

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА РАСПАДА МИКРОГРУППИРОВОК В МЕТАЛЛИЧЕСКИХ РАСПЛАВАХ

В.Б. Деев, И.Ф. Селянин, А.В. Феоктистов, А.Л. Блумбах

В настоящее время известно, что строение металлических расплавов обусловлено их строением в твердом состоянии. Расплав системы Al-Si представляет собой жидкость со среднестатистическим распределением атомов компонентов, в которой присутствуют области, обогащенные кремнием. Эти области состоят из кластеров кремния и частиц типа Al_nSi_m . Размеры кластеров, унаследованных от шихтовых материалов, определяют степень микронеоднородности жидкости. При перегреве расплавов размер микронеоднородных областей уменьшается, причем при достижении некоторой критической температуры в сочетании с определенным временным интервалом выдержки происходит полное вырождение микронеоднородности. Расплав переходит в более однородное состояние, что отражается на аномальном изменении физических свойств расплавов при критических температурах.

Время, в течение которого происходит распад обогащенных кремнием микрогруппировок кластеров, необходимо знать для интенсификации параметров термовременной обработки расплавов. Оно будет зависеть при прочих равных технологических факторах от размера кластеров кремния и частиц Al_nSi_m , а также от концентрации кремния в расплаве. Применение нагрева с учетом размеров микронеоднородностей позволит оптимизировать режимы ТВО расплавов и устранить нежелательную наследственность шихтовых материалов, которая может значительно снизить свойства литых сплавов.

Начальные условия задачи: кластер типа Al_nSi_m находится в печи при критической температуре (при оптимальной температуре ТВО). Распад кластера начинается при достижении температуры, близкой к температуре начала гистерезиса вязкости. Требуется найти время распада кластера при данной температуре. В первом приближении решения поставленной задачи представим кластер в виде сферы с радиусом R . Тогда решение задачи упростится до расчета изменения концентрации кремния в радиусе сферы. В сферической системе координат уравнение диффузии кремния в расплаве алюминия при высокотемпературном нагреве имеет вид

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \left(\frac{\partial^2 C}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \cdot \frac{\partial C}{\partial r} \right) \quad (1)$$

где C – концентрация кремния в частице Al_nSi_m , масс. %; t – время, с; D – коэффициент диффузии кремния; m^2 / c ; r – текущее значение радиуса частицы, нм.

Краевые условия задачи имеют следующий вид:

- 1) $C = C_{\text{пов}}$ при $r = R$, $t = 0$;
- 2) $\frac{\partial C}{\partial r} = 0$ при $r = 0$, $0 < t < \infty$;
- 3) $D \cdot \frac{\partial C}{\partial r} \Big|_{r=r_i} = -\beta \cdot (C_{\text{пов } K} - C_{\text{гом}})$.

где $C_{\text{пов } K}$ – концентрация кремния на поверхности частицы в момент времени $t = t_k$ (в расчетах принимали начальное $C_{\text{пов}}$ равным 50 % масс. Si); k – переменная по времени; $C_{\text{гом}}$ – концентрация кремния в гомогенной ньютоновской жидкости (концентрация, при достижении которой можно считать, что частица полностью “распалась” при высокотемпературной обработке), масс. %; r_i – радиус шара частицы, нм; β – коэффициент массоотдачи.

Эта задача является задачей с подвижными границами и может быть решена только численно. За основу численного моделирования был взят метод контрольного объема по неявной схеме. По предлагаемому алгоритму была написана программа на языке Pascal, проведены вычисления на ЭВМ. Масштабы микронеоднородностей (размеры кластеров и других дисперсных частиц) в системе Al-Si изменяются в очень широком диапазоне – от 1 до 300 нм. Поэтому при расчете по модели варьировали значения радиуса кластера от 1 до 150 нм. А начальное содержание кремния в кластере Al_nSi_m принимали равным 50 %. Результаты расчета времени распада кластера Al_nSi_m в зависимости от его радиуса и концентрации кремния в расплаве для доэвтектических и эвтектических силуминов представлены в таблице 1.

Таблица 1

Содержа- ние кремния в расплаве, масс. %	Время распада кластера (мин.) при высокотемпературном нагреве в зави- симости от радиуса кластера (нм)						
	Радиус кластера R, нм						
	1	5	10	25	50	100	150
7	12,8	14,4	16,7	21,6	28,5	38,8	45,4
8	11,3	12,2	15,2	19,2	27,5	36,2	43,2
9	9,2	11,1	14,2	18,1	24,2	31,3	40,2
11	8,6	10,8	13,6	17,1	23,8	29,1	36,5
12	7,1	9,7	12,5	15,1	20,5	28,2	33,6
13	6,2	8,3	11,5	12,3	19,3	26,1	32,2

Выводы: Для исследования процесса распада кластера в расплаве силумина при высокотемпературной обработке применен численный метод контрольного объема решения дифференциальных уравнений. Численное моделирование на основе уравнения диффузии показало, что время распада кластера определяется его размерами и химсо-

ставом расплава. Расчетные данные показали хорошую сопоставимость с экспериментальными.

Предложенное математическое описание процесса распада кластера позволяет прогнозировать поведение расплавов силуминов при ТВО, необходимой для управления наследственностью и стабилизации структуры и свойств силуминов.