

УДК 536.248.2

А. М. Павленко ✉, **Б. О. Усенко**, **Г. В. Кошлак**

Полтавський національний технічний університет імені Юрія Кондратюка, Першотравневий проспект, 24, м. Полтава, 36011, Україна

✉ am.pavlenko@i.ua, Scopus ID: 12801813400

МЕТОД ОТРИМАННЯ АМОРФНОЇ СТРУКТУРИ

В статті наведено результати дослідження енерго-ресурсозберігаючої технології формування масивних аморфних структур. Розглянуті особливості процесів тепломасообміну при утворенні в розплаві додаткових активних центрів охолодження, локальних теплостоків для створення внутрішнього тепловідведення. Побудована математична модель плавлення інокуляторів в розплавах для оптимізації процесу отримання масивних аморфних структур, яка дозволяє скоротити час експериментальних досліджень та матеріальні ресурси.

Ключові слова: Тепломасообмін – Аморфна структура – Інокулятор – Теплопровідність – Математична модель – Охолодження – Плавлення

А. М. Павленко, Б. О. Усенко, А. В. Кошлак

Полтавский национальный технический университет имени Юрия Кондратюка, Первомайский проспект, 24, г. Полтава, 36011,

МЕТОД ПОЛУЧЕНИЯ АМОРФНОЙ СТРУКТУРЫ

В статье приведены результаты исследования энерго-ресурсосберегающей технологии формирования массивных аморфных структур. Рассмотрены особенности процессов тепломассообмена при образовании в расплаве дополнительных активных центров охлаждения, локальных теплостоків для создания внутреннего теплоотвода. Построена математическая модель плавления инокуляторов в расплавах для оптимизации процесса получения массивных аморфных структур, которая позволяет сократить время экспериментальных исследований и материальные ресурсы.

Ключевые слова: Тепломассообмен – Аморфная структура – Инокулятор – Теплопроводность – Математическая модель – Охлаждение – Плавление



This work is licensed under the Creative Commons Attribution International License (CC BY).
<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>

ВСТУП

Процес формування масивного шару з аморфною структурою має ряд труднощів, так як охолодження об'ємного масиву розплавленого металу, на відміну від тонких плівок, є процесом, який відрізняється істотною інтенсивністю енергообмінних процесів. Для отримання масивних аморфних структур нами була розроблена експериментальна лабораторна установка, на якій досліджували процес отримання масивних аморфних структур методом розливання в мідну охолоджувану форму з подачею охолоджених часток (інокуляторів). Сутність технології лиття розплаву в охолоджувану форму з подачею охолоджених часток (інокуляторів) полягає в реалізації внутрішнього тепловідведення та утворенні в розплаві додаткових активних центрів охолодження. Вплив інокуляторів проявляється у збільшенні швидкості та розвитку переважно об'ємного затвердіння. Дана технологія відрізняється в основному реалізацією внутрішнього тепловідведення за допомогою локальних теплостоків (інокуляторів). Розробка експериментальних технологій процесу лиття в охолоджувану форму з додаванням інокуляторів вимагає вели-

ких витрат часу і матеріальних ресурсів, скоротити які дозволяє застосування методів математичного моделювання та оптимізації. Математичне моделювання процесів тепломасообміну інокуляторів в розплавах дозволить виявити особливості технологічного процесу, та встановити вплив інокуляторів на ступінь аморфізації розплаву.

ОСНОВНА ЧАСТИНА**Розрахунок процесів плавлення частинки металу (інокулятора) в одновимірній постановці задачі Фізична постановка задачі**

Розглянемо процес плавлення твердого інокулятора, що має температуру плавлення t_L^T , повністю зануреного в розплав металу із заданою температурою t_p . У реальних умовах початкова температура інокулятора t_0 завжди менше температури затвердіння металу t_S^p і тому, спочатку на його поверхні утворюється оболонка твердого металу. Подальший хід розплавлення залежить від співвідношення між значеннями температур t_L^T , t_S^p , t_p [1].

У I період (рис. 1) при зануренні інокулятора в розплав на його поверхні намерзає оболонка твердого металу. Тепло, яке надходить від розплаву шляхом конвекції і затвердіння металу на поверхні, витрачається на прогрівання інокулятора і плавлення оболонки розплаву. Закінчення періоду визначається моментом повного розплавлення оболонки.

У II період твердий інокулятор прогрівається до температури плавлення t_L^T та безпосередньо контактує з рідким розплавом.

У III періоді інокулятор починає плавитись, а рідка фаза тіла розчиняється в розплаві.

**Твердіння і плавлення оболонки металевого розплаву на поверхні частинки (інокулятора)
Математична модель**

На поверхні інокулятора відбувається намерзання оболонки твердого металу з подальшим розплавленням цієї оболонки. Даний період плавлення (розрахункова область показана на рис. 2) описується системою рівнянь теплопровідності для двошарового тіла, яка включає рівняння для матеріалу тіла ($0 \leq r < R_i$) та для оболонки розплаву ($R_i \leq r < Z_m$) при $\tau > \tau_1 + \tau_2$:

$$\begin{cases} c_i(t)\rho_i(t)\frac{\partial t_i(r,\tau)}{\partial \tau} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[r\lambda_i(t)\frac{\partial t_i(r,\tau)}{\partial r} \right], 0 \leq r < R_i \\ c_m(t)\rho_m(t)\frac{\partial t_m(r,\tau)}{\partial \tau} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[r\lambda_m(t)\frac{\partial t_m(r,\tau)}{\partial r} \right], R_i \leq r < Z_m \end{cases} \quad (1)$$

Граничні умови при $\tau > \tau_1 + \tau_2$:

на вісі симетрії тіла ($r = 0$) задана умова симетрії [1]:

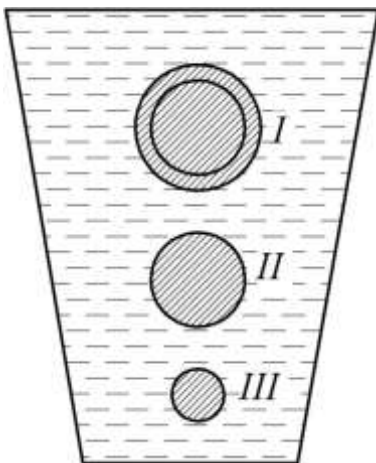
$$\frac{\partial t_i(0,\tau)}{\partial r} = 0, \quad (2)$$

на межі розділу матеріалу інокулятора і оболонки розплаву ($r = R_i$) задані граничні умови IV роду:

$$\begin{aligned} \lambda_i(t)\frac{\partial t_i(R_i,\tau)}{\partial r} &= \lambda_m(t)\frac{\partial t_m(R_m,\tau)}{\partial r}, \\ t_i(R_i,\tau) &= t_m(R_i,\tau), \end{aligned} \quad (3)$$

умова теплообміну на межі намерзла оболонка розплаву - розплав ($r = Z_m$):

$$\begin{aligned} -\rho_m(t)Q_m \frac{dZ_m(\tau)}{d\tau} &= \alpha_m(t)(t_p(\tau) - t_V) - \lambda_m(t)\frac{\partial t_m(Z_m(\tau),\tau)}{\partial r}, \\ t(z(\tau),\tau) &= t_L^T, 0 \leq z(\tau) \leq z_0, \tau > \tau_2, Z_m(\tau) > R_i, \tau > \tau_1 + \tau_2 \end{aligned} \quad (4)$$



I – намерзання і повне розплавлення затверділої оболонки розплаву; II – нагрівання поверхні інокулятора до температури плавлення; III – процес плавлення інокулятора

Рисунок 1 – Періоди плавлення інокулятора в розплаві металу

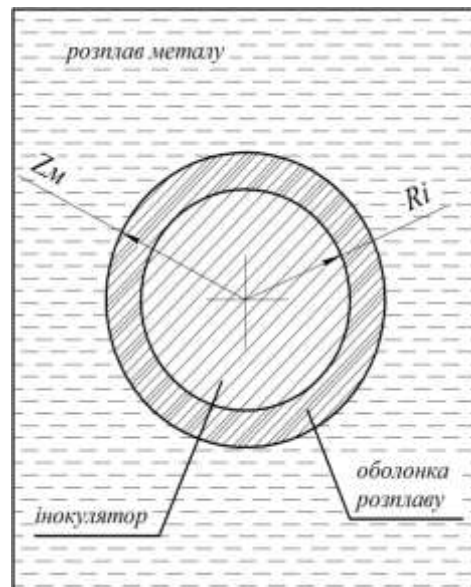


Рисунок 2 – Розрахункова область на період утворення оболонки розплаву на поверхні інокулятора

Початкові умови:

$$\begin{cases} t_i(r, \tau_1) = \varphi_i(r, \tau_1), 0 \leq r < R_i \\ Z_M(\tau_1 + \tau_2) = R_i \end{cases} \quad (5)$$

де $\varphi_i(r, \tau_1 + \tau_2)$, є рішенням задачі теплопровідності для матеріалу інокулятора, при $\tau = \tau_1 + \tau_2$.

Період III закінчується, коли повністю розплавиться оболонка розплаву, намерзла на поверхні тіла.

$$\frac{t_i^{n+1} - t_i^n}{\Delta\tau} = \frac{2}{\Delta r^2 \rho_i^n c_i^n} \left[\frac{t_{i-1}^n - t_i^n}{\frac{1}{\lambda_{i-1}^n} + \frac{1}{\lambda_i^n}} - \frac{t_i^n - t_{i+1}^n}{\frac{1}{\lambda_i^n} + \frac{1}{\lambda_{i+1}^n}} + \frac{2}{i} \frac{t_{i+1}^n - t_{i-1}^n}{\frac{1}{\lambda_{i+1}^n} + \frac{1}{\lambda_{i-1}^n}} \right], \quad (6)$$

де теплофізичні параметри $\lambda_i^n, \rho_i^n, c_i^n$ визначаються на попередньому часовому шарі "n".

Гранична умова (2) за допомогою різницевої апроксимації з другим порядком точності представляється у вигляді:

$$\frac{t_0^{n+1} - t_0^n}{\Delta\tau} = \frac{2(t_1^n - t_0^n)}{\Delta r^2 \rho_0^n c_0^n} \frac{\lambda_0^n \lambda_1^n}{\lambda_0^n + \lambda_1^n}, \quad (7)$$

Облік руху зовнішньої межі намерзання і подальшого плавлення металевого розплаву здійснюється за допомогою розрахунку рівняння (8). Розрахунок за заданим алгоритмом вважається закінченим, коли в процесі плавлення оболонки розплаву значення M стане рівним M_0

$$t_{над}^{n+j} = t_V + \frac{\Delta\tau}{\rho_M^n c_M^n \Delta r} \left[\alpha(t_p^n - t_V) + \frac{\lambda_M^n}{\Delta r} (t_{M-1}^n - t_V) \right], \quad (8)$$

де t_V – температура нульової рідкотекучості металу, α – коефіцієнт тепловіддачі від розплаву до поверхні інокулятора.

Далі визначається значення $\bar{S} = t_V - t_{над}^{n+j}$. При $\bar{S} > 0$ відбувається намерзання металевого розплаву і через k_1 кроків за часом при виконанні умови

$$\sum_{j=1}^{k_1} (t_V - t_{над}^{n+j}) \geq Q/c_M^{n+1} \quad (9)$$

намерзає шар товщиною Δr . При цьому кількість шарів M збільшиться на 1.

При $\bar{S} < 0$ відбувається процес плавлення оболонки і після закінчення k_2 кроків за часом і при виконанні умови

$$\sum_{j=1}^{k_2} (t_{над}^{n+j} - t_V) \geq \frac{Q}{c_M^{n+1}} \quad (10)$$

розплавляється шар товщиною Δr , тобто M зменшується на 1.

Плавлення частинки металу Математична модель

Процес плавлення матеріалу інокулятора починається після прогрівання його поверхні до температури плавлення. Таким чином, вирішується задача

Тривалість третього періоду - τ_3 .

Алгоритм розрахунку

Теплофізичні параметри $\lambda_i^n, \rho_i^n, c_i^n$ для даної задачі містять матеріал інокулятора і намерзлу оболонку розплаву. Значення температур у внутрішніх точках розрахункової області ($1 \leq i \leq M-1$) визначають з рівняння (6) та (7) з різницевого аналога системи рівнянь (1.1):

теплопровідності для тіла з граничними умовами III роду на зовнішній межі ($r = Z_i$) для розрахункової області, зображеної на рис. 3.

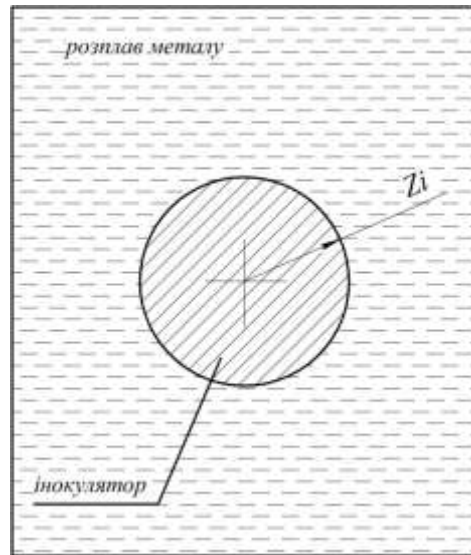


Рисунок 3 – Розрахункова область на період плавлення інокулятора

Прогрівання поверхні тіла описується рівнянням теплопровідності для матеріалу інокулятора при $\tau > \tau_1 + \tau_2 + \tau_2$:

$$c_i(t) \rho_i(t) \frac{\partial t_i(r, \tau)}{\partial \tau} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[r \lambda_i(t) \frac{\partial t_i(r, \tau)}{\partial r} \right], \quad (11)$$

$$0 \leq r < Z_i$$

Граничні умови при $\tau > \tau_1 + \tau_2 + \tau_2$: на вісі симетрії інокулятора ($r = 0$) задано умову симетрії

$$\frac{\partial t_i(0, \tau)}{\partial r} = 0, \quad (12)$$

умова теплообміну на межі поверхня інокулятора – розплав ($r = Z_k$):

$$\lambda_i(t) \frac{\partial t_i(Z_i, \tau)}{\partial r} = \alpha_m [t_p(\tau) - t_i(Z_i, \tau)] \quad (13)$$

Початкові умови:

$$\begin{cases} t_i(r, \tau_1 + \tau_2 + \tau_3) = \varphi_i(r, \tau_1 + \tau_2 + \tau_3), 0 \leq r < Z_i \\ Z_i(\tau_1 + \tau_2 + \tau_3) = R_i \end{cases}, \quad (14)$$

де $\varphi_i(r, \tau_1 + \tau_2 + \tau_3)$ є рішенням задачі теплопровідності для матеріалу інокулятора, описаної в періоді III, при $\tau = \tau_1 + \tau_2 + \tau_3$. Тривалість періоду прогрівання поверхні тіла до температури плавлення - τ_4^n .

Після прогрівання поверхні тіла починається процес його плавлення, який описується рівнянням теплопровідності для матеріалу злитка (11) при $\tau > \tau_1 + \tau_2 + \tau_3 + \tau_4^n$.

Умова теплообміну на межі поверхня тіла - розплав ($r = Z_i$):

$$\begin{aligned} -\rho_i(t) Q_i \frac{dZ_i(\tau)}{d\tau} &= \alpha_m (t_p(\tau) - t_L^i) - \lambda_i(t) \frac{\partial t_i(Z_i(\tau), \tau)}{\partial r}, \\ t_i(Z_i(\tau), \tau) &= t_L^i, 0 \leq Z_i < R_i, \tau > \tau_1 + \tau_2 + \tau_3 + \tau_4^n. \end{aligned} \quad (15)$$

Початкові умови:

$$\begin{aligned} t_i(r, \tau_1 + \tau_2 + \tau_3 + \tau_4^n) &= \varphi_i(r, \tau_1 + \tau_2 + \tau_3 + \tau_4^n), \\ 0 \leq r < Z_i, \end{aligned} \quad (16)$$

де $\varphi_i(r, \tau_1 + \tau_2 + \tau_3 + \tau_4^n)$, є рішенням задачі теплопровідності для матеріалу інокулятора, описаної в

періоді прогрівання поверхні матеріалу інокулятора до температури плавлення при $\tau = \tau_1 + \tau_2 + \tau_3 + \tau_4^n$. Тривалість періоду плавлення матеріалу тіла - τ_4^n .

Період 4-й вважається закінченим за умови повного розплавлення матеріалу інокулятора. Тривалість четвертого періоду - $\tau_4 = \tau_4^n + \tau_4^{nn}$.

Алгоритм розрахунку

Значення температур t_i^n у внутрішніх точках розрахункової області ($0 \leq i \leq M_0 - 1$) визначаємо з (6) та (7). Температуру в граничній точці M_0 розраховуємо з різницевого аналога граничної умови (13):

$$\begin{aligned} \rho_{M_0}^n c_{M_0}^n \frac{t_{M_0}^{n+1} - t_{M_0}^n}{\Delta \tau} &= \alpha (t_p^n - t_{M_0}^n) - \\ &- \frac{t_{M_0}^n - t_{M_0-1}^n}{\frac{\Delta r}{2\lambda_{M_0}^n} + \frac{\Delta r}{2\lambda_{M_0-1}^n}}, \end{aligned} \quad (17)$$

Коли значення $t_{M_0}^{n+1}$ стане рівним температурі плавлення інокулятора t_L^T починається розрахунок плавлення твердої фази тіла.

Значення температур t_i^n в точках $0 < i < M$ визначається з рівняння (6) та (7). Облік руху зовнішньої межі плавлення здійснюється з рівняння:

$$t_{над}^{n+j} = t_L^T + \frac{\Delta \tau}{\rho_M^n c_M^n \Delta r} \left[\alpha (t_p^n - t_L^T) + \frac{\lambda_M^n}{\Delta r} (t_{M-1}^n - t_L^T) \right], \quad (18)$$

Шар товщиною Δr вважається розплавленим, коли після закінчення k_3 кроків за часом та $\bar{S} < 0$ виконується умова:

$$\sum_{j=1}^{k_3} (t_{над}^{n+j} - t_L^T) \geq \frac{Q_T}{c_M^{n+j}}. \quad (19)$$

Розрахунок повного розплавлення тіла закінчений, коли $M = 1$.

Розрахункова модель була виконана із застосуванням мови програмування BASIC, отримані розрахунки дозволили визначити вплив інокуляторів на

ступінь аморфізації структури. Результати розрахунку у вигляді графіків приведені на рис. 4-5.

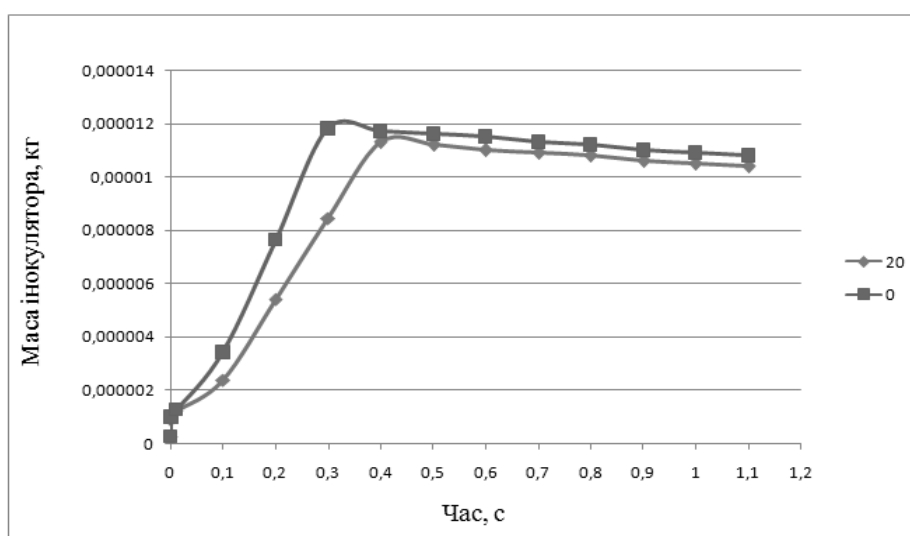
В якості модельних сплавів були обрані сплави, які мають гарну схильність до аморфізації, внаслідок вмісту в них елементів що легко аморфізуються, таких як Zr, B, P, Si, що є відомими аморфізаторами, а так само деякі сплави групи Fe і Co з додаванням аморфізуючих речовин, групи металоїдів, таких як B, P, Si, C [2-3]. В табл.1 наведені теплофізичні властивості досліджуваних сплавів. В табл. 2 наведені параметри для розрахунку теплової задачі плавлення інокулятора в розплаві металу.

Таблиця 1 – Теплофізичні властивості досліджуваних сплавів

Сплав	Температура плавлення, °С	Температура переходу в аморфний стан, К	Густина сплаву, кг/м ³	Теплоємність сплаву, Дж/(кг·К)	Коефіцієнт теплопровідності, Вт/(м·К)
Cu ₄₅ Ti ₃₅ Zr ₂₀	1090	410	6900	513,9	175
Ni _{62,4} Nb _{37,6}	1169	672	7850	609	69
Fe ₈₀ P ₁₃ C ₇	985	463	6690	720	38,5
Co ₇₅ Si ₁₅ B ₁₀	1120	512	7290	850	40

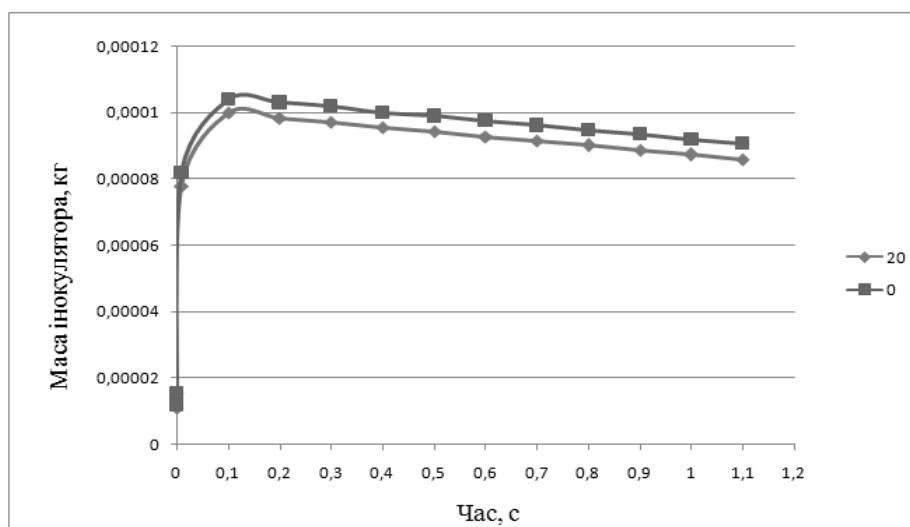
Таблиця 2 – Параметри для розрахунку теплової задачі плавлення інокулятора в розплаві металу зі сплаву $\text{Cu}_{45}\text{Ti}_{35}\text{Zr}_{20}$

Назва параметра	Значення параметра
Густина металу інокулятора	$\rho=7450 \text{ кг/м}^3$
Питома теплоємність металу інокулятора	$C_p=385 \text{ Дж/(кг}\cdot\text{K)}$
Коефіцієнт теплопровідності інокулятора	$k=340 \text{ Вт/(м}\cdot\text{K)}$
Розмір інокулятора	1 мм
Початкова температура інокулятора	0-20 °C
Густина розплаву металу	$\rho = 6900 \text{ кг/м}^3$
Питома теплоємність розплаву	$C_p=513,9 \text{ Дж/(кг}\cdot\text{K)}$
Коефіцієнт теплопровідності розплаву	$k=175 \text{ Вт/(м}\cdot\text{K)}$
Розрахунковий розмір зони розплаву	2 мм
Початкова температура розплаву	1090 °C
Інтервал часу	0.00001 с
Температура фазового переходу	1090 °C
Теплота фазового переходу	267 500 Дж/кг



0 – 20 – початкова температура інокулятора відповідно 0°C та 20°C

Рисунок 4 – Графік зміни маси інокулятора зі сплаву $\text{Cu}_{45}\text{Ti}_{35}\text{Zr}_{20}$ в процесі плавлення в рідкому розплаві при початковому діаметрі інокулятора 1 мм



0 – 20 – початкова температура інокулятора відповідно 0°C та 20°C

Рисунок 5 – Графік зміни маси інокулятора зі сплаву $\text{Cu}_{45}\text{Ti}_{35}\text{Zr}_{20}$ в процесі плавлення в рідкому розплаві при початковому діаметрі інокулятора 2 мм

Аналогічні розрахунки проводили для інших досліджуваних сплавів.

ВИСНОВКИ

1. Додавання інокуляторів призводить до реалізації внутрішнього тепловідведення та утворення в розплаві додаткових активних центрів кристалізації.

2. Вплив інокуляторів проявляється у збільшенні швидкості та розвитку переважно об'ємного затвердіння. Дана технологія відрізняється в основному реалізацією внутрішнього тепловідведення за допомогою локальних теплостоків.

3. Розплав металу з введеними охолодженими частками (інокуляторами) характеризується переохолодженим станом по всьому об'єму злитка, що твердіє. Інокулятори не тільки знімають перегрів, а й переохолоджують розплав.

4. У момент контакту твердої частинки інокулятора з рідким металом в розплаві створюється лока-

льне термічне переохолодження навіть у разі значних перегрівів всього обсягу розплаву.

ЛІТЕРАТУРА

1. Pavlenko, A.M., Usenko, B.O., Koshlak, H.V. 2014. Analysis of thermal peculiarities of alloying with special properties, *Metallurgical and Mining Industry*, 2, 15-20.

2. Pavlenko, A.M., Usenko, B.O., Koshlak, H.V. 2015. Mathematical modeling of the casting process in Comsol 3.5a package, *Metallurgical and Mining Industry*, 1, 132-140.

3. Anatoliy Pavlenko, Bohdan Usenko, 2015. Investigation thermophysical processes obtaining of massive amorphous structure, The special aspects energy and resource saving, Oradea University Press, 235-274.

Отримана в редакції 10.09.2015, прийнята до друку 18.12.2015

A. Pavlenko ✉, B. Usenko, H. Koshlak

Poltava National Technical Yuri Kondratyuk University, 36011, Poltava, Pershotravnevyyi avenue, 24, Ukraine

✉ am.pavlenko@i.ua, Scopus ID: 12801813400

THE AMORPHOUS STRUCTURE OBTAINING METHOD

The article presents the results of research of energy-resource-saving technologies of massive amorphous structures formation. This technology differs mainly the realization internal heat removal by means of local heat sink (inoculator). The peculiarities of processes of heat and mass transfer during the formation of in the melt additional active cooling centers, local heat sink to generate internal heat removal. A mathematical model of melting inoculator in melts for optimizing the process of obtaining massive amorphous structures, which allows to reduce time of experimental research and material resources to create massive amorphous structures. Mathematical modeling of processes heat and mass transfer inoculator in melts allows you to identify peculiarities of the technological process, and establish influence inoculator on the degree of amorphization melt. The results of physical experiments are compared with the results of the calculation. The results can be used to analyze the physical regularities and informed choice of technological modes of formation of massive amorphous structures in different metals and alloys. The melt metal with the cooled particles (inoculator) is characterized by supercooling condition throughout the volume of the solid ingot. Inoculators not only remove overheating and supercooling melt.

The results provide an effective assessment of the intensity of heat transfer during the casting process, which makes it possible to estimate and predict the ability of alloys to the amorphization of the structure.

Keywords: heat and mass transfer – amorphous structure – inoculator – thermal conductivity – mathematical model – cooling – melting.

REFERENCES

1. Pavlenko, A.M., Usenko, B.O., Koshlak, H.V. 2014. Analysis of thermal peculiarities of alloying with special properties, *Metallurgical and Mining Industry*, 2, 15-20.

2. Pavlenko, A.M., Usenko, B.O., Koshlak, H.V. 2015. Mathematical modeling of the casting process in Comsol 3.5a package, *Metallurgical and Mining Industry*, 1, 132-140.

3. Anatoliy Pavlenko, Bohdan Usenko, 2015. Investigation thermophysical processes obtaining of massive amorphous structure, The special aspects energy and resource saving, Oradea University Press, 235-274.

Received 10 September 2015

Approved 18 December 2015

Available in Internet 28.02.2016