждения расплава жидкая фаза является абсолютно нестабильной и с кинетической точки зрения наиболее вероятно спонтанное образование и рост зародышей новой фазы. При спонтанном зародышеобразовании размер критического зародыша порядка атомного, а изменение размера зародыша новой фазы происходит за счет присоединения или отрыва одиночных атомов, преодолевающих потенциальный барьер. Функция распределения зародышей по размерам подчиняется основному кинетическому уравнению, полученному при условии, что рост осуществляется лишь за счет присоединения одиночных атомов активируемым способом через потенциальный барьер [5].

Рассмотрим процесс охлаждения тонкого слоя расплава, контактирующего идеальным образом с холодной подложкой. Задача о «составной стенке» может описывать тепловые процессы получения аморфных пленок современными технологиями (выстреливание капли расплава или его растекание по быстровращающемуся барабану и т. п.).

Математическую формулировку задачи примем в виде

$$(1) \quad CR \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x} \right) + RL \frac{\partial}{\partial x} \int_0^{\infty} f(x, n, t) dn;$$

$$(2) \quad T|_{t=0} = \begin{cases} T^*, & 0 \leq x \leq \Delta S, \\ T_0, & \Delta S \leq x \leq S; \end{cases}$$

$$(3) \quad \left. \frac{\partial T}{\partial x} \right|_{x=0} = 0, \quad \left. \frac{\partial T}{\partial x} \right|_{x=S} = 0;$$

$$(4) \quad \frac{\partial f}{\partial t} = 0,5 \frac{\partial^2}{\partial n^2} (f(n, t) [P_+(n) + P_-(n)]) + \frac{\partial}{\partial n} (f(n, t) [P_-(n) - P_+(n)]),$$

$$P_{\pm}(n) = n^* \nu \exp \left[-\frac{U}{kT} \pm \frac{d\Delta F(n)}{dn} \right];$$

$$(5) \quad f(n)|_{t=0} = \frac{N}{r_a n^*} \exp \left[-\frac{\Delta F(n)}{kT} \right];$$

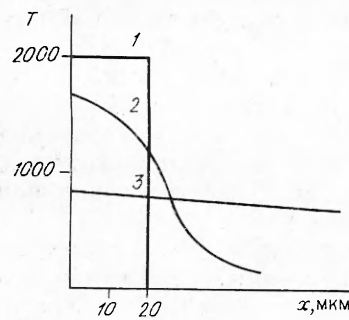
$$(6) \quad f(n, t)|_{n=\infty} = 0;$$

$$(7) \quad \left(\alpha \frac{\partial f}{\partial n} + \beta f \right) \Big|_{n=1} = 0.$$

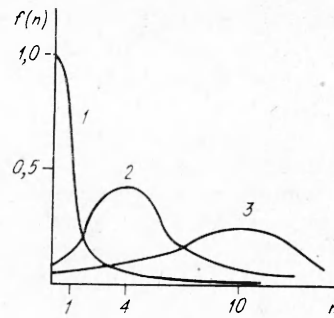
Здесь C , R , λ — теплоемкость, плотность, теплопроводность материала стенки — разрывные функции (приняты кусочно-постоянными); L — скрытая теплота плавления; T^* — температура расплава; T_0 — температура подложки; U — энергия активации на один атом; ν — дебаевская частота; k — постоянная Стефана — Больцмана; n^* — количество атомов на поверхности зародыша; P_{\pm} — вероятность присоединения или отрыва атома; r_a — радиус атома; N — число атомов в системе; f — функция распределения зародышей по размерам, нормированная на

единицу $\int_0^{\infty} f dn = 1$; α , β — кинетические коэффициенты; $d\Delta F(n)/dn = -H(T_p - T(t))/T_p$ — движущая сила процесса в условиях спонтанного роста; T_p — температура плавления; H — энтальпия фазового перехода на атом; ΔF — изменение свободной энергии.

Уравнение теплопроводности (1) содержит в правой части кинетический член, который играет роль объемного источника тепла при затверде-



Р и с. 1



Р и с. 2

вании расплава. Начальные условия по температуре (2) имеют разрыв на линии контакта $x = \Delta S$, а для функции распределения, находящейся в равновесном состоянии, представлены уравнением (5). Граничные условия (3) для тепловой части задачи принимаются в предположении теплоизоляции внешних поверхностей стенки. Для функции распределения f естественным условием (6) является отсутствие очень больших новообразований при $n \rightarrow \infty$. Соотношение (7) определяет нулевой поток частиц в пространстве размеров при $n = 1$ [6].

При численной реализации задачи использованы неявные разностные схемы Кранка — Николсона и дискретное представление основного кинетического уравнения (4)

$$f(n, t + \Delta t) - f(n, t) = -f(n, t)\Delta t[P_+(n, t) + P_-(n, t)] + \\ + f(n + 1, t)P_-(n + 1, t)\Delta t + f(n - 1, t)P_+(n - 1, t)\Delta t.$$

Рассмотрим случай затвердевания расплава Fe с температурой $T_p = 2000^\circ\text{C}$ и толщиной $\Delta S = 20$ мкм, соприкасающегося с холодной подложкой (материал Fe).

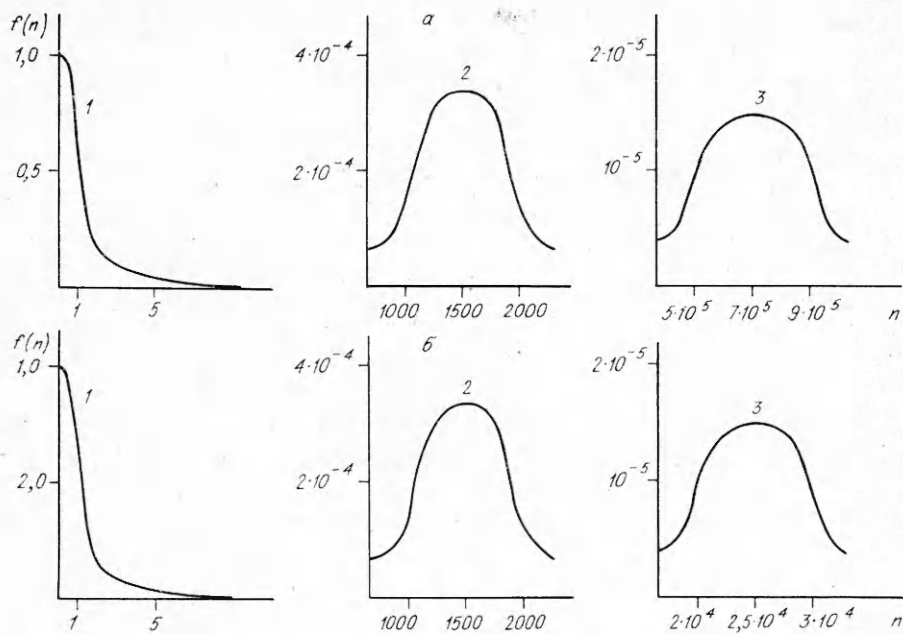
На рис. 1, 2 показаны характерные распределения температуры и функции f в составной стенке в различные моменты времени (линии 1—3 для 10^{-6} , $2 \cdot 10^{-6}$, $5 \cdot 10^{-6}$ с). Расчетные значения температурных полей практически не отличаются от аналогичных расчетов, проведенных при решении задачи по классическим моделям Стефана. Поскольку градиенты температуры по времени dT/dt (скорость охлаждения) достигают значений 10^9 — 10^6 град/с, то имеет место спонтанное зарождение новой фазы и выбранная математическая формулировка задачи справедлива.

Изменение структуры затвердевающего расплава можно проследить по поведению функции распределения $f(x, n, t)$. Рис. 3, а иллюстрирует вид $f(x, n, t)$ в фиксированной точке расплава $x = 10$ мкм в различные моменты времени: $t = 0$; $2 \cdot 10^{-5}$; $4 \cdot 10^{-5}$ с (линии 1—3). На рис. 3, б показана функция распределения в заданный момент времени $t = 2 \times 10^{-5}$ с для точек $x = 1$; 10; 20 мкм (линии 1—3).

Следует отметить ярко выраженный максимум в поведении $f(x, n, t)$, амплитуда которого резко спадает с течением времени. За средний размер зародышей примем величину максимума функции распределения в момент «замораживания» процесса формирования новой фазы.

Очевидно, что функция распределения в момент полного затвердевания расплава определяет конечную структуру по размерам зародышей новой фазы. При толщине слоя расплава 20 мкм средний размер зародыша (размер кристаллитов в затвердевшем расплаве) составляет $5 \cdot 10^6$ атомов, или 0,017 мкм в предположении сферичности зерна с плотной упаковкой.

В настоящее время представляет интерес термическая обработка поверхности материала концентрированными потоками энергии [2]. Исследования показали, что затвердевший расплав на поверхности имеет мелкокристаллическую и даже аморфную структуру. В этой связи важно



Р и с. 3

знать закономерности протекания процесса охлаждения поверхности с целью управления структурными превращениями.

Рассмотрим воздействие теплового потока q на поверхность вещества в течение небольшого промежутка времени Δt , который обеспечивает проплавление поверхностного слоя без существенного разрушения материала за счет испарения. В этом случае процессу охлаждения расплава (см. выше) предшествует стадия нагревания поверхности, которую можно математически описать классической задачей Стефана:

$$(8) \quad CR \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x} \right), \quad 0 < x < S, \\ 0 < t < \Delta t;$$

$$(9) \quad -\lambda \frac{\partial T}{\partial x} \Big|_{x=0} = q;$$

$$(10) \quad \frac{\partial T}{\partial x} \Big|_{x=S} = 0;$$

$$(11) \quad T|_{t=0} = T_0;$$

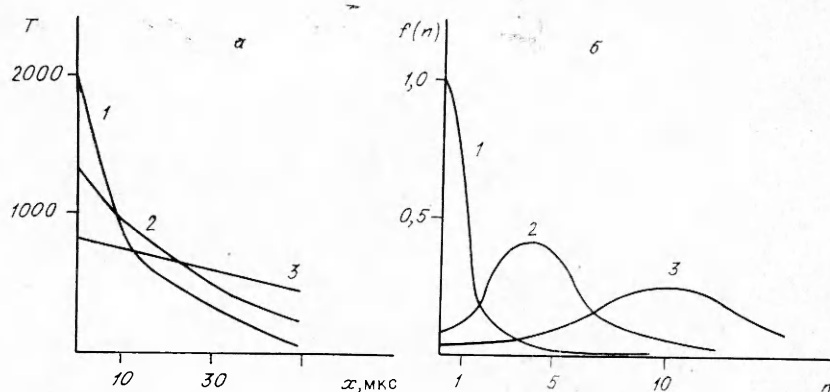
$$(12) \quad RL \frac{\partial \xi}{\partial t} = [q] |_{x=\xi}, \quad T|_{x=\xi} = T_*$$

(ξ — координата движущейся фазовой границы расплав — твердое тело, T_* — равновесная температура плавления).

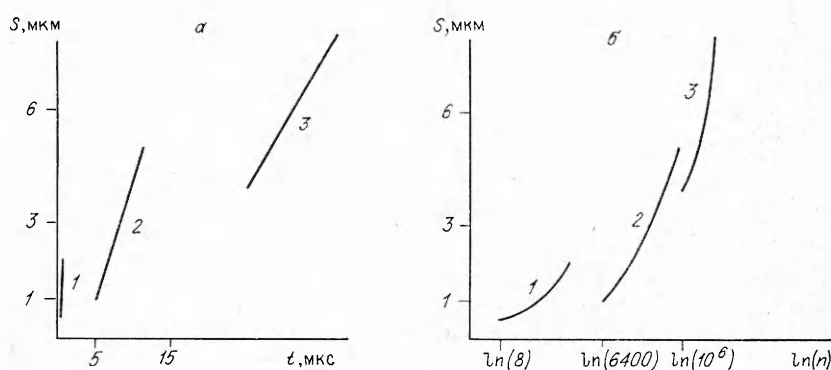
Решение задачи (8)–(12) в момент окончания действия теплового потока $t = \Delta t$ представляет начальное распределение температуры для последующей задачи о «составной стенке» (1)–(7).

На рис. 4, а, б показаны характерные распределения температуры и функции f при воздействии теплового потока $q = 10^6$ Вт/см² в течение времени $t = 9$ мкс (обозначения, как на рис. 1, 2). Качественно полученные зависимости слабо отличаются от рассмотренных выше (см. рис. 1, 2).

Функция распределения $f(x, n, t)$ существенно зависит от скорости охлаждения расплава, которая не является постоянной в течение процесса охлаждения и существенно отличается в различных точках по толщине расплава. Однако для точек расплава толщиной до 20 мкм «замороженная» функция распределения имеет примерно одинаковый вид, что означает практически однородность структуры по толщине.



Р и с. 4



Р и с. 5

На рис. 5, а, б представлены расчеты, определяющие достигаемую глубину расплава по времени на поверхности стенки (материал Fe) для различных значений q и в предположении отсутствия испарения ($q = 5 \cdot 10^6; 10^6; 0,5 \cdot 10^6$ Вт/см² — линии 1—3). Рис. 5, б иллюстрирует зависимость среднего размера зерен затвердевшего расплава от его толщины. Например, при воздействии теплового потока $q = 10^6$ Вт/см² в течение $t = 5$ мкс на поверхности стенки можно получить расплав толщиной $\Delta S = 1$ мкм (рис. 4, а). При последующем затвердевании расплава следует ожидать структуру со средними размерами кристаллитов $n = 6400$ атомов или $d = 18,5 \cdot 10^{-4}$ мкм.

Таким образом, в работе представлена математическая модель теплового процесса в веществе при воздействии концентрированного потока энергии с учетом кинетики образования кристаллической фазы. Полученные зависимости позволяют оценивать размеры зародышей кристаллической фазы в затвердевшем расплаве, а также степень его аморфизации.

ЛИТЕРАТУРА

1. Кирко В. И., Кузовников А. А. Динамическое компактирование порошков аморфных сплавов (обзор литературы). — Красноярск, 1985. — (Препр./КФ СО АН СССР; № 358).
2. Крапошин В. С. Обработка поверхности металлических материалов лазерным излучением // Поверхность. Физика. — 1982. — № 3.
3. Металлические стекла/Под ред. Дж. Дж. Гилтмана, Х. Дж. Лими. — М.: Металлургия, 1984.
4. Пак Н. И., Шикунов С. А. Численное решение двумерной задачи Стефана в энтропийной формулировке в изменяющейся области на подвижных сетках. — Красноярск, 1989. — (Препр./АН СССР, Сиб. отд-ние, ВЦ; № 14).
5. Любов Б. Я. Теория кристаллизации в больших объемах. — М.: Наука, 1975.
6. Кудинов Г. М., Шмаков В. А. К теории зарождения новой фазы. Аморфизация металлов // ДАН СССР. — 1982. — Т. 264, № 3.

г. Красноярск

Поступила 6/II 1991 г