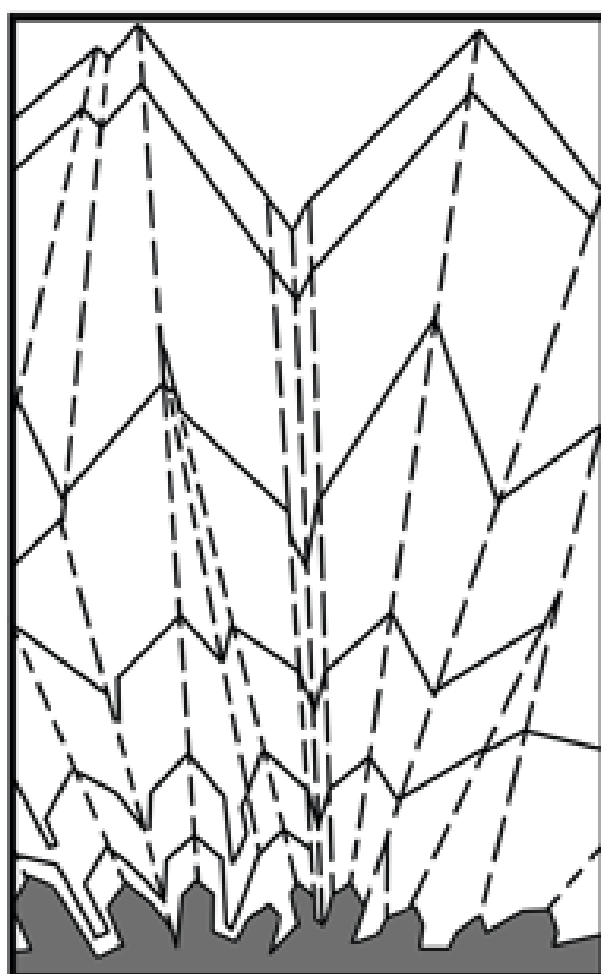




# Кристаллизация

компьютерные модели,  
эксперимент, технологии



Тезисы Всероссийской конференции  
с международным участием  
г. Ижевск, 6–9 апреля 2016 г.

Министерство образования и науки РФ  
Российская академия наук  
ФГБОУ ВПО «Удмуртский государственный университет»  
Физико-технический институт УрО РАН  
ЗАО Научно-производственное объединение «МКМ»

# КРИСТАЛЛИЗАЦИЯ: КОМПЬЮТЕРНЫЕ МОДЕЛИ, ЭКСПЕРИМЕНТ, ТЕХНОЛОГИИ

Тезисы  
VII Всероссийской конференции с международным участием  
6–9 апреля 2016 года



Ижевск  
2016

УДК 669.017.3:681.3.06 (043.3)  
ББК 34.3

Редакционная коллегия:

П. К. Галенко  
Е. В. Харанжевский  
М. Д. Кривилев  
В. Е. Анкудинов

К26 Кристаллизация: компьютерные модели, эксперимент, технологии: Тезисы VII Всероссийской конференции с международным участием. — Ижевск: Издательский центр «Удмуртский университет», 2016. — 150 с.

**ISBN 978-5-4312-0418-0**

Настоящий сборник содержит тезисы докладов участников VII всероссийской конференции с международным участием «Кристаллизация: компьютерные модели, эксперимент, технологии» (КРИС-2016, 6–9 апреля 2016 года, Ижевск), посвященной актуальным проблемам теории, эксперимента и разработки компьютерных технологий процессов макро- и микроскопической кристаллизации.

Рассмотрены процессы структурообразования в сплавах, процессы высокоскоростной кристаллизации, современные проблемы в областях атомистической динамики, аморфных систем, старения сплавов и процессов в твердой кристаллической фазе, также связанные с аддитивными технологиями.

**ISBN 978-5-4312-0418-0**

УДК 669.017.3:681.3.06 (043.3)  
ББК 34.3

© Коллектив авторов, 2016  
© ФГБОУ ВПО «Удмуртский  
государственный университет», 2016

### **От редакции**

Настоящий сборник содержит тезисы докладов участников конференции, посвящённой светлой памяти выдающегося учёного, доктора физико-математических наук, профессора, лауреата Государственной премии СССР Виталия Анатольевича Журавлёва.

В. А. Журавлёв обладал множеством личных достоинств, послуживших на благо науке и образованию. Совершенный им научный прорыв, выразившийся в создании теории двухфазной зоны, помог существенно развить и продвинуть на новый уровень теорию кристаллизации сплавов. Современное состояние этой области науки, а также её применение на производстве составляют основную часть научных докладов настоящей конференции.

Совместно с теорией, моделированием и практикой кристаллизации сплавов из жидкости научная тематика конференции включает также доклады и сообщения по современным научным проблемам в областях атомистической динамики, аморфных систем, старения сплавов и процессов в твёрдой кристаллической фазе, а также новое направление, связанное с аддитивными технологиями. Завершает конференцию круглый стол, где участники конференции вспоминают с благодарностью плодотворные научные дискуссии по этой проблематике с участием В. А. Журавлёва.

Мы считаем своим долгом выразить искреннюю благодарность авторам, активно принимавшим участие в подготовке материалов для этого сборника, посвященного памяти В. А. Журавлёва.

**Виталий Анатольевич Журавлев:  
ПРЕПОДАВАТЕЛЬ, УЧЕНЫЙ, РЕКТОР**



Виталий Анатольевич Журавлев родился 1 февраля 1941 г. в Ленинграде в семье военнослужащего. Отец — Журавлев Анатолий Осипович, полковник СА, участник Финской и Отечественной войн, мать — Журавлева Валентина Ивановна, домохозяйка.

После окончания с отличием средней школы В.А.Журавлев учился в Ленинградском Политехническом институте (1959–1965 гг.) по специальности «физико-химические исследования металлов». По окончании института был направлен по распределению на завод «Красное Сормово» (Горький), где работал инженером-технологом в Центральном конструкторском бюро магнитной металлодинамики (1965–1969 гг.). В 1968–1976 гг. работал в Горьковском университете в должности ассистента, старшего преподавателя, доцента.

В 1969 г. в Горьковском госуниверситете защитил кандидатскую диссертацию на тему «Теплофизика формирования непрерывного слитка», в 1981 г. — докторскую диссертацию на тему «Феноменологическая теория кристаллизации сплавов» по специальности «физика твердого тела» в Институте физики металлов УрО АН СССР. С 1976 г. и до последних дней работал в Удмуртском государственном университете заведующим кафедрой теоретической физики (1976–1985 гг.), деканом физико-математического факультета (1985–1986 гг.) и ректором (с сентября 1986 г. по 2007г.).

Основная деятельность Виталия Анатольевича в должности ректора пришлась на годы перестройки. В условиях стагнации и медленного разрушения государственного высшего образования в России им была разработана и

успешно внедрена новая концепция развития классического университета России, позволившая не только сохранить Удмуртский университет, но сделать из него принципиально новое образовательное учреждение — университет XXI века (университет будущего). В основе этой концепции лежит ряд положений: интеграция науки и образования — обучение через исследование, сочетание естественнонаучных, гуманитарных, инженерных специальностей, создание новой системы многоканального финансирования университета на основе вексельных форм привлечения финансовых средств и развития филиальной схемы расширения территориального влияния университета, создание системы телекоммуникаций и университетских компьютерных сетей.

Последовательное внедрение В.А.Журавлевым этой концепции в жизнь привело к созданию качественно нового вуза в рамках Удмуртского университета. В годы его руководства Удмуртский университет имел в своем составе 22 факультета, 5 учебных и 6 научных институтов, ряд колледжей в структурах факультетов, 4 филиала (в Кудымкаре, Губкинском, Нижней Туре, Воткинске), 3 представительства, 130 кафедр, 19 учебно-деловых центров. По всем формам обучения сейчас в УдГУ обучались до 21400 студентов по 65 специальностям и 4 направлениям высшего профессионального образования. За годы ректорства В.А.Журавлева были открыты и по-прежнему успешно функционируют новые институты и факультеты: социальных коммуникаций, искусств, философско-социологический, биотехнологии, профессионального иностранного языка, нефтяной, социальной работы, психологии и педагогики, журналистики, географический и др., создана динамичная, постоянно совершенствующаяся система управления университетом.

На многих факультетах развиваются различные уровни образования – среднее специальное, высшее, магистратура, бакалавриат, послевузовское, очная, вечерняя и заочная формы, экстернат. В 1996 г. в УдГУ — одном из немногих вузов России — создан Интернет-центр с развитой локальной компьютерной сетью УдГУ, имеющей в настоящее время более 1300 компьютеров, с космическими и наземными каналами связи, который реализует доступ студентов в международную систему Internet, к новым образовательным технологиям. В настоящее время УдГУ является региональным центром по развитию компьютерной образовательной сети Удмуртской Республики с сегментом обслуживания удаленных сельских школ. По инициативе В. А. Журавлева создан Институт дистанционного образования, позволяющий реализовать через компьютерную сеть обучение на расстоянии (в настоящее время такую возможность имеют более 1000 студентов). Усилиями В. А. Журавлева в УдГУ открыты аспирантура по 27 и докторантура по 9 специальностям, где обучались более 500 человек, и 11 кандидатских, 3 докторских диссертационных совета по различным отраслям народного хозяйства, в которых за последние годы защищено более 200 диссертаций на

**Всероссийская конференция с международным участием**

соискание ученой степени докторов и кандидатов наук. Систематическая работа В.А.Журавлева по улучшению качества преподавательского состава привела к его существенному изменению: если в 1986 г. в УдГУ было 13 докторов и 182 кандидата наук, то сейчас докторов наук — более 100, а кандидатов — более 400.

В.А.Журавлевым разработана и впервые в России внедрена вексельная система финансирования высшего образования, которая была освоена рядом государственных вузов России, что позволило им выстоять в условиях финансового кризиса.

Под руководством В.А.Журавлева университет стал центром фундаментальных и прикладных исследований в различных областях естественных и гуманитарных наук. В 1989 г. в университете создано управление международных связей, которое координирует всю деятельность УдГУ по интеграции в международное образовательное пространство. Виталий Анатольевич лично курировал многие долговременные международные проекты — Темпус, Интас, Коперникус и др., в процессе которых университет сотрудничает с многими университетами Франции, Испании, Канады, Италии, Венгрии, США, Финляндии, Великобритании, Германии, Южной Кореи, Китая и других стран. Ежегодно за рубеж выезжают около 200 преподавателей и студентов УдГУ. С 1992 г. в УдГУ ведется обучение русскому языку иностранных студентов из Испании, Германии, Южной Кореи, США, Франции, Финляндии и других стран.

За эти годы в УдГУ укреплялась материальная база: построены студенческая столовая, дворец спорта, 6-этажный корпус факультета искусств, жилой дом для преподавателей, проведена реконструкция спортивного лагеря «Воложка», учебного корпуса №3, построены жилые здания в Ботаническом саду, гео- и биостанции, велась подготовка к строительству нового здания современной библиотеки, которое было закончено уже после смерти Виталия Анатольевича.

Журавлевым созданы и функционируют два книжных издательства — Издательский дом «Удмуртский университет», выпускающий в год до 200 наименований учебной и научной литературы и специализированный издательский центр «Регулярная и хаотическая динамика». Продукция книжных издательств Удмуртского госуниверситета пользуется спросом не только в России, но и за рубежом.

Разработанная В.А.Журавлевым феноменологическая теория кристаллизации сплавов нашла широкое практическое применение для создания автоматизированных систем управления металлургическими технологиями в ряде производственных объединений: «Ижора» (С.-Петербург), «Ижсталь»

**Всероссийская конференция с международным участием**

(Ижевск), «Буммаш» (Ижевск), завод «Красное Сормово» (Н.Новгород). За разработку теории квазиравновесной кристаллизации сплавов в 1991 г. ему присуждена Государственная премия СССР.

В.А.Журавлев награжден Почетной грамотой Президиума Верховного Совета СССР (1981 г.). Он член экспертного совета ВАКа России, заслуженный деятель науки Удмуртской Республики (1995 г.), академик Международной академии высшей школы (1994 г.) и Российской Академии естественных наук (1996 г.). В 2000 г. В.А.Журавлев награжден нагрудным знаком «Почетный работник высшего профессионального образования Российской Федерации».



**КРИСТАЛЛИЗАЦИОННАЯ СИНЕРГЕТИКА**В.А.Журавлев*Удмуртский государственный университет, г.Ижевск  
e-mail: rector@uni.udm.ru тел.(3412) 751610, факс (3412) 754649*

К одной из фундаментальных проблем кристаллизации сплавов следует отнести изучение возникновения и развития наблюдаемого многообразия первичных макроскопических структур роста ячеистых, дендритных и зеренных образований. Это удивительное многообразие оказалось следствием различной неравновесности условий кристаллизации сплавов и восходит в своем понимании к классу синергетических задач кристаллизационной синергетике [1].

В этой области накоплен огромный экспериментальный материал, связанный с исследованием морфологии дендритных и зеренных структур роста в сплавах. Однако нацеленная систематизация материала и необходимая физическая схематизация явления первичного структурообразования в сплавах, использующая только макроскопические понятия и допускающая его чисто феноменологическое описание методами термодинамики необратимых процессов, лишь только зарождается. Широкие возможности в развитии этого направления связаны с реализацией компьютерного моделирования на имитационных феноменологических моделях возникновения и роста дендритных и зеренных структур.

Можно наблюдать закономерности возникновения вторичных ветвей дендритов как следствие неустойчивости околовышней и боковой поверхности первичной ветви отдельно растущего дендрита или в пакете дендритов, наблюдать конкурентную эволюцию вторичных ветвей в форме строгого удвоения или хаотического изменения периода их пространственного расположения в ходе разрастания дендрита, изучать кинетику роста первичных ветвей дендритов, наблюдать удивительную эволюцию дендритов в глобулу в условиях высоких переохлаждений расплава, изучать формирование малоугловых и большеугловых зеренных границ при срастании дендритных пакетов и многое другое в области образования первичных структур сплавов. Именно эти структуры и определяют макроскопические свойства металлических материалов в изделиях и слитках и понимание их есть путь к управлению ими.

Детальное изложение этих вопросов составляет содержание настоящего доклада, где автор, опираясь, главным образом, на собственное исследование, вводит слушателя в мир компьютерной физики дендритов и дает разностороннюю оценку современных представлений кристаллизационной синергетики.

[1] Журавлев В.А. Затвердевание и кристаллизация сплавов с гетеропереходами. Москва—Ижевск: Институт компьютерных исследований, 2006 (в печати)

## **Секция I**

**Теория двухфазной зоны,  
компьютерное моделирование процессов затвердевания**

**Аналитическое решение задачи об обтекании параболического дендрита наклонным потоком вязкой жидкости в приближении Осена**

Д. В. Александров<sup>1</sup>, П. К. Галенко<sup>2,3</sup>

<sup>1</sup>Уральский федеральный университет, Кафедра математической физики, Лаборатория многомасштабного математического моделирования, 620000 Россия, г. Екатеринбург, просп. Ленина, 51

<sup>2</sup>Фридрих Шиллер Университет, физико-астрономический факультет, Германия, г. Йена

<sup>3</sup>Институт физики материалов в космосе, Германский аэрокосмический центр, Германия, г. Кёльн

Из экспериментов известно, что дендритный рост часто наблюдается в условиях набегающего потока расплава или раствора [1]. Во многих ситуациях такой поток наклонен под некоторым углом к оси роста дендрита, как показано на рисунке 1. Наклонное течение может сильно изменять характеристики роста дендритов по сравнению со случаями дендритного роста без конвекции или когда поток расплава направлен по оси дендритного роста [2,3].

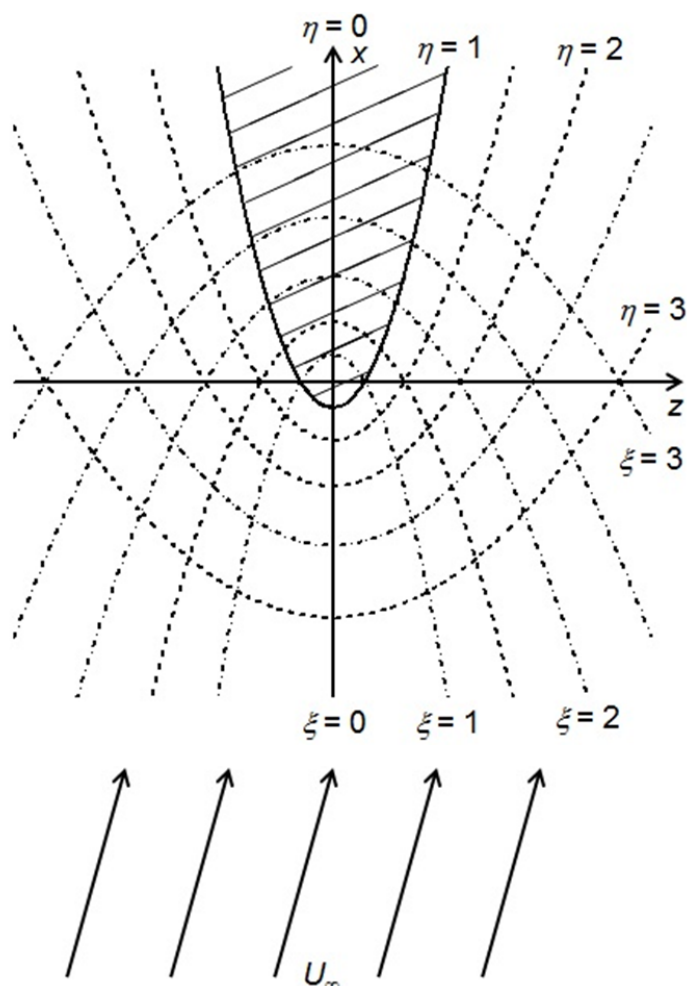


Рисунок 1. Течение со скоростью  $U_\infty$  натекает на иглообразный дендритный кристалл под произвольным углом. Дендрит имеет форму  $\eta=1$  в параболической системе координат.

В настоящей работе построено аналитическое решение задачи об обтекании жидкостью параболического дендрита в гидродинамическом приближении Осеена, когда направление потока жидкости вдали от дендрита имеет некоторый угол с направлением оси дендрита (рис. 1). Определены компоненты скорости жидкости в двухмерном и трехмерном случаях с использованием координат параболического цилиндра и параболоида вращения. В предельном случае нулевого угла между направлением скорости жидкости вдали от дендрита и осью  $x$ , найденное в работе решение переходит в ранее известное решение, полученное в работе [4].

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ № 16-08-00932.

- [1] Gao J., Han M., Kao A., Pericleous K., Alexandrov D.V., Galenko P.K. Dendritic growth velocities in an undercooled melt of pure nickel under static magnetic fields: A test of theory with convection // *Acta Materialia*, 2016. Vol. 103. P. 184-191.
- [2] Bouissou P., Perrin B., Tabeling P. Influence of an external flow on dendritic crystal growth // *Physical Review A*, 1989. Vol. 40. P. 509-512.
- [3] Александров Д.В., Галенко П.К. Дендритный рост с вынужденной конвекцией: методы анализа и экспериментальные тесты // *Успехи физических наук*, 2014. Том 184. Вып. 8. С. 833-850.
- [4] Dash S.K., Gill W. Forced convection heat and momentum transfer to dendritic structures (parabolic cylinders and paraboloids of revolution) // *Int. J. Heat Mass Trans.*, 1984. Vol. 27. P. 1345-1356.

### **Нуклеация и рост новой фазы на промежуточной стадии фазовых переходов в метастабильных растворах и расплавах**

Д. В. Александров<sup>1</sup>, А. П. Малыгин<sup>1</sup>, И. С. Сухачев<sup>1</sup>, И. В. Александрова<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Уральский федеральный университет, Кафедра математической физики, Лаборатория многомасштабного математического моделирования, 620000 Россия, г. Екатеринбург, просп. Ленина, 51

Процесс объемного фазового перехода из переохлажденных расплавов или пересыщенных растворов условно может быть подразделен на четыре основные стадии [1]. Переохлажденное (пересыщенное) состояние устанавливается в течение предварительной стадии. Затем образование зародышей новой фазы протекает на начальной стадии (гомогенным или гетерогенным образом). Далее одновременно протекают нуклеация, рост кристаллов и снятие переохлаждения (пересыщения) на протяжении промежуточной стадии. Заключительная стадия описывает релаксационные процессы остwaldова созревания и агломерации.

Настоящее исследование посвящено изучению промежуточной стадии фазового перехода в метастабильной области, когда одинаково важными являются процессы нуклеации новой фазы и роста уже образовавшихся кристаллитов. Общая теория этой стадии не является завершенной, несмотря на то обстоятельство, что промежуточная стадия часто занимает большую часть времени всего процесса фазового перехода. Это, в частности, вызвано тем обстоятельством, что соответствующая математическая модель процесса является нелинейной и интегро-дифференциальной, а часть пограничных условий ставится на движущихся границах роста [2,3].

В настоящей работе на основе метода седловой точки для вычисления интеграла лапласовского типа (метода перевала) [4] найдено полное аналитическое решение интегро-дифференциальной модели, описывающей промежуточную стадию фазового перехода в однокомпонентных расплавах и растворах без учета флуктуаций в скоростях роста кристаллов (без учета «диффузионного» члена в кинетическом уравнении). В рамках этой модели получено аналитическое решение кинетического уравнения - найдена плотность функции распределения кристаллов по размерам и определена степень метастабильности системы (ее переохлаждение/пересыщение).

В рамках полученного решения показано, что плотность функции распределения и степень метастабильности системы имеют точки перегиба (наблюдаемые экспериментально [5,6]), ответственные за различные стадии процесса фазового перехода. На начальных временах, когда переохлаждение/пересыщение велико, доминирующим процессом является нуклеация зародышей, затем фазовое превращение сопровождается ростом кристаллитов, который становится доминирующим на конечных этапах промежуточной стадии фазового перехода, когда уровень метастабильности системы достаточно мал и нуклеация протекает неинтенсивно.

Найдено точное аналитическое решение интегро-дифференциальной модели, описывающей промежуточную стадию фазового перехода в однокомпонентных расплавах и растворах с учетом флуктуаций в скоростях роста кристаллов (с учетом «диффузионного» члена в кинетическом уравнении). А именно, определена плотность функции распределения кристаллов по размерам и найдено неявное выражение для переохлаждения/пересыщения системы в случае различных кинетик нуклеации. Построенное в работе точное параметрическое решение задачи детализировано для часто встречающихся кинетик нуклеации Вебера-Вольмера-Френкеля-Зельдовича и Майера.

В работе показано, что точное аналитическое решение интегро-дифференциальной модели с учетом «диффузионного» члена в уравнении Фоккера-Планка переходит в полное решение «бездиффузионной» модели при малости «диффузионного» слагаемого в кинетическом уравнении. Найденные аналитические решения, описывающие эволюцию фазового превращения на промежуточной стадии, являются начальными условиями для описания

заклучительной стадии фазового перехода - стадии оствальдова созревания (коалесценции).

Найденные решения применены для описания процесса нуклеации и роста частиц в движущейся области фазового перехода (двухфазной зоне). С учетом подвижной системы отсчета определены функция распределения кристаллитов по размерам, доля твердой фазы и динамика снятия переохлаждения системы.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ № 16-08-00932.

- [1] Alexandrov D.V, Malygin A.P. Transient nucleation kinetics of crystal growth at the intermediate stage of bulk phase transitions // J. Phys. A: Math. Theor., 2013. Vol. 46. Art. no. 455101.
- [2] Buyevich Yu.A., Mansurov V.V. Kinetics of the intermediate stage of phase transition in batch crystallization // J. Cryst. Growth, 1990. Vol. 104. P. 861-867.
- [3] Buyevich Yu.A., Alexandrov D.V, Mansurov V.V. Macrokinetics of crystallization / Begell House. New York, 2001.
- [4] Федорюк М.В. Асимптотика: интегралы и ряды / Наука. Москва, 1987.
- [5] Janse A.H. Nucleation and crystal growth in batch crystallizers / Delft University of Technology. Delft, 1977.
- [6] Hanhoun M., Montastruc L., Azzaro-Pantel C., Biscans B., Frèche M., Pibouleau L. Simultaneous determination of nucleation and crystal growth kinetics of struvite using a thermodynamic modeling approach // Chem. Eng. J., 2013. Vol. 215-216. P. 903-912.

### **Граничные условия и тепловое сопротивление на межфазной поверхности затвердевающей жидкости**

Г. Л. Бухбиндер<sup>1</sup>, П. К. Галенко<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Омский госуниверситет, 644077 Россия, г. Омск, просп. Мира, 55А

<sup>2</sup>Friedrich–Schiller–Universität Jena, Physikalisch-Astronomische Fakultät, D-07743 Jena, Germany.

Тепловые процессы, происходящие на фронте кристаллизации затвердевающей жидкости, в значительной мере влияют на кристаллический рост и, в конечном счете, определяют структуру и физические свойства материала [1]. В этой связи существенный интерес представляет общая формулировка граничных условий на межфазной поверхности, учитывающих различного рода тепловые эффекты.

В представленной работе получены граничные условия на фронте кристаллизации однокомпонентной жидкости, учитывающие температурный разрыв на межфазной поверхности «кристалл-расплав». Поверхность раздела рассматривается в рамках концепции поверхности Гиббса [2], для которой

вводятся поверхностные переменные, такие как поверхностная температура, энергия и плотности потоков энергии, являющиеся независимыми от переменных заданных в объеме. В рамках такой модели температурный разрыв на межфазной поверхности имеет смысл эффекта Капицы [3].

Граничные условия были выведены в рамках термодинамики необратимых процессов [4,5] и представляют собой соотношения Онсагера на межфазной поверхности, дополненные уравнением для поверхностной температуры. Полученные граничные условия показывают, что термодинамические условия, необходимые для кристаллизации, обусловлены: (i) разностью химических потенциалов объемных фаз, (ii) температурным скачком на границе «кристалл-расплав» и (iii) отличием температур в фазах от температуры границы. Формально, полученные граничные условия представлены замкнутой системой четырех уравнений для определения четырех неизвестных – двух температур с обеих сторон границы в фазах «кристалл и расплав», скорости роста кристалла и температуры межфазной границы.

Специально рассмотрены условия стационарного движения при наличии сопротивления Капицы на межфазной границе «кристалл-расплав». В стационарном режиме движения плоского фронта получено выражение для температурного скачка и рассмотрено влияние сопротивления Капицы на скорость фронта. Показано, что учет теплового сопротивления приводит к нелинейному поведению скорости роста кристалла от начального переохлаждения расплава.

- [1] Журавлев В.А., *Затвердевание и кристаллизация сплавов с гетеропереходами*. Москва-Ижевск, РХД, 2006, 506 с.
- [2] Kjelstrup S., Bedeaux D., *Non-equilibrium Thermodynamics of Heterogeneous Systems*, World Scientific, Singapore, 2008, 434 pp.
- [3] Капица П.Л., *Исследование механизма теплопередачи в гелии II* // ЖЭТФ, 1941, т. 11, в. 1, с. 1-31.
- [4] Де Гроот С, Мазур П., *Неравновесная термодинамика*, М.: Мир, 1964, 456с.
- [5] Bedeaux, D., Albano A.M., Mazur P. *Boundary conditions and non-equilibrium thermodynamics* // Physica, 1976, 82A, 438-462.

### Дендритная структура: эмпирика, эволюция, системный анализ

В. М. Голод<sup>1</sup>, К. И. Емельянов<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого

Дендритная структура литого металла, интенсивно изучаемая на протяжении многих лет [1-2], остается объектом, значимость которого для управления качеством отливок и слитков является общепризнанной, и вместе с тем она не

может быть достоверно охарактеризована как с использованием теоретических разработок, так и на основе обобщения накопленных экспериментальных данных. Обзор обширного круга публикаций по дендритной структуре стали, материалы которого опубликованы в трех номерах журнала «Черные металлы» [3-5], приводит к следующим выводам:

- публикуемые данные о структуре дендритов содержат почти исключительно характеристики *средних* значений первичных  $\lambda_1$  и вторичных  $\lambda_2$  междоусных промежутков, как правило, – без указания условий регистрации (без разделения стационарных опытных и нестационарных производственных данных), количества обработанных значений и характеристик полученного разброса данных  $\sigma_\lambda$  или коэффициента корреляции  $R$  приводимых однофакторных степенных статистических моделей;
- в качестве определяющих факторов в этих моделях используется статистический набор кинетических параметров  $\lambda_i = K(G_T)^\alpha (G_T)^\beta (G_T)^\gamma (G_T)^\delta$ ;  $i=1,2$  – температурного градиента  $G_T$ , скорости кристаллизации  $V$ , скорости охлаждения  $V_0$  или локальной продолжительности затвердевания  $\tau_{LS}$ , определяемых по различным методикам и формулам (на ликвидусе или солидусе, в среднем по ширине зоны затвердевания, на основе равновесных или фактических значений температур и т.д.) ;
- математическая структура различных выражений, описывающих влияние компонентов сплава на их дендритные параметры  $\lambda_1$  и  $\lambda_2$ , носит произвольный характер и вследствие этого не поддается обобщению; коэффициенты регрессии, отражающие вклад отдельных компонентов, нередко отличаются обратным знаком, в силу этих причин дендритная структура сплавов разного состава не поддается какому-либо прогнозированию;
- локальная структурная неоднородность (размах значений параметров  $\lambda_1$  и  $\lambda_2$ ), отмечаемая в отдельных исследованиях, и ее зависимость от условий формирования дендритов практически не исследована, в то время как развитие литейных дефектов (фильтрационное развитие усадочных пустот, формирование дендритной ликвации, горячих трещин и т.д.) в значительной степени обусловлено характером распределения в объеме дендрита и его ближайшего окружения вторичных ветвей, характеризуемых различной толщиной, протяженностью и междоусными промежутками;
- существующие теоретические представления о возникновении ансамбля дендритов и изменении их морфологических параметров в процессе неравновесной кристаллизации сплавов носят весьма схематичный характер, при этом остается не выявленным статистический характер эволюции дендритной структуры и ее локальной неоднородности в условиях системного сопряжения теплофизических, кристаллизационных, диффузионных и капиллярных явлений.

В работе исследована кинетика *мезомасштабной* равноосной кристаллизации многокомпонентной стали на основе решения системы уравнений,



описывающих условия выделения твердой фазы, образования и роста ансамбля дендритных кристаллитов в *междендритном* расплаве до их взаимного смыкания (первый этап) с последующим утолщением/растворением возникших вторичных ветвей (второй этап) вследствие интенсивного протекания в объеме *внутридендритной* жидкой фазы их диффузионной коалесценции при частичном подавлении диффузии компонентов сплава в твердой фазе.

Путем решения базовой системы уравнений [6], включающей расчет переохлаждения расплава, зарождения, свободного роста и ветвления первичных дендритов, исследовано дальнейшее формирование, рост и морфологическая эволюция микроструктуры при изменении средних значений состава жидкой фазы и вторичных междусосных промежутков дендритов.

Начальные характеристики дендритной структуры ( $D_0$ ,  $L_0$ ,  $\lambda_0$  – диаметр ветвей, их длина, междусосное расстояние и др.), формирующиеся на первом этапе кристаллизации, в период нарастающего до максимальной величины переохлаждения расплава и его последующей рекалесценции, образуют первичный статистический ансамбль параметров, инициирующих механизм капиллярно-диффузионной коалесценции вторичных боковых ветвей. Для его количественного исследования с помощью метода Монте-Карло [5-6] рассмотрена совместная последовательно-параллельная реализация четырех выявленных механизмов коалесценции [7] (путем растворения ветвей радиального, осевого или у основания, а также при слиянии ветвей) и дана оценка относительного вклада исследованных механизмов с помощью коэффициентов принадлежности теории нечетких множеств. На примере низкоуглеродистой стали выявлен характер получаемых гистограмм распределения значений  $\lambda_2$  и его эволюции в процессе кристаллизации сплава, которая проявляется в непрерывном увеличении во времени как среднего  $(\lambda_2)_{\text{ср}}$ , так и граничных значений  $(\lambda_2)_{\text{max}}$  и  $(\lambda_2)_{\text{min}}$  при последовательном возрастании их размаха, являющегося движущей силой их многократного увеличения вплоть до момента исчерпания внутридендритной жидкой фазы.

Обобщение полученных расчетных и экспериментальных значений параметров дендритной структуры, выполненное на значительном массиве данных для ряда марок углеродистой и низколегированной стали ( $\sigma_D/D=0.12-0.29$ ;  $\sigma_L/L=0.27-0.54$ ;  $\sigma_\lambda/\lambda=0.18-0.31$ ), указывает, что наблюдаемый разброс характеристик не связан с измерительными и/или расчетными погрешностями и обусловлен специфическим механизмом их генезиса и эволюции, и требует – для выявления средств управления микроструктурой – соответствующего теоретического и экспериментального анализа. Расчетные параметры локально-неоднородной дендритной структуры являются базовой информацией для анализа возникновения и развития пространственного распределения литейных дефектов в фасонных отливках [5-6].

- [1] Голод В. М., Савельев К.Д., Басин А.С. Моделирование и компьютерный анализ кристаллизации многокомпонентных сплавов на основе железа. – СПб., Изд-во Политехн. ун-та, 2008. – 372 с.

- [2] Rappaz M., Jacot A., Boettinger W.J. Last-stage solidification of alloys: theoretical model of dendrite-arm and grain coalescence // Metall. Mater. Trans., 2003, № 3, p. 467-479.
- [3] Голод В. М., Емельянов К. И., Орлова И. Г. Дендритная микронеоднородность литой стали: обзор проблем и их компьютерный анализ (Часть 1) // Черные металлы, 2013, № 8. – С. 9-16.
- [4] Голод В. М., Емельянов К. И., Орлова И. Г. Дендритная микронеоднородность литой стали: обзор проблем и их компьютерный анализ (Часть 2) // Черные металлы, 2013, № 9. – С. 25-32.
- [5] Голод В. М., Емельянов К. И., Орлова И. Г. Дендритная микронеоднородность литой стали: обзор проблем и их компьютерный анализ (Часть 3) // Черные металлы, 2013, № 11. – С. 18-25.
- [6] Голод В. М., Емельянов К. И. Системный анализ морфологической эволюции дендритной структуры стали // Черные металлы, 2014, № 4 (988). – С. 49-54.
- [7] Han Q., Hu H., Zhong X. Models for the isothermal coarsening of secondary dendrite arms in multicomponent alloys // Metall. Mater. Trans., 1997, v. 28B, p.1185-1187.

### Моделирование роста дендритных и эвтектических структур при кристаллизации переохлажденных расплавов

Д. А. Данилов<sup>1</sup>, П. К. Галенко<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Institute of Nanotechnology, Karlsruhe Institute of Technology, Germany

<sup>2</sup>Otto-Schott-Institut für Materialforschung, Friedrich-Schiller-Universität Jena, Germany

Кристаллизация металлических сплавов сопровождается формированием различных пространственных структур, например таких, как дендриты, ячейки, эвтектики и т. п., обусловленных конкуренцией стабилизирующих (связанных с поверхностной энергией) и дестабилизирующих (связанных с градиентами концентрации и температуры) факторов на границах раздела фаз. Сложная геометрия границ раздела фаз, а также их эволюция во времени определяет трудности численного моделирования таких процессов. Значительный прогресс в описании и моделировании структурообразования при кристаллизации связан в последнее время с развитием моделей фазового поля [1, 2]. Используя параметр порядка для описания термодинамического состояния системы в данной пространственной точке, эволюционные уравнения тепло-массопереноса в объемах фаз, а также уравнения, определяющие форму и кинетику границ раздела фаз, могут быть получены в рамках единого подхода из функционала энтропии [3, 4] как для простых систем, состоящих только из двух фаз

(кристалл-расплав, рис. слева), так и для более сложных многофазных систем (рис. справа), когда происходит совместный рост нескольких кристаллических фаз. В данной работе рассмотрено приложение метода фазового поля к моделированию роста дендритных [5] и эвтектических структур в переохлажденном бинарном сплаве. Исследованы формирование боковой структуры и кооперативный рост дендритов, различные режимы эвтектического роста, соответствующие постоянному и осциллирующему периоду эвтектической структуры.

- [1] Chen L.-Q., Annu. Rev. Mater. Res. – 2002. – Vol. 32 – P. 113.
- [2] Boettinger W. J., Warren J. A., Beckermann C. et al., Annu. Rev. Mater. Res. – 2002. – Vol. 32 – P. 163.
- [3] Garcke H., Nestler B., Stinner B., SIAM J. Appl. Math. – 2004. – Vol. 64 – P. 775.
- [4] Nestler B., Garcke H., Stinner B., Phys. Rev. E. – 2005. – Vol. 71 – 041609.
- [5] Galenko, P.K., et. al., Acta Materialia – 2007. – Vol. 55 – P. 6834.

### Численное моделирование процесса дендритного роста с учетом конвекции

О. В. Казак<sup>1</sup>, П. К. Галенко<sup>2</sup>, Д. В. Александров<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Кафедра математической физики, Уральский федеральный университет им. первого Президента России Б. Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия;

<sup>2</sup>Friedrich – Schiller – Universität – Jena, Physikalisch – Astronomische Fakultät, Löbdergraben 32, 07743 Jena, Germany.

Дендритом называется древоподобная кристаллическая структура с основным стволом и ветвями, формирующаяся по направлению осей кристаллической решетки. Дендритная структура, как одна из самых распространенных форм роста, представляет особый интерес среди структур, образующихся в переохлажденных расплавах и пересыщенных растворах.

Наряду с экспериментальным изучением динамики кристаллического роста [1,2], недавно были предложены новые теоретические модели и численные результаты [3-5], позволяющие моделировать дендритный рост. Особенно стоит выделить задачу об отборе режима роста дендритного кристалла, при решении которой возникает целый класс подзадач. Одной из таких подзадач является определение влияния конвективного течения на устойчивость роста дендрита при наличии внешних полей – гравитационных и электромагнитных [3].

В настоящей работе приведена модель анизотропного роста дендритных кристаллов из химически чистой и бинарной жидкости (раствора или расплава) с учетом вынужденной конвекции жидкой фазы. Представлены зависимости скорости роста и радиуса вершины дендрита от переохлаждения жидкости для

случаев химически чистого материала и с учетом примесей. Дан сравнительный анализ влияния вынужденной конвекции на кинетику роста дендритов.

- [1] Hartmann H., Galenko P.K., Holland-Moritz D. et al., Nonequilibrium solidification in undercooled  $Ti_{45}Al_{55}$  melts // J. Appl. Phys. / 2008, 103. 073509.
- [2] Binder S., Galenko P.K., Herlach D.M., Faceting of a rough solid-liquid interface of a metal induced by forced convection // Philosophical Magazine Letters / 2013, 93. P. 608–617.
- [3] Александров Д.В., Галенко П.К. Дендритный рост с вынужденной конвекцией: методы анализа и экспериментальные тесты // УФН / 2014, 184. С. 833–850.
- [4] Galenko P.K., Danilov D.A., Alexandrov D.V. Solute redistribution around crystal shapes growing under hyperbolic mass transport // Int. J. Heat Mass Transfer / 2015, 89. P. 1054–1060.
- [5] Alexandrov D.V., Galenko P.K. Thermo-solutal and kinetic regimes of an anisotropic dendrite growing under forced convective flow // Phys. Chem. Chem. Phys. / 2015, 17. P. 19149–19161.

### Применение метода БТА для расчёта температурного интервала тепловой обработки материалов

Ф. В. Недопёкин<sup>1</sup>, В. И. Петренко<sup>1</sup>, М. Ю. Дмитрук<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Донецкий национальный университет, 83001 Украина, г. Донецк просп. Театральный 13

В последние годы экспериментально установлено, что известный разброс регистрируемых значений предкристаллизационных переохлаждений –  $\Delta T_{кр}^-$  определяется чисто техническими причинами. Даже если предположить, что термопара в образце строго неподвижна, точка, в которой начинается кристаллизация в расплаве, никогда не будет совпадать с точкой расположения термопары. Именно поэтому экспериментально регистрируемый разброс величины переохлаждений –  $\Delta T_{кр}^-$  при обычных методах термографирования (при линейном нагреве и охлаждении) имеет статистический характер.

Исключить влияние температурных градиентов в расплаве на показания термопары можно только в том случае, если в момент регистрации температуры в расплаве будут отсутствовать температурные градиенты. Это возможно, когда тепловые потоки в образце изменяют знак с нагревания на охлаждение, тогда во всем объеме образца будет одинаковая температура, т.е. образец некоторое время будет находиться в тепловом равновесии с окружающей средой.

На базе полученных экспериментальных результатов разработана теоретическая модель взрывной, пульсирующей кристаллизации расплавов,

протекающей со скоростью звука [1]. Получены формулы для расчета основных параметров кристаллизации на базе известных физических характеристик веществ [2]. Величина физических или предкристаллизационных переохлаждений расплава у различных материалов колеблется в широких пределах от долей до десятков градусов. Расчеты физических переохлаждений проводились по формуле, полученной в работе [3]:

$$\Delta T_{кр}^- = \frac{4\sigma_{кж} T_{пл} V_{кр} C}{1.27 L_{пл} \lambda}, \quad (1)$$

где:  $T_{пл}$  – температура плавления материала;  $V_{пл}$  – скорость звука в жидкой фазе при температуре плавления;  $C$  – удельная теплоемкость вещества;  $\lambda$  – коэффициент теплопроводности;  $L$  – удельная теплота плавления;  $\sigma_{кж}$  – поверхностное натяжение на границе твердой и жидкой фаз.

В расчетную формулу (1) входят только справочные характеристики материала. Эти расчёты справедливы для веществ, у которых в справочной литературе имеются значения физических констант, используемые в формуле [4]. Таким образом, экспериментально доказано методом БТА, что процессы плавление-кристаллизация имеют гистерезисный характер и происходят аналогично мартенситным превращениям в твердой фазе, т.е. если плавление происходит при некоторой температуре  $T_{пл}$ , то кристаллизация всегда реализуется при другой температуре  $T_{кр} < T_{пл}$ . Величина  $T_{пл} - T_{кр} = \Delta T_{кр}^- = const$  является предкристаллизационным, или физическим переохлаждением расплава и зависит исключительно от физико-химических параметров вещества. Предложенная формула (1) позволяет очень просто рассчитать эту величину, что имеет большое прикладное значение. Метод БТА позволяет регистрировать тепловые эффекты, в которых тепловыделение на порядок меньше, чем при плавлении или кристаллизации, при этом структурные преобразования происходят и в расплавах при температурах значительно выше  $T_{пл}$ .

В рамках предложенной теоретической модели взрывной кристаллизации получен ряд формул для расчета основных параметров кристаллизации, в т.ч. и для расчета величины длительности единичного акта кристаллизации  $\tau_{кр}$ , который протекает пока расплав на границе раздела фаз не повысится от  $T_{кр}$  до  $T_{пл}$ :

$$\tau_{кр} = 1,27 K V_{кр}^{-2} \quad (2)$$

У различных материалов время протекания единичного акта кристаллизации колеблется в широких пределах. Так у индия оно равно  $10^{-11}$  с, а у кремния по расчету  $4 \cdot 10^{-13}$  с. При повышении температуры на границе раздела фаз до  $T_{пл}$  образование твердой фазы прекращается и происходит охлаждение границы раздела фаз до  $T_{кр}$ , после чего начинается следующий цикл кристаллизации. За время кристаллизации образуется твердая фаза, толщина которой может быть рассчитана по формуле:

$$\chi_{кр} = 1.27 K V_{кр}^{-1}. \quad (3)$$

У различных веществ эта величина колеблется так же в широких пределах. По расчетам у кремния она равна  $2,4 \cdot 10^{-6}$  м, а у калия  $3,12 \cdot 10^{-4}$  м. Длительность охлаждения закристаллизовавшегося слоя от  $T_{пл}$  до  $T_{кр}$  может быть рассчитана по формуле:

$$\tau_{ох} = 5.06 \frac{KL^2}{V_{кр}^2 C^2 (\Delta T_0^- \Delta T_{кр}^-)^2}. \quad (4)$$

Зная параметры кристаллизации в единичном акте кристаллизации, можно рассчитать и среднюю скорость затвердевания расплава из соотношения:

$$V_p = \frac{V_{кр} C^2}{4L^2} (\Delta T_0^- - \Delta T_{кр}^-)^2 \text{ или } V_p = K (\Delta T_0^- \Delta T_{кр}^-)^2. \quad (5)$$

Эта величина зависит от температуры внешней теплоотводящей поверхности  $\Delta T_0^-$ .

Согласно выполненным расчетам длительность единичного акта кристаллизации составляет  $10^{-8}$ – $10^{-12}$  с. Длительность охлаждения расплава между единичными актами кристаллизации составляет  $10^{-4}$ – $10^{-5}$  с. Толщина закристаллизовавшегося слоя в течение единичного акта кристаллизации у различных материалов колеблется в пределах, которые совпадают с расчетными размерами элементарных зародышей для различных материалов, полученных в рамках классической или термодинамической модели кристаллизации. Эти расчёты справедливы для веществ, у которых в справочной литературе имеются значения физических констант, используемые в формуле [4]. Любая жидкость в температурном интервале,  $\Delta T_{кр}^-$  находится в промежуточном состоянии между жидкой и твердой фазами.

Именно в этой области температур происходят диффузионные процессы и структурные преобразования, что имеет важное практическое значение для очистки и легирования полупроводниковых материалов.

- [1] «Свойства элементов». Справочник под редакцией М.Е. Дриза. М: Металлургия. 1985. С. 672.
- [2] «Таблицы физических величин». Справочник под ред. И.К. Кикоина. М.: Атомиздат. 1976. С. 1006.
- [3] Недопекин Ф.В., Петренко А.А. «Теоретическая модель и экспериментальные исследования кинетики взрывной кристаллизации расплавов». Вестник Донецкого Национального университета. Сер. А, Вып. 2, 2010. С. 141-147.
- [4] Александров В.Д., Петренко В.И. «Эффект скачкообразного перехода от равновесной кристаллизации капель висмута к неравновесно- взрывной». Письма в ЖТФ. 1983. Т.9. В.22. С 1354-1356.

## Конкуренция атомных масштабов как механизм стеклования и квазикристаллизации

Р. Е. Рыльцев<sup>1,2</sup>, Н. М. Щелкачев<sup>1</sup>, Б. А. Клумов<sup>3,2</sup>

<sup>1</sup>Институт металлургии УрО РАН, 620016 Россия, г. Екатеринбург, Амундсена, 101

<sup>2</sup>Институт теоретической физики им. Л.Д. Ландау РАН, 142432 Россия, г. Черноголовка, просп. ак. Семенова, 1-А

<sup>3</sup>Объединенный институт высоких температур РАН, 125412 Россия, г. Москва, Ижорская, 13/2

В последние годы было обнаружено, что многие сложные эффекты в конденсированных системах могут быть качественно объяснены наличием двух характерных масштабов в потенциале межчастичного взаимодействия. Потенциалы, обладающие таким свойством, возникают при построении эффективных взаимодействий в металлических сплавах, жидкостях с направленными связями, коллоидных системах. Было показано, что конкуренция между масштабами может приводить к полиморфизму, водоподобным аномалиям и стекольной динамике [1]. В этой связи является интересным исследование конкуренции между масштабами на процессы структурообразования и динамические свойства.

С помощью метода молекулярной динамики мы показали, что, в зависимости от соотношения между характерными межчастичными расстояниями и их эффективной концентрации, однокомпонентная система с двухмасштабным отталкивающим потенциалом может демонстрировать различные динамические и структурные свойства при квазиравновесном охлаждении. В некоторых случаях фрустрации, обусловленные конкуренцией масштабов, подавляют кристаллизацию, и наблюдается стекольное поведение, сопровождаемое экстремально большими отклонениями температурных зависимостей транспортных свойств от закона Аррениуса [1]. В других случаях, наличие второго масштаба стабилизирует локальный икосаэдрический порядок, что приводит к переходу из жидкости в фазу декагонального квазикристалла [2]. Возможно также образование разнообразных кристаллических структур с нетривиальной для простых однокомпонентных систем симметрией.

Было показано, что многие особенности поведения структурных и динамических свойств универсальны и не зависят от особенностей межчастичного потенциала.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского Научного Фонда (грант № 14-12-01185).

[1] R. Ryltsev, N. Chtchelkatchev, V. Ryzhov, Phys. Rev. Lett. 110, 025701 (2013)

[2] R.E. Ryltsev, B.A. Klumov, N.M. Chtchelkatchev, Soft Matter 11, 6991 (2015).

**Зависимость структуры объемноаморфного сплава  $\text{Cu}_{64}\text{Zr}_{36}$  от скорости охлаждения: молекулярно-динамическое моделирование**

Р. Е. Рыльцев<sup>1,2</sup>, Б. А. Клумов<sup>3,2</sup>, Н. М. Щелкачев<sup>1,2</sup>, К. Ю. Шуняев<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Институт металлургии УрО РАН, 620016 Россия, г. Екатеринбург, Амундсена, 101

<sup>2</sup>Институт теоретической физики им. Л.Д. Ландау РАН, 142432 Россия, г. Черноголовка, просп. ак. Семенова, 1-А

<sup>3</sup>Объединенный институт высоких температур РАН, 125412 Россия, г. Москва, Ижорская, 13/2

Объемноаморфные металлические сплавы вызывают интерес исследователей, как в силу практической значимости, так и с фундаментальной точки зрения [1]. Одними из наиболее изучаемых систем данного типа являются сплавы Cu-Zr, обладающие уникальной для бинарных сплавов стеклообразующей способностью [2], природа которой до сих пор неясна.

Методом молекулярной динамики с использованием потенциала погруженного атома была исследована структура сплава  $\text{Cu}_{64}\text{Zr}_{36}$  при различных скоростях охлаждения в интервале  $(10^{13}-1,5 \cdot 10^9)$  К/с. Данный сплав соответствует одному из известных составов, для которых возможно получение объемноаморфных образцов.

Обнаружено, что уменьшение скорости охлаждения приводит к формированию более выраженной политетраэдрической структуры, в частности, к увеличению доли икосаэдрических кластеров. Показано, что предложенная недавно процедура уменьшения эффективной скорости охлаждения путем отжига системы при температурах, близких к температуре стеклования (sub- $T_g$  annealing) [3], является некорректной.

При охлаждении системы со скоростью  $1,5 \cdot 10^9$  К/с обнаружено, что в аморфной матрице образуется нанокристаллит со структурой интерметаллида  $\text{Cu}_5\text{Zr}$ , но другой стехиометрии. Анализ структуры данного кристаллита показал, что его составляющими элементами являются многогранник Каспера и искаженный икосаэдр. Отметим, что из данных элементов состоят также структуры интерметаллидов  $\text{Cu}_2\text{Zr}$  и  $\text{Cu}_5\text{Zr}_{14}$ . Это позволяет предположить, что политетраэдрическая структура системы Cu-Zr в состоянии переохлажденной жидкости и стекла содержит кластеры указанной симметрии, которые при локальном упорядочении могут образовывать фрагменты стабильных и метастабильных кристаллических структур. Данная гипотеза подтверждается анализом структуры аморфной фазы, который выявил значительные доли указанных кластеров.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского Научного Фонда (грант № 14-13-00676).

[1] A. Inoue. Stabilization, Acta Mater, 48, 279 (2000).



[2] A. Inoue, W. Zhang, Mater Trans, 45, 584 (2004).

[3] Y. Zhang, C. Z. Wang, M. I. Mendeleev, F. Zhang, M. J. Kramer, K. M. Ho, Phys. Rev. B, 91, 180201 (2015).

### О времени нестационарности роста первичных дендритов

Е. А. Титова<sup>1</sup>, Д. В. Александров<sup>1</sup>, П. К. Галенко<sup>2,3</sup>

<sup>1</sup>Уральский федеральный университет, 626000 Россия, г. Екатеринбург

<sup>2</sup>Фридрих Шиллер Университет, Германия, г. Йена

<sup>3</sup>Институт физики материалов в космосе, Германский аэрокосмический центр, Германия, г. Кёльн

Для количественных оценок и анализа роста дендритных кристаллов часто используют модели, основанные на квази-стационарном приближении фазового превращения, т.е. в приближении роста дендритов с постоянной скоростью. Поэтому особое значение имеет обоснование использования подобного приближения, особенно для процесса высокоскоростного затвердевания, когда скорость роста дендритов может составлять метры или даже десятки метров в секунду [1].

Для оценки времени нестационарной стадии роста и его сравнения с экспериментальным временем первичного затвердевания в настоящей работе используется обобщенное уравнение Гиббса-Томсона [2]

$$\tau_{\varphi} \frac{a_n}{\left[1 - \left(\frac{V_n}{V_{\varphi}^B}\right)^2\right]^{3/2}} + \frac{V_n}{\left[1 - \left(\frac{V_n}{V_{\varphi}^B}\right)^2\right]^{1/2}} = \frac{v_{\varphi}}{\sigma} \Delta G + \frac{v_{\varphi} \kappa}{\left[1 - \left(\frac{V_n}{V_{\varphi}^B}\right)^2\right]^{1/2}}, \quad (1)$$

где  $\tau_{\varphi}$  – время релаксации скорости фазового поля,

$$a_n = \frac{\partial V_n}{\partial t}$$

ускорение поверхности,  $t$  – время,  $V_{\varphi}^B$  – максимальная скорость распространения возмущений в фазовом поле,  $v_{\varphi}$  – коэффициент диффузии фазового поля,  $\sigma$  – межфазная поверхностная энергия,  $\kappa$  – средняя кривизна в точке поверхности, имеющей нормальную скорость  $V_n(t)$ . Движущая сила  $\Delta G$  для химически однокомпонентной (чистой) системы задается соотношением:

$$\Delta G = \frac{L(T_A - T)}{T_A},$$

где  $L$  – скрытая теплота фазового перехода,  $T_A$  – равновесная температура сосуществования фаз. В безразмерных функциях уравнение (1) принимает более простой и удобный для интегрирования вид

$$\frac{1}{[1 - W_n^2]^{3/2}} \frac{\partial W_n}{\partial \tau} + \frac{W_n}{[1 - W_n^2]^{1/2}} = l_g \Delta_T + \frac{l_g \kappa}{[1 - W_n^2]^{1/2}}, \quad (2)$$

где  $W_n = V_n/V_\phi^B$  – безразмерная скорость,  $\tau = t/\tau_\phi$  – нормированное время,

$$\Delta_T = \frac{T_A - T}{T_A},$$

безразмерное переохлаждение,  $l_g = v_\phi L / (V_\phi^B \sigma)$  – параметр, учитывающий соотношение масштаба длины распространения фазового поля,  $K = \sigma \kappa / L$  – безразмерная кривизна. Решение уравнения (2) имеет вид:

$$\tau = \int_0^V \frac{dW_n}{\frac{\sqrt{v_\phi \tau_\phi}}{l_\sigma} \Delta_T [1 - W_n^2]^{3/2} - W_n [1 - W_n^2] + \sqrt{v_\phi \tau_\phi} \kappa [1 - W_n^2]}. \quad (3)$$

Интегрирование уравнения (3), описывающего зависимость скорости роста от времени при различном переохлаждении, позволяет определить время нестационарного периода роста дендрита. В частности, показано, что с увеличением переохлаждения стационарное значение скорости роста достигается быстрее, т.е. время нестационарности уменьшается. Сравнение абсолютных величин расчетных времен нестационарности при росте первичных дендритов с экспериментальными временами высокоскоростного затвердевания малых объемов (капель металлических жидкостей, переохлажденных в электромагнитных левитаторах) показывает, что приближение квазистационарного роста при теоретических расчетах является хорошей аппроксимацией для сравнения теории и эксперимента.

- [1] Херлах Д., Галенко П., Холланд-Мориц Д., *Метастабильные материалы из переохлажденных расплавов*. - М. – Ижевск: Институт компьютерных исследований, 2010. – 481 с.
- [2] Salhoumi A., Galenko P.K. *Gibbs-Thomson condition for the rapidly moving interface in a binary system* / A. Salhoumi, P.K. Galenko // *Physica A* – 2016. – Vol. 447 – P. 161-171.

### **Кристаллизация дендритов металлов из пересыщенных растворов их солей путем электролиза**

И. В. Шутов<sup>1</sup>, А. В. Склямина<sup>1</sup>, А. И. Мосин<sup>1</sup>, М. Д. Кривилев<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Удмуртский государственный университет, 426034 Россия, г. Ижевск, ул. Университетская, 1

В современной металлургии очень важную роль играет изучение дендритного роста в металлических сплавах. Особенно важно исследовать кинетику и термодинамику их образования в зависимости от химического состава, скоростей охлаждения и условий конвективного перемешивания. Это помогает добиваться оптимальных параметров кристаллической субструктуры, таких как

размер дендрита, наличие вторичных ветвей, а так же их структурный и фазовый состав. В конечном итоге эти параметры влияют на механические, прочностные и коррозионные свойства получаемых изделий [1, 2].

В данном демонстрационном эксперименте показан рост дендритов металлов из пересыщенного раствора солей свинца путем электролиза. Эксперимент заключается в том, что в емкость, заполненную пересыщенным раствором соли металла, опускаются электроды на которые подается разность электрических потенциалов  $\sim 9$  В. В результате процесса электролиза начинается выделение чистого олова, который растет в форме дендритного поликристалла. Это связано с тем, что металлу с точки зрения термодинамики выгодно иметь разветвленную форму для достижения наибольшей скорости осаждения. Поскольку процесс электролиза сопровождается обеднением раствора, отбор разветвленной дендритной морфологии позволяет эффективно решать проблему низкой скорости диффузионного подвода ионов к границе раздела фаз.

- [1] Курц У., Фишер Д., Фундаментальные основы затвердевания. – М.–Ижевск: Институт компьютерных исследований, 2013. – 300с.
- [2] Жуховицкий А. А., Шварцман Л. А. Физическая химия. – М.–Металлургия, 1987. –543с .

## **Секция II**

### **Системы автоматического проектирования технологий литья**

**Разработка измерителя теплофизических свойств материалов литейных форм на основе метода периодического нагрева**С. Р. Галлямов<sup>1</sup>, С. А. Трефилов<sup>2</sup>, А. С. Петров<sup>2</sup><sup>1</sup> ФГБОУ ВПО «УдГУ», 426034, Россия, г.Ижевск, ул. Университетская, 1<sup>2</sup> ФГБОУ ВПО «ИжГТУ им. М.Т. Калашникова», 426069, Россия, г.Ижевск, ул. Студенческая, 7

Известно, что для моделирования и проектирования производственных процессов литья необходима информация о теплофизических свойствах, как кристаллизующегося сплава, так и материалов литейной формы в широком температурном интервале. Большинство работ по экспериментальной и теоретической теплофизике отдают предпочтение методу периодического нагрева, наиболее полно изложенный в работах Л.П. Филиппова, С.Н. Кравчуна, О.А. Краева, А.А. Стельмаха и др. Метод температурных волн (как разновидность метода периодического нагрева) и его преимущества представлены в [1-3]. Однако проблемы его использования требуют решения многих задач при разработке измерителя теплофизических свойств (далее ТФС) песчаных, песчано-глинистых и керамических материалов (далее материалов), используемых для изготовления литейных форм. Для получения температурной зависимости комплекса ТФС (теплопроводность, температуропроводность и теплоёмкость) материалов предложен метод цилиндрических (радиальных) температурных волн малой частоты. Данный метод использован в измерителе ТФС материалов в лабораторных условиях.

Измеритель состоит из охлаждаемого водой корпуса с исследуемым материалом, изменение температуры которого происходит при помощи цилиндрического (наружного) нагревателя. По оси наружного нагревателя располагается центральный нагреватель для возбуждения радиальных температурных волн малой амплитуды и малой частоты. Измерение температуры материала и амплитуды температурной волны осуществляется при помощи малоинерционных термодпар. Они расположены между центральным и наружным нагревателями на радиусах  $r_1$  и  $r_2$ , меньших расчётной длины затухания температурной волны. Устройство управления, связанное с ЭВМ по каналу USB, обеспечивает связь с оператором, задание алгоритма проведения эксперимента, передачу измеренных значений температур и вычисление комплекса ТФС.

Устройство управления системы измерения параметров состоит из микроконтроллера, двух усилителей тока, двух плат прецизионных усилителей с аналого-цифровыми преобразователями (по четыре канала на каждую плату) и двух датчиков тока с усилителями, аналоговые сигналы которых подаются на входы аналого-цифровых преобразователей микроконтроллера. Устройство управления выполнено в виде компактного настольно прибора и позволяет априорно по программе, запущенной на ЭВМ и передающей данные на микроконтроллер, задавать температурное поле образца, передавать измерительную информацию от датчиков температуры по каналу USB на ЭВМ оператора. Усилители тока задают токи нагревателей: до 70А (напряжение

13,5В) центрального нагревателя; до 30А (напряжение 48 В) наружного нагревателя. Регулирование тока производится с применением алгоритма широтно-импульсной модуляции с возможностью изменения частоты первой гармоники в диапазоне от сотых долей герца до сотен герц. Датчики тока обеспечивают обратную связь по току.

- [1] Кравчун С.Н., Липаев А.А. Метод периодического нагрева в экспериментальной теплофизике. – Казань, Изд-во Казанского университета, 2006. -207с.
- [2] Ивлиев А.Д. Метод температурных волн в теплофизических исследованиях (анализ советского и российского опыта), Теплофизика высоких температур, 2009, Т. 47, Вып.5, с.771–792.
- [3] Любимова Д.А., Пономарёв С.В., Дивин А.Г. Измерение теплофизических свойств теплоизоляционных материалов методом регулярного режима третьего рода// Тамбов: Изд-во ФГБОУ ВПО «ТГТУ», 2014.-80с.

### **LVMFlowCV – профессиональная система компьютерного моделирования литейных технологий**

В. В. Кропотин<sup>1</sup>, А. С. Прокошев<sup>1</sup>

<sup>1</sup>НПО МКМ, Россия, 426072 Ижевск, ул. Героя России И.Закирова, 24,  
e-mail: mkm@mkmssoft.ru

НПО МКМ является разработчиком пакета LVMFlowCV – профессиональной системы компьютерного моделирования литейных технологий. Основой пакета являются физико-математические модели процессов затвердевания, тепло- и массо- переноса для различных видов литья и современные методы численного моделирования для их реализации.

Программный комплекс LVMFlowCV предоставляет возможности для разработки и комплексной оптимизации литейной технологий изготовления литейной продукции.

Применение LVMFlowCV позволяет:

- анализировать процессы литья при использовании различных материалов: углеродистые стали, легированные стали, чугуны (серые, белые, ковкие и высокопрочные), силумины и др.
- прогнозировать коробления и линейную усадку отливок и слитков, возникновение холодных и горячих трещин, текущих и остаточных механических напряжений в металлургических изделиях, получаемых литьем.
- оптимизировать режимы заливки сплава и затвердевания;
- прогнозировать макроструктуру, твердость и механические свойства;
- заметно уменьшить затраты времени на проектирование и техническую подготовку производства,
- повысить качество отливок и слитков,
- увеличить конкурентоспособность изделий,

- снизить общие затраты времени на производство изделий,
- понизить себестоимость готовых изделий,
- минимизировать отходы литейного производства, уменьшить материалоемкость,
- значительно уменьшить, а в некоторых случаях полностью исключить брак.

### Вычисление термодинамических параметров для расчета микроструктуры сплавов в пакете LVMFlow

Л. И. Романов<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> НПО МКМ, Россия, 426072, Ижевск, ул. Героя России И.Закирова, 24,

<sup>2</sup> Удмуртский Государственный Университет, Россия, 426034, Ижевск, ул. Университетская, 1; e-mail: romanovli@mail.ru

Свойства металлических сплавов во многом определяются количеством, природой и последовательностью образования кристаллических фаз при затвердевании жидкого сплава. Для определения качественного и количественного фазового состава сплава при заданных температуре  $T$ , давлении  $P$  и концентрации  $x$  компонентов, входящих в сплав, используются значения потенциала Гиббса системы  $G(T, P, x)$  и потенциалов Гиббса отдельных фаз  $G^{\varphi}(T, P, y^{\varphi})$  [1].

Потенциалы Гиббса  $G^{\varphi}(T, P, y^{\varphi})$  представлены в виде определенных полиномов с оптимизированными параметрами. Параметры для вычисления значений энергии Гиббса чистых элементов приведены в [2], для сплавов параметры можно найти в журналах CALPHAD, Intermetallics, Journal of Alloys and Compounds.

Потенциал Гиббса системы в случае постоянной температуры и постоянного давления при равновесных условиях принимает минимальное значение. В случае  $k$  - компонентной системы с  $N$  фазами задача нахождения условий равновесия приводит к следующей задаче условной минимизации с неотрицательными переменными [3]:

$$\min G(T, P, x) = \sum_{i=1}^N f^i G^i(y_1^i, y_2^i, \dots, y_k^i)$$

при ограничениях:

$$\sum_{i=1}^N f^i y_j^i = x_j \quad j = 1, 2, \dots, k$$

$$\sum_{j=1}^k y_j^i = 1, \quad i = 1, 2, \dots, N$$

$$\sum_{i=1}^N f^i = 1$$

На основе полученного решения этой задачи рассчитываются различные термодинамические параметры сплава: температуры ликвидуса и солидуса,

фазовый состав при заданной температуре, химические потенциалы компонентов для фаз переменного состава. Вычисленные значения параметров сплава используются в пакете LVMFlow.

- [1] M. Hillert, Phase Equilibria, Phase Diagrams and Phase Transformations, Cambridge University Press, New York, 2008.
- [2] A. T. Dinsdale, Thermodynamic data for the elements, CALPHAD, Vol. 1 (Issue 4), 1991, p.317-425.
- [3] H. L. Lukas, S. G. Fries, B. Sundman, Computational Thermodynamics: The Calphad Method, Cambridge University Press, New York, 2007.

### **Применение CAD/CAM/CAE технологий в производстве**

М. М. Фролов

В настоящее время для технологий машиностроения (литейное производство обеспечивает заготовительный передел) характерно использование компьютерной техники на всех уровнях. Для этого применяют CAD/CAM/CAE системы [1]. Условно такие системы делятся на некоторые категории:

Относительно простые системы предназначены в основном для выполнения чертежей, автоматизации выпуска конструкторской и технологической документации, двумерного моделирования и некоторых трёхмерных построений. Системы просты в использовании, содержат множество библиотек стандартных элементов, поддерживают различные стандарты оформления графической документации. Использование подобных систем позволяет сократить время разработки проекта и обеспечивает полное соответствие документации ЕСКД и ЕСТД [2].

Более сложные системы предназначены для создания объемной модели изделия, проектирования сборочных единиц невысокого уровня сложности, подготовки управляющих программ для станков с ЧПУ, определения инерционно-массовых, прочностных и некоторых других характеристик. Подобные системы позволяют сократить время на разработку проектов, на доводку опытных образцов изделий. С их помощью можно решать некоторые типичные задачи, не привлекая мощные и более дорогие системы.

Системы ещё более высокого уровня дают возможность: моделировать работу механизмов и все виды обработки, конструировать детали с учетом особенностей материала, проводить динамический анализ сборки, проектировать оснастку с моделированием процессов изготовления (штамповки, литья, гибки). Подобные системы позволяют значительно сократить время разработки и изготовления изделия.

Примером CAD/CAM/CAE системы наиболее высокого уровня является Creo Parametric (ранее Pro/Engineer) от компании PTC (Parametric Technology Corporation), сопрягаемая со специальными программами моделирования технологий.



Главной особенностью новых направлений в технологии машиностроения является взрывной процесс объёмной печати, например появление лазер аддитивных технологий. В недалёкой перспективе подобные направления совершенствования технологий машиностроения смогут составить серьёзную конкуренцию литью, но при всё при этом актуальность дальнейшего развития CAD/CAM/CAE технологий не уменьшится.

В 2016 году компания Nvbots, специализирующаяся на разработке и выпуске 3D-принтеров, объявила о коммерческой доступности в рамках программы альфа-тестирования технологии высокоскоростной 3D-печати металлами. По словам Nvbots, это первая технология, позволяющая комбинировать разные металлы в одном изделии, изготавливаемом методом 3D-печати. Про скорости изготовления изделий разработка Nvbots десятикратно превосходит выборочное лазерное спекание (SLS) при заметно меньшей стоимости. Изготовление металлических деталей методом 3D-печати имеет ряд преимуществ над литьем, поскольку снимаются ограничения на форму детали, устраняются сложности и затраты, связанные с изготовлением формы, снижаются расходы на оплату труда, поскольку печать не требует участия квалифицированного персонала.

Подробности технологии производитель не раскрывает. Известно, что список материалов, которые можно использовать, включает алюминий, золото, никель, платину, свинец, сталь, титан, цинк и другие металлы, а также сплавы.

Многолетняя практика применения CAD/CAM/CAE технологий для различных технологий формообразования: таких как вакуумплёночная формовка, кристаллизация под давлением, гравитационное литьё в перманентные формы, литьё в сырые песчаные формы, литьё под давлением и т.д. свидетельствует о том, что, несмотря на значительные достижения в методах проектирования с применением CAD/CAM/CAE систем, у подобного направления по-прежнему есть колоссальный ресурс развития.

Автоматизация процессов проектирования, конечно, позволяет сокращать время подготовки производства, но в свою очередь требует использования в качестве операторов всех систем (вплоть до оборудования с ЧПУ) инженеров наивысшей квалификации. Например, все, что связано с созданием конструкторской документации, построением геометрических моделей, генерацией расчетных сеток, выполнением прочностных расчётов, моделированием технологических процессов, написанием программ ЧПУ и т.п. всё ещё пока, к сожалению, содержит значительный объём ручной работы. Качество прогноза развития кристаллов, химической неоднородности или усадочных дефектов в значительной степени зависит от эмпирических моделей и от знания с достаточной степенью точности всевозможных коэффициентов переноса, само определение которых по-прежнему представляет собой достаточно сложную научную задачу.

[1] Остапенко, Н.Н.. Технология металлов / Н.Н. Остапенко, Н.Н. Крапивницкий.– М.: Высшая школа, 1970

[2] Концевич В. Г. Твердотельное моделирование машиностроительных изделий в Autodesk Inventor/ М.: ДМК Пресс, 2007. — 672с.

## **Секция III**

### **Металлургические и литейные технологии**

**Математическое моделирование процессов обработки стали порошковой проволокой с силикокальцием на агрегате ковш-печь (АКП)**

В. В. Белоусов<sup>1</sup>, В. В. Бодряга<sup>1</sup>, В. И. Бондаренко<sup>1</sup>,  
Ф. В. Недопекин<sup>1</sup>, Я. В. Павлов<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Донецкий национальный университет, 83001 Украина, г. Донецк просп. Театральный 13

Эффективность внепечной обработки стали во многом зависит от того, на какой глубине высвобождается наполнитель из порошковой проволоки и начинается его взаимодействие с металлом. Оптимальная скорость ввода проволоки в расплав зависит от многих параметров, влияющих на кинетику процесса взаимодействия вводимого реагента с расплавом, к которым следует отнести: состав, геометрические размеры порошковой проволоки, теплофизические характеристики наполнителя и оболочки, химический состав, температуру расплава и условия теплоотдачи от расплава к оболочке порошковой проволоки.

Задача решается в два этапа: на первом этапе определяются поля скорости и температуры в агрегате ковш-печь путем численного решения нелинейных дифференциальных уравнений: Навье-Стокса, неразрывности, теплопереноса с учетом газообмена в ванне АКП [1,2]; на втором - после погружения в расплав на поверхности проволоки образуется корочка затвердевшего шлака и расплава. Температура внешней поверхности затвердевшего слоя равна температуре ликвидус жидкой стали. Толщина корочки возрастает до определенного значения и затем по мере прогрева оболочки и наполнителя расплавляется до полного ее исчезновения, после чего начинается взаимодействие оболочки и расплава.

Диффузия углерода из расплава в поверхностный слой оболочки приводит к понижению температуры ликвидус стали до значения, меньшего температуры расплава, и начинается ее диффузионное плавление путем совместного протекания процессов тепло- и массообмена [3]. Поверхностный слой оболочки насыщается углеродом из расплава до концентрации солидус и образуется жидкая фаза равновесного состава. При этом температура плавящейся поверхности меньше, чем температура расплава, что обеспечивает внешний тепловой поток, необходимый для продолжающегося прогрева проволоки и компенсации теплоты фазового превращения.

При постановке задачи приняты следующие допущения:

- тепловые контакты между внутренней поверхностью оболочки и порошковым наполнителем, а также между наружной поверхностью оболочки и слоем затвердевшего расплава приняты идеальными;
- науглероженный поверхностный слой оболочки считается плоским, что допустимо в силу его малой толщины;

## Всероссийская конференция с международным участием

- перенос тепла в осевом направлении очень мал, а фронты плавления – плоские;
- температура жидкого металла в ковше постоянна в течение всего периода ввода проволоки;
- направление движения вводимой в ковш проволоки рассматривается как вертикальное;
- коэффициент теплоотдачи к движущейся проволоки определяется по скорости ее перемещения в неподвижном расплаве.

Математическая модель, описывающая процессы, протекающие в порошковой проволоке, состоит из уравнения теплопереноса [1]

$$c_n(T)\rho_n(T)\frac{\partial T_n}{\partial t} = \frac{1}{x} \frac{\partial}{\partial x} \left[ \lambda_n(T)x \frac{\partial T_n}{\partial x} \right] + g(T), \quad 0 \leq x \leq R; \quad (1)$$

для учета фазового перехода в интервале температур солидус  $T_s$  и ликвидус  $T_l$  в уравнение теплопроводности введена функция источника теплоты:

$$g(T) = Q_n \rho_n \begin{cases} \xi(T), & T_s \leq T \leq T_l, \\ 0, & T > T_l, T < T_s, \end{cases} \quad (2)$$

где  $\xi(T) = V_{ms}/V_0$  – доля твердой фазы в двухфазной зоне,  $V_0$  – объем двухфазной зоны  $m^3$ ,  $c = [1 - W/(c_{жс}T_0)] \partial \xi / \partial T$  – эффективная теплоемкость, Дж/(кг·К) [1];  $c_{жс}$  – теплоемкость в жидкой фазе расплава;  $W$  – скрытая теплота кристаллизации, Дж/кг;  $\xi$  – доля твердой фазы которая определяется из правила неравновесного рычага [1]:

$$\xi(y) = 1 - \left( 1 + \frac{c}{W} (T_l - T_s) \right) \left[ 1 - \left( \frac{T_l - T}{T_l - T_s} \right)^{2/3} \right] + \frac{c}{W} (T_l - T_s); \quad (3)$$

Уравнение теплопроводности для затвердевшей оболочки расплава имеет вид:

$$c_p(T)\rho_{pn}(T)\frac{\partial T_p}{\partial t} = \frac{1}{x} \frac{\partial}{\partial x} \left[ \lambda_p(T)x \frac{\partial T_p}{\partial x} \right], \quad R \leq x \leq z(t). \quad (4)$$

Условие теплообмена на границе между затвердевшей оболочкой и расплавом описывается уравнением:

$$\rho_p Q_p \frac{\partial z}{\partial t} = \alpha_{жс} (T_{жс} - T_l) - \lambda_p(T) \frac{\partial T_p}{\partial x}. \quad (5)$$

На оси ленты условие теплообмена задано в виде  $\partial T_n / \partial x = 0$ .

На границе раздела поверхности проволоки и оболочки металла задано граничное условие 4 рода:

$$\lambda_p(T) \frac{\partial T_p}{\partial x} \Big|_{x=R-0} = \lambda_n(T) \frac{\partial T_n}{\partial x} \Big|_{x=R+0}; \quad T_n(R-0, t) = T_p(R+0, t).$$

Таким образом, разработана математическая модель плавления порошковой проволоки, учитывающая не только теплофизические процессы, протекающие в порошковой проволоке в зависимости от их конструктивных особенностей, теплофизических характеристик наполнителя, но и теплофизические и динамические явления, протекающие в АКП в процессе их ввода в расплав.

В результате математического моделирования определено время плавления порошковой проволоки с силикокальцием диаметром 8, 10 и 12 мм при ее вводе в АКП в зависимости от температуры обрабатываемой стали.

В результате численного моделирования получено, что глубина проникновения проволоки в расплав при скорости ее ввода 3 м/с достигает 78 см.

- [1] Затвердевание металлов и металлических композиций // Недопекин Ф.В., Белоусов В.В., Хрычиков В.Е., Лейбензон и др. / Учебник, Наукова думка, Киев, 2009.- 412 с
- [2] V.I.Bondarenko, V.V.Bilousov Mathematical Tools for Problems of Hydrodynamics and Heat and Mass Transfer - Lambert Academic publishing 2015 <https://www.lap-publishing.com//content/login>
- [3] Improvement in Efficiency, Resource and Ecological Indices for Extra-Furnace Steel Treatment with Flux-Cored Wire Containing Calcium Reagents// V. V. Belousov, A. Ya. Babanin, O. A. Babanina, and other / ISSN 0026-0894 (1573-8892), Metallurgist, 2013, Vol. 56, Nos. 11-12, p.p. 933-937, DOI: 10.1007/s11015-013-9677-1 [<http://dx.doi.org/10.1007/s11015-013-9677-1>].

### **О влиянии режима термообработки на удельное электросопротивление стали 35ХГФ при 1300-1720°C**

М. А. Боровых<sup>1</sup>, О. А. Чикова<sup>1</sup>, В. С. Цепелев<sup>1</sup>, В. В. Вьюхин<sup>1</sup>

<sup>1</sup>ФГАОУ ВПО Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н.Ельцина, 620002, г. Екатеринбург, ул. Мира 19, Россия.  
E-mail: makboro@e1.ru

При экспериментальном изучении температурной зависимости электросопротивления стали, как правило, ставится задача получение информации о строении металла, о температурах, при нагреве до которых происходят структурные изменения в твердом и жидком металле. Абсолютная величина удельного электросопротивления при данной температуре, температурный коэффициент удельного электросопротивления сталей существенным образом зависят от зеренной структуры, кристаллического строения металла, наличия точечных дефектов и дислокаций. Влияние границ зерен и кристаллического строения на величину электросопротивления поликристаллических материалов исследовано весьма слабо. Изменение кристаллического строения стальных изделий достигается в результате термообработки.

Электросопротивление является структурно чувствительным свойством металлического расплава. В частности, известны многочисленные экспериментальные свидетельства того, что при температурах выше

температуры ликвидус в многокомпонентном металлическом сплаве в течение длительного времени могут существовать микронеоднородности, отличные по химическому составу от окружающего расплава. Для их разрушения нужны перегревы жидкого металла до определенной для каждого состава температуры или иные энергетические воздействия, например, ультразвуковая кавитация. После такого воздействия расплав необратимо переходит в состояние истинного раствора, что существенно изменяет условия его кристаллизации. Экспериментально установлено, что разрушение микронеоднородной структуры расплавов обычно сопровождается аномалиями температурных зависимостей удельного электросопротивления расплава. Обнаружено расхождение температурных зависимостей удельного электросопротивления расплава, соответствующим режимам нагрева и последующего охлаждения образца. Температуру, отвечающую необратимому переходу расплава в гомогенное состояние, в этом случае определяли по началу высокотемпературного совпадающего участка политерма нагрева и охлаждения.

В данной работе исследовано влияние кристаллического строения образцов стали 35ХГФ на характер температурной зависимости удельного электросопротивления при температурах 1300-1720°C. Кристаллическое строение образцов стали 35ХГФ изменялось в результате термообработки – нормализации и отпуска. О кристаллическом строении образцов стали 35ХГФ судили по результатам металлографического исследования выполненного средствами EBSD-анализа. Образцы для исследования - сталь марки 35ХГФ. Сталь конструкционная легированная марки 35ХГФ содержит компоненты в следующем соотношении, мас. %: углерод 0,31-0,38, кремний 0,17-0,37, марганец 0,95-1,25, хром 1,0-1,30, ванадий не 0,06-0,12, сера не более 0,035, фосфор не более 0,035. Образцы отобраны от готовых труб в условиях ОАО «Синарский трубный завод» и отличаются режимом термообработки (ТО): образец 1 – нормализация при 910°C и отпуск при 700°C в печах скоростного нагрева; образец 2 – отпуск при 700°C в печах скоростного нагрева; образец 3 – нормализация при 910°C; образец 4 – длительный отпуск при 700°C. Металлографическое исследование выполнено с помощью сканирующего электронного микроскопа Carl Zeiss AURIGA CrossBeam с использованием функций: рентгеновский микроанализ (EDS) и дифракция обратно рассеянных электронов (EBSD). Удельное электросопротивление измеряли методом вращающегося магнитного поля в режиме нагрева от 1300 до 1720° С и последующего охлаждения образца. Рабочую камеру предварительно вакуумировали до 0,001 Па. Затем запускали гелий до давления примерно 10<sup>5</sup> Па. Образцы выдерживали в камере с инертной средой в течение 5-8 мин., при температуре 1300°C, затем производится нагрев до 10°C с шагом 30-50°. Изотермические выдержки в точках отсчета составляли не менее 15 минут. Оценка погрешности измерений удельного электросопротивления показала, что при использовании тиглей из ВеО общая относительная погрешность близка к 3%. Ее случайная составляющая, определяющая точность фиксации аномальных

точек на температурных зависимостях  $\rho$  не превышает 2% при доверительной вероятности  $p=0,95$

В результате металлографического изучения кристаллического строения образцов обнаружено, что микроструктура образца 3 характеризуется наиболее мелкими кристаллитами (порядка 1 мкм) и наибольшей протяженностью зеренных границ. Микроструктура образца 2 имеет наиболее выраженную текстуру и наиболее крупное зерно. Для образцов 1,3,4 обнаружены несплошности размером порядка 1 мкм. Вблизи несплошностей на IPF-картах в наличии широкая цветовая гамма, которая свидетельствует о высокой степени разнонаправленности кристаллитов и слабо выраженной текстуре.

Для образцов 1,2 и 3 обнаружен экстремум на температурной зависимости сопротивления при 1390°C в режиме нагрева, что отвечает температуре полиморфного превращения железа из  $\gamma$ -Fe в  $\delta$ -Fe. В опытах с образцами 1, 2 и 3 обнаружено расхождение политейм нагрева и охлаждения (гистерезис) для температур выше ликвидуса (1530 °C). Температурные зависимости удельного электросопротивления жидкой стали марки 35ХГФ во всех опытах в режиме охлаждения носят монотонный характер и близки к линейным. Для образца 3 температурный коэффициент удельного электросопротивления жидкой стали имеет наименьшую абсолютную величину. Для жидкой стали марки 35ХГФ температуру, отвечающую необратимому переходу расплава в однородное на атомном уровне состояние, по началу высокотемпературного совпадающего участка политейм нагрева и охлаждения, идентифицировать не удалось. Значение данной температуры оказалось зависящим от кристаллического строения и, соответственно, режима термообработки твердого металла. Ранее аналогичное явление в резистометрических экспериментах с жидкими сталями отмечали. Знак температурного коэффициента удельного сопротивления жидкой стали 35ХГФ  $dp/dt$  во всех опытах в режиме нагрева положителен. Температурный коэффициент удельного сопротивления в режиме охлаждения меньше по абсолютной величине в 4-5 раз и отрицателен. При охлаждении жидкой стали в этом случае число электронов проводимости  $z$ , а следовательно и волновое число Ферми  $k_F$  увеличивается ( $k_F=(3\pi^2z/\Omega)^{1/3}$ ). В соответствии с теорией Фабера-Займана в данном случае определяющим фактором является рост величины структурного фактора  $a(2k_F)$ . Когда удвоенный волновой вектор Ферми  $2k_F$  становится равным волновому числу, соответствующему положению 1-го пика структурного фактора ( $2k_F=K_p$ ), электросопротивление достигает максимального значения. В области, где  $2k_F \approx K_p$  по теории Займана температурный коэффициент электросопротивления  $dp/dt$  близок к нулю или отрицателен, так как с ростом температуры уменьшается высота 1-го пика структурного фактора. Примечательно, что условие  $2k_F=K_p$  лежит в основе модели Нагела и Таука, объясняющей повышенную склонность эвтектических сплавов к аморфизации. Согласно этой модели при выполнении условия  $2k_F=K_p$  возникает потенциальный барьер для зарождения кристаллитов, понижается

температура плавления сплава (температура эвтектики) и повышается температура стеклования, что и способствует процессу аморфизации.

### Компьютерное моделирование работы установки по переработке шлака в товарную продукцию

В. В. Виноградов<sup>1</sup>, А. Г. Шакуров<sup>1</sup>, В. С. Есенбеков<sup>2</sup>

<sup>1</sup>ФГУП ЦНИИЧМ им. И.П.Бардина. 105005 РФ Москва ул. Радио 23/9.

<sup>2</sup>МГТУ им. Н.Э.Баумана. 105005 РФ Москва ул. 2-я Бауманская 5.

E-mail: vvinogradov@mtu-net.ru

Высокий уровень экологичности и эффективности полного цикла металлургического производства должен предусматривать переработку доменных и сталеплавильных шлаков в востребованную товарную продукцию, с заданным комплексом их свойств. При таком подходе исключаются этапы хранения шлаков и образования отвалов. Для решения этой практически важной задачи необходимо обеспечить получение непосредственно из шлакового расплава твердого продукта в стабильном состоянии – исключая распад шлаков в порошок, за счет термической стабилизации их структуры. Этого можно добиться с помощью управляемого ускоренного охлаждения шлакового расплава [1-2]. На практике в качестве охлаждающего агрегата используется система металлических шаров, определенного радиуса (насадки), через которую протекает сливаемый расплав шлака. Для разработки технологии была создана компьютерная модель, основанная на аккумуляции тепла системой металлических шаров.

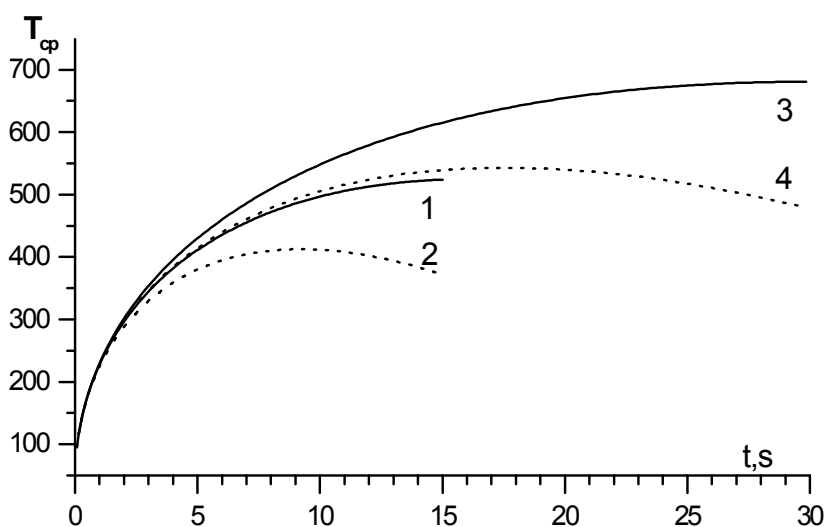


Рис. 1. Изменение средней температуры шара при низкой ( $T_K = 1000^{\circ}\text{C}$  – сплошная линия) и высокой ( $T_K = 500^{\circ}\text{C}$  – пунктир) скоростях охлаждения при  $\Delta t_W = 15$  сек (кривые 1 и 2) и  $\Delta t_W = 30$  сек (3 и 4).



С теплофизической точки зрения процесс работы такой установки барабанного типа в циклическом режиме выглядит следующим образом [1-2]. В секцию установки, заполненной определенным количеством стальных шаров ( $N_B \approx 500$ ), заливается жидкий шлак, который, проникая в межшаровые пространства, охлаждается до отвердевания. После чего отвердевший шлак выгружается. Во время следующего холостого хода секции система металлических шаров охлаждается, как за счет естественного излучения, так и за счет возможного охлаждения водой. После этого расплавленный шлак снова заливается в секцию с шарами и процесс переработки шлака циклически продолжается.

При математическом описании принципов работы такой установки полагалось, что взаимовлиянием шаров друг на друга в насадке можно пренебречь и тогда будем рассматривать процесс теплопереноса в сферически симметричном стальном шаре радиуса  $R$  при следующем начальном ( $T(r, t=0) = T_0$ ;  $T_0$  – начальная температура шара) и несопряженном граничном условии ( $T_0 \neq T_H$ ) в рабочем режиме:

$$T(r = R, t) = T_H - kt, \quad (k = (T_H - T_K) / \Delta t_w),$$

здесь  $T_H$  и  $T_K$  – начальная и конечная температура разливаемого шлака. Полагается, что между жидким шлаком и поверхностью шара – абсолютный контакт, поэтому  $T_H$  и  $T_K$  являются также начальной и конечной температурами поверхности шара,  $\Delta t_w$  – время охлаждения шлака в первой (рабочей) части цикла.

Во время холостого хода:

$$\lambda_m \frac{\partial T(r = R)}{\partial r} = - \left[ \varepsilon \varepsilon_0 \gamma 10^{-8} T^4(r = R, t) + \frac{M_B (c_B (100^\circ \text{C} - T_B) + q_B)}{4\pi R^2 \Delta t_h} \right],$$

здесь  $\lambda_m$  – теплопроводность материала шара,  $\varepsilon$  – степень черноты поверхности шара,  $\varepsilon_0 = 5.67 \cdot 10^{-4} \text{ w/sm}^2$  – коэффициент излучения черного тела,  $\gamma$  – коэффициент учитывающий, что часть лучистой энергии идет на охлаждение поверхности шара, а часть возвращается в результате взаимного облучения шаров в насадке,  $T_B$ ,  $M_B$  – температура и масса охлаждающей воды, приходящейся на один шар,  $c_B$  и  $q_B$  – удельные теплоемкость и теплота испарения воды, соответственно,  $\Delta t_h$  – время холостого хода,  $R = 6 \text{ sm}$ . Заметим, что выбор величины  $R$  производился из следующих соображений. С одной стороны размер шаров должен быть достаточно большим, чтобы межшаровое пространство (пустоты) быстро заполнялось расплавленным шлаком. А с другой стороны, ее размеры не могут быть большими, т.к. необходимо, чтобы за время рабочего цикла шлаковая пора успевала отвердеть полностью. Этим условиям при  $\Delta t_w = 15 \text{ sec}$  отвечает значения  $R \approx 5 - 10 \text{ sm}$ .

Для получения полной информации о поведении температуры в шаровой системе и аккумуляции тепла во время работы установки была разработана специальная компьютерная программа для РС. На рис. 1, 2 представлены

результаты расчетов по этой программе при характерных значениях параметров задачи, соответствующих работе установки в реальных условиях.

Созданная компьютерная модель переработки жидких шлаков позволяет и быстро и наглядно получать необходимую информацию о ходе процесса установки барабанного типа, отрабатывать взаимодействие различных параметров задачи и оптимизировать различные варианты режимов работы, тем самым экономя материальные и временные ресурсы разработчика и технолога.

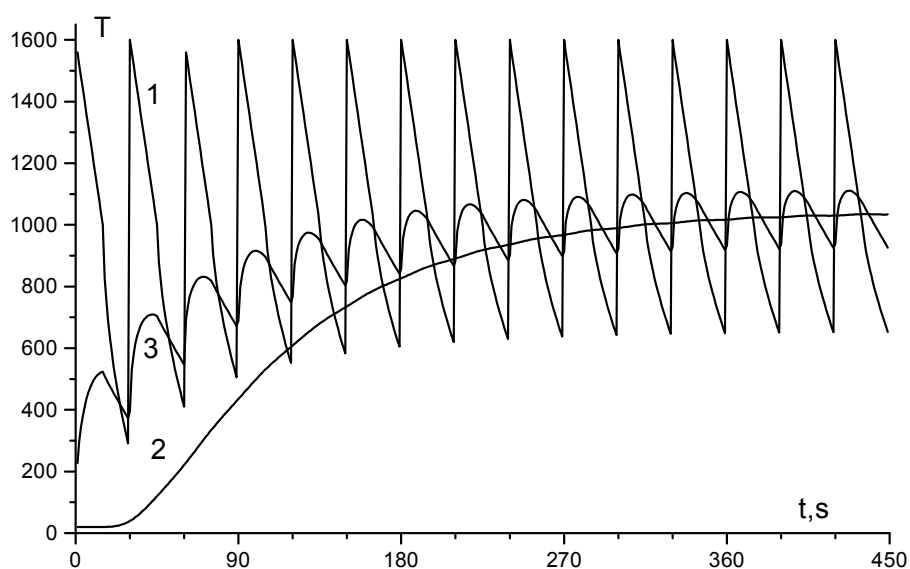


Рис. 2. Кинетика температуры поверхности (1), в центре (2) и средней температуры (кривая 3) шара с учетом излучения и охлаждения водой во время холостого хода.

- [1] Школьник Я.Ш., Шакуров А.Г., Мандель М.З. Новая технология и оборудование для переработки шлаковых расплавов// *Металлург.* 2011. № 10. С. 58 – 60.
- [2] Шакуров А.Г., Школьник Я.Ш., Паршин В.М., Чертов А.Д., Журавлев В.В. Охлаждение и кристаллизация шлакового расплава в межшаровом пространстве// *Сталь.* 2012. № 5. С. 19 – 21.

### Формирование состава наноразмерных поверхностных слоёв медно-никелевого сплава имплантацией ионов $O^+$ и $Ar^+$

В. Л. Воробьёв<sup>1</sup>, Ф. З. Гильмутдинов<sup>1</sup>, П. В. Быков<sup>1</sup>, В. Я. Баянкин<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Физико-технический институт УрО РАН, 426000, Россия, г. Ижевск, ул. Кирова, 132

Формирование химического и фазового составов, атомной и локальной атомной структур поверхностных слоёв металлических материалов, в том числе

наноразмерных, с улучшенными механическими и эксплуатационными свойствами различными физическими или химическими методами, в частности ионной имплантацией, относятся к одному из направлений современной науки и техники [1-2]. Несмотря на исследования в этом направлении до сих пор остаются не выясненными процессы формирования этих слоёв, структурные механизмы их реализации и природа изменения различных свойств металлов и сплавов в результате ионного облучения.

В связи с этим, целью данной работы являлось сравнительные исследования формирования химического состава медно-никелевого сплава с соотношением компонентов 50/50 имплантацией ионов  $O^+$ ,  $Ag^+$  и поочерёдной имплантацией ионов  $Ag^+$  и  $O^+$  в импульсно-периодическом режиме. Выбор медно-никелевого сплава обусловлен тем, что данный сплав, с одной стороны, можно рассматривать как модельный сплав, а, с другой стороны, медно-никелевые сплавы находят широкое применение в различных отраслях современной промышленности, в частности, в судостроении [3]. В качестве имплантируемых элементов выбраны ионы  $O^+$  и  $Ag^+$ , как ионы химической и инертной природы, соответственно.

В ходе исследований выявлено накопление и формирование концентрационного профиля распределения кислорода с максимумом концентрации на поверхности 55 ат.% с последующим монотонным снижением с глубиной и кардинально отличающиеся концентрационные профили распределений компонентов данного сплава в наноразмерных поверхностных слоях после имплантации ионов  $O^+$  и  $Ag^+$ . Показано, что формирование химического состава наноразмерных поверхностных слоёв медно-никелевого сплава имплантацией ионов  $O^+$  определяется не столько процессами физической природы, всегда сопровождающими облучение, сколько химической активностью атомов кислорода к компонентам данного сплава.

- [1] А. Д. Погребняк, В. М. Береснев и др. Свойства нанокompозитных нитридных покрытий // ФИП. 2011. Т. 9. №4. С. 284 – 321.
- [2] И. А. Курзина, И. А. Божко, Н. А. Попова и др. Особенности формирования оксидных фаз в условиях ионного облучения титановых сплавов // Известия РАН. Серия физическая. 2013. Т. 77. №9. с. 1271 – 1275.
- [3] Воскобойников В.Г. и др. Общая металлургия. 6-изд., перераб. и доп. // М.: ИКЦ «Академкнига». 2005. 768 с.

**Формирование поверхностных легированных слоев  
самораспространяющимся высокотемпературным синтезом на отливках из  
железоуглеродистых сплавов**

В. Б. Дементьев<sup>1</sup>, П. Г. Овчаренко<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Институт механики УрО РАН, 426067, г. Ижевск, ул. Т. Барамзиной, 34.

В условиях современного литейного производства разработка эффективных способов получения отливок, обладающих улучшенными эксплуатационными характеристиками, является одной из актуальных задач. Формирование специальных свойств отливок может осуществляться при воздействии как на весь объем расплава (введение дисперсных добавок, объемное легирование, ультразвуковое воздействие и др.), так и на отдельные участки поверхности путем нанесения модифицирующих и легирующих добавок на стенки литейных форм. Технология изготовления отливок литьем по газифицируемым моделям (ЛГМ), наряду с высокой точностью отливок, позволяет производить поверхностное легирование, поскольку модели в данном способе удаляются непосредственно при их заливке расплавом, что обеспечивает контакт легирующих композиций (ЛК), нанесенных на стенки модели из пенополистирола с заливаемым расплавом. Знание особенностей взаимодействия ЛК с расплавом позволит обеспечить формирование необходимых по составу и свойствам поверхностных слоев на отливках.

Формирование легированного слоя на поверхности отливок методом ЛГМ осуществляется при взаимодействии ЛК, нанесенных на модели из пенополистирола (литейные формы), с заливаемым расплавом в процессе изготовления отливок. Для образования в поверхностном слое отливок боридов и карбидов титана методом самораспространяющегося высокотемпературного синтеза (СВС), в качестве компонентов ЛК предложены составы, содержащие титан, ферротитан (70% Ti) с добавками аморфного бора и карбида бора. ЛК готовили путем смешивания порошкообразных компонентов, фракцией 0,1 ÷ 0,3 мм, с клеевым связующим, после чего данные составы наносили на поверхность моделей, слоем 2 ÷ 3 мм. Составы ЛК готовили с учетом стехиометрии реакции образования боридов титана (TiB<sub>2</sub>), в случае систем титан – аморфный бор, ферротитан – аморфный бор, и боридов (TiB<sub>2</sub>) и карбидов титана (TiC) – в случае систем, содержащих карбид бора. Модели, с нанесенным слоем ЛК, собирали в модельные блоки путем крепления элементов литниково-питающей системы, окрашивали противопопригарным покрытием с последующей его сушкой. Готовые модельные блоки помещали в опоку, засыпали сухим кварцевым песком, производили герметизацию, вакуумирование и заливку железоуглеродистыми расплавами. В качестве железоуглеродистых расплавов применяли сталь 40 и серый чугун СЧ 15, заливку модельных блоков осуществляли расплавом с температурой 1490 ÷ 1520° С.

Полученные отливки содержали на поверхности легированный слой, который по составу, структуре и твердости значительно отличался от основного металла. ЛК состава титан – аморфный бор способствует формированию легированного слоя, содержащего боридные и нитридные составляющие титана, что определяет его высокую твердость  $954 \div 1017 \text{ HV}_{0,05}$ . Композиция титан – карбид бора, наряду с указанными фазами, дополнительно содержит карбидные и карбонитридные составляющие титана, что также увеличивает твердость легированного слоя  $897 \div 1163 \text{ HV}_{0,05}$ . Применение ЛК, содержащих ферротитан, дополнительно обеспечивает получение в легированном слое карбидов, боридов и нитридов железа, не снижая при этом твердости слоя. Структура легированных поверхностных слоев представляет эвтектические и дендритные составляющие, а его высокая твердость обусловлена наличием боридных, карбидных, нитридных составляющих титана и железа. Между легированным слоем и основным металлом располагается переходная зона, включающая структурные составляющие легированного слоя и основного металла, содержащая также бориды и карбиды железа. Твердость в данной области находится в пределах  $642 \div 717 \text{ HV}_{0,05}$ , а глубина составляет  $200 \div 400$  мкм. Наличие переходной зоны свидетельствует о взаимодействии заливаемых расплавов с легирующими составами по границе контакта расплав – ЛК. Структура и твердость основного металла характерны для данных марок железуглеродистых сплавов в литом состоянии (твердость стали 40 составляет  $280 \div 323 \text{ HV}$ , серого чугуна -  $239 \div 291 \text{ HV}$ ).

Полученные результаты показывают, что применение ЛК титан, ферротитан с добавками аморфного бора и карбида бора позволяет получать поверхностно легированные отливки из железуглеродистых сплавов методом ЛГМ. Формирование легированных слоев осуществляется при взаимодействии элементов ЛК по механизму СВС, инициируемого тепловой энергией расплава. Результатом синтеза является получение в легированном слое боридных, карбидных и нитридных составляющих титана, обуславливающих его высокую твердость (в  $2 \div 3$  раза превосходящую твердость основного металла), а взаимодействие ЛК с расплавом формирует переходную зону, обеспечивающую более прочный контакт поверхностного слоя с основным металлом.

**Разработка комплексного базового регламента оценки качества  
макроструктуры непрерывно-литой заготовки (НЛЗ) производства  
ОАО «Ижсталь»**

С. А. Зинченко<sup>1</sup>

<sup>1</sup>ОАО «Ижсталь», 426006 Россия, г. Ижевск, ул. Новоажимова, 6

На ОАО «Ижсталь» введена в эксплуатацию машина непрерывного литья заготовок (МНЛЗ) радиального типа. Машина предназначена для получения

непрерывно-литых заготовок (НЛЗ) сечением 125x125 и 140x180 мм. МНЛЗ имеет следующие основные технические характеристики. Технологический радиус – 7 м; радиус разгиба – 13 м; количество ручьев – 3; расстояние между осями ручьев – 1300 мм; вместимость стальной ковша – 40 т; вместимость промковша – 14,5 т; Отливка возможна как открытой струей с использованием системы MNC и стаканов-дозаторов, так и закрытой струей с использованием стопорного механизма SM-3 с аварийным шиберным затвором EG 115. Для перемешивания металла в кристаллизаторе и в конце зоны затвердевания предусмотрено электромагнитное перемешивание. Для вытягивания и выпрямления заготовки используется пятивалковая тянущее-правильная клеть, диапазон скоростей вытягивания 0,7 – 4,0 м/мин.; газокислородная резка заготовки на длины 4 – 12 м; маркировочная машина на передаточном рольганге. МНЛЗ оснащена тремя водоохлаждаемыми кристаллизаторами с медными конусными гильзами длиной 1000 мм. Конструкция кристаллизатора включает «рубашку» вокруг гильзы, внешний корпус и фланцы. На нижнем фланце установлены опорные ролики. Внутренняя поверхность гильз имеет хромовое покрытие. Внешний корпус кристаллизатора и «рубашка» изготовлены из коррозионной стали. Зазор между гильзой и «рубашкой» кристаллизатора составляет 4 мм. В процессе разлива кристаллизаторы совершают возвратно-поступательное движение (качание). Амплитуда и частота качания кристаллизаторов регулируется автоматически в зависимости от скорости вытягивания заготовок. Охлаждение кристаллизаторов обеспечивается водой, протекающей в зазоре между гильзой и «рубашкой». Поддержание уровня металла в кристаллизаторе производят с помощью автоматической системы регулирования: при разливе открытой струей – изменением диаметра калибровочного отверстия сменного стаканчика и изменением уровня металла в ковше; при разливе закрытой струей – изменением скорости вытягивания заготовки. Вторичное охлаждение заготовки производят с помощью трехсекционной системы круглофакельных форсунок.

Марочный сортамент разливаемой на МНЛЗ стали разделен на 11 групп: низкоуглеродистая; перитектическая; Ni-Cr-Mo-жаропрочная; Cr-V-Ti-V-жаропрочная; среднеуглеродистая; Ni-Cr-Mo-улучшаемая; Cr-V-Ti-V-улучшаемая; высокоуглеродистая; пружинная; подшипниковая; повышенной обрабатываемости резанием; коррозионно-стойкая мартенситная; коррозионно-стойкая ферритная. В каждую группу включены марки стали, имеющие одинаковое поведение при разливе и, соответственно, требующие одинаковых настроек оборудования.

Контроль поверхности литых заготовок проводится по ОСТ 3-3163-86 [1]. Поверхность годных заготовок не должна иметь трещин, газовых пузырей, заворотов корки, поясов, крупных шлаковых и неметаллических включений.

В процессе освоения производства непрерывно-литой стали разработана общезаводская методика оценки макроструктуры НЛЗ. Контроль макроструктуры литых заготовок осуществляется на основе ОСТ14-1-235-91 [2].

Методика включает выявление и оценку следующих параметров макроструктуры:

- центральная (осевая) пористость (ЦП);
- осевая ликвация (ОЛ);
- краевое точечное загрязнение с фиксацией расстояния от поверхности НЛЗ (КТЗ);
- светлая полоска (контур) (СП);
- ликвационные полосы и трещины (ЛПТ): по сечению, угловые, осевые.

Причинами образования центральной пористости являются специфические условия формирования непрерывно-литого слитка, связанные с образованием относительно глубокой лунки жидкого металла. В зависимости от величины и скорости усадки металла в осевой зоне, а это, в свою очередь, определяется маркой стали, скоростью разливки, интенсивностью вторичного охлаждения, размерами сечения заготовки и рядом других факторов, усадочные полости приобретают различную форму и размеры. Повышенная температура и скорость разливки способствуют развитию центральной пористости, так как при этом увеличивается длина жидкой лунки металла. Наибольшее развитие явление центральной пористости получает при отливке заготовок малого сечения с высокой скоростью. Она также имеет тенденцию к увеличению при разливке высокоуглеродистых марок стали [3].

Осевая ликвация обусловлена двумя факторами: ликвационным обогащением центральных зон примесями и усадкой осевой зоны при затвердевании. Скорость разливки не оказывает прямого влияния на величину осевой ликвации в заготовках (за исключением случаев, когда возникают нарушения геометрической формы слитка). Влияние интенсивности вторичного охлаждения заготовок также носит ограниченный характер, так как при толстой корке охлаждение воздействует преимущественно на наружную поверхность слитка.

Краевое точечное загрязнение проявляется в виде точечных скоплений ликватов (в основном сульфидов и оксидов) по сечению НЛЗ и определяется величиной точек и плотностью их расположения. На загрязненность стали неметаллическими включениями могут оказывать влияние точность и быстрота выполнения технологических операций в процессе разливки стали на МНЛЗ: наполнение промежуточного ковша металлом; количество шлака, попадающего из стальной ковша в промковш; минимизация уровня падения стали в промковше при замене стальной ковша и т.п. Скопления шлаковых и неметаллических включений в НЛЗ обусловлены, прежде всего, всплыванием и коагуляцией неметаллических включений в кристаллизаторе, а также захватом частиц шлака непосредственно с зеркала металла вследствие всплесков и конвективных потоков.

Подкорковые пузыри образуются в результате скачкообразного снижения растворимости газов (кислорода, водорода, азота) при кристаллизации стали. Возникновение подкорковых пузырей в НЛЗ чаще всего связывают с

недостаточной степенью раскисления стали. К образованию газовых пузырей также может привести повышенное содержание влаги в смазке кристаллизатора, завороты окисленной корки слитка, прожигания дозатора промковша. Наличие подкорковых пузырей относят к недопустимым дефектам НЛЗ.

#### **Выводы:**

На основе анализа макроструктуры темплетов 1526 плавок разработан комплексный базовый регламент оценки качества макроструктуры НЛЗ с обоснованными параметрами дефектности (таблица).

- [1] ОСТ 3-3163-86. Слитки и заготовки стальные. Общие технические условия.
- [2] ОСТ 14-1-235-91. Сталь. Метод контроля макроструктуры непрерывно-литой заготовки для производства сортового проката и трубных заготовок.
- [3] Дефекты стали. Справ. Изд. // Под ред. Новокщеновой С.М., Виноград М.И. – М.: Металлургия. – 1984. – С. 35 – 43.

### **Особенности кристаллизации аустенитно-ферритной стали Св-08Х20Н9Г7Т после лазерного оплавления**

С. А. Зинченко<sup>1</sup>

<sup>1</sup>ОАО «Ижсталь», 426006 Россия, г. Ижевск, ул. Новоажимова, 6

Стали аустенитного и аустенитно-ферритного класса могут отличаться типом кристаллизации, то есть, какая из фаз – аустенит или феррит – кристаллизуется первой [1]. Информация о способе кристаллизации имеет важное значение, так как растрескивание при кристаллизации, высокотемпературная пластичность, образование неметаллических включений, безусловно, в той или иной степени определяется типом кристаллизации стали [2]. Тип кристаллизации зависит главным образом от химического состава стали, точнее, от соотношения  $(C/Ni)_{eq}$  [3]. Влияние условий кристаллизации имеет второстепенное значение. Этот вывод сделан на основе изучения кристаллизации аустенитных сталей при литье в изложницу, опоку, непрерывной разливке, сварке, то есть при медленных способах кристаллизации. Скорость же охлаждения после лазерного нагрева существенно (на несколько порядков) превосходит скорости охлаждения при традиционных способах кристаллизации.

В работе приводятся результаты исследования влияния лазерного оплавления на структуру, фазовый состав и свойства обработанного поверхностного слоя образцов аустенитно-ферритной стали Св-08Х20Н9Г7Т. В исходном состоянии фазовый состав стали Св-08Х20Н9Г7Т состоит из аустенита и ~ 15%  $\delta$ -феррита вермикулярной морфологии.

Образцы облучались единичными импульсами, а также проводилась двукратная и трехкратная обработка во взаимно перпендикулярных



направлениях. Был подобран режим облучения, обеспечивающий равномерное оплавление поверхностного слоя на глубину до 200 мкм. Между оплавленной зоной и основой наблюдается отчетливая граница раздела. Зона термического влияния отсутствует. В результате лазерного оплавления не происходит изменения микротвердости стали. Исходное состояние (литое, горячедеформированное) не влияет на образующуюся структуру. Металлографически зона оплавления представляет собой однофазную область. Фазовый анализ, проведенный рентгеноструктурным и вихретоковым методами, позволил идентифицировать образовавшуюся фазу как феррит.

Обнаруженный факт качественного изменения фазового состава (структура, содержащая ~ 85% аустенита, трансформируется в однофазную ферритную) интерпретирован на основе определения типа кристаллизации стали [4]. В исходном литом состоянии феррит стали Св-08Х20Н9Г7Т имеет вермикулярную морфологию, что может являться результатом кристаллизации как с первичным ферритом, так и с первичным аустенитом. Анализ концентрационных профилей показывает, что концентрация никеля минимальна в феррите и в областях аустенита, примыкающих к ферриту, и возрастает до максимума в середине аустенитных зерен. Это свидетельствует о кристаллизации стали с первичным ферритом. Поэтому наблюдаемая смена фазового состава после лазерного оплавления, очевидно, обусловлена подавлением возможной кристаллизации аустенита и последующего превращения феррита в аустенит в твердом состоянии быстрым охлаждением после лазерного нагрева.

Была проведена оценка изменения высокотемпературной пластичности при температуре начала горячей обработки давлением 1170°C. Структурные изменения при нагреве и деформации контролировали с помощью высокотемпературного микроскопа. Поверхность образцов перед деформацией растяжением в вакууме обрабатывали лазером так, чтобы дорожки двойного оплавления чередовались с участками исходной структуры. В участках с исходной структурой (как литой, так и горячедеформированной) нарушения сплошности возникают на начальной стадии пластического течения (относительное удлинение ~ 10%) на межфазных границах феррит/аустенит. В облученных участках с чисто ферритной структурой разрушение начинается лишь на стадии локализации деформации в шейке образцов (относительное удлинение более 30%). Образующиеся при этом несплошности имеют вид пор, хаотически распределенных по зоне лазерной обработки. Значительный прирост высокотемпературной пластичности в результате лазерной обработки связан, по-видимому, с образованием однофазной ферритной структуры. При этом исчезает наиболее слабое звено аустенитно-ферритных сталей – межфазная граница, на которой зарождаются в первую очередь трещины при горячей деформации.

**Выводы:**

Показано, что лазерным оплавлением по определенным режимам можно добиться качественного изменения фазового состава аустенитно-ферритной стали.

Образующаяся в результате сверхбыстрой кристаллизации после лазерного нагрева стали Св-08Х20Н9Г7Т однофазная ферритная структура обладает ~ на 20% большей в сравнении с исходной аустенитно-ферритной структурой высокотемпературной пластичностью.

- [1] Suutala N. Solidification of austenitic stainless steels. – Acta univ ouluen. – 1983. – N 26. - P. 53-63.
- [2] Зинченко С.А., Титоров Д.Б. Структура и высокотемпературная пластичность аустенитных нержавеющей сталей: Препр. / АН СССР. - Свердловск: УИЦ АН СССР. – 1987. 42 с.
- [3] Suutala N/ Effect of solidification condition on the solidification mode in austenitic stainless steel Weld/. – Metallurgical Transactions. - 1982. – v134. – N 12. – p. 2122-2130.
- [4] Зинченко С.А., Титоров Д.Б. Повышение высокотемпературной пластичности аустенитной коррозионно-стойкой стали лазерной обработкой //Физика и химия обработки материалов. – 1989. - № 4. С. 127-131.

#### **Моделирование электровихревых течений в дуговой печи постоянного тока с охлаждаемым подовым электродом**

О. В. Казак<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Кафедра математической физики, Уральский федеральный университет им. первого Президента России Б. Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия;

Актуальной проблемой в современной теории металлургических печей постоянного тока с подовым электродом является изучение влияния разных факторов на скорость и характер течения расплава металла [1]. Такой тип печей имеет не только экономическую целесообразность, но и относится к экологически чистым технологиям выплавки стали [2].

Перспективной технологией уменьшения негативного воздействия движущегося расплава металла на защитный слой футеровки в непосредственной близости подового электрода металлургических печей является снижение температуры путем охлаждения подового электрода [3-6].

В настоящей работе были смоделированы электромагнитные, тепловые и гидродинамические процессы в расплаве металла в осесимметричной постановке. Максимальная температура локализована вблизи катода, где горит электрическая дуга, на расстоянии порядка радиуса электрода. В распределении температуры имеется радиальный градиент, который приводит к возникновению конвекции в электровихревых течениях. На рис. 1 приведены гидродинамические поля модуля скорости, вектора скорости и линии тока

расплава. Здесь 1 – футеровка, 2 – расплав металла, 3 – электроды, 4 – слой шлака.

Как видно из графиков в расплаве возникает интенсивное вихревое движение. Конвективное движение совпадает по направлению с электровихревым и усиливает его. Вихрь образуется в области подового электрода, как показано на рис. 1, и там имеет максимальную скорость. Поток расплава на оси симметрии восходящий и, достигая верхней границы объема расплава, устремляется вниз. Максимальная скорость вихревого движения наблюдается на оси электродов и достигает 0,5 м/с, что примерно в 1,5 раза больше скорости движения без конвекции [4]. Скорость расплава у торца анода возле футеровки около 0,3 м/с. В области верхнего электрода виден вихрь с обратным направлением вращения создаваемый неравномерным распределением плотности тока в области верхнего электрода.

При наличии конвекции в движение вовлечен весь объем расплава и отсутствуют застойные зоны вблизи края ванны печи, как при движении расплава без конвективных потоков. Кроме того, уменьшился вихрь в области верхнего электрода. Основной вклад в вихревое движение расплава вносит электромагнитная сила Лоренца. Наличие конвекции приводит к увеличению максимальной скорости вихревого движения расплава на 1/3 по сравнению со скоростью электровихревого движения только под действием силы Лоренца.

Для верификации полученных результатов аналогичные расчеты были проведены в двух пакетах ANSYS и COMSOL. Сравнение результатов полученных разными методами и пакетами показало расхождение результатов порядка 3 %.

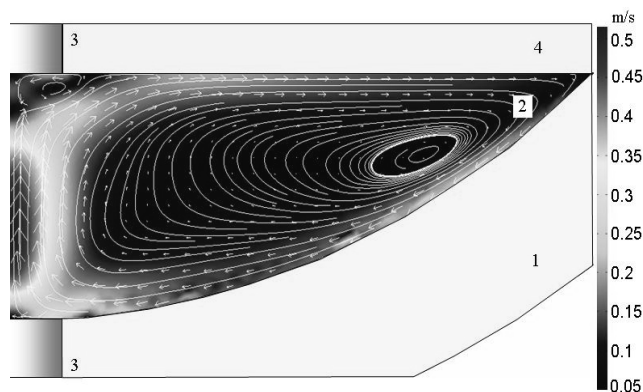


Рис. 1.

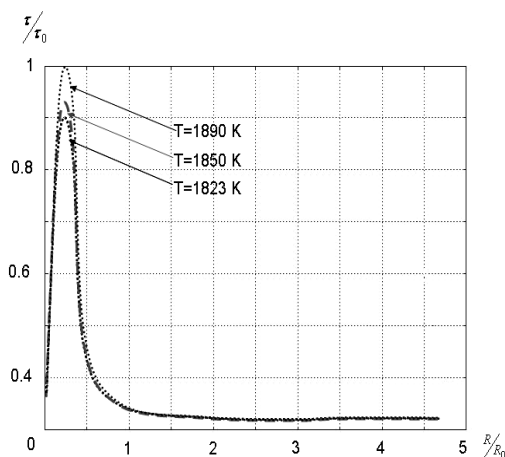


Рис. 2.

На рис. 2 приведено сравнение сдвигового напряжения на поверхности футеровки вокруг подового электрода для разной температуры подового электрода. График величины сдвигового напряжения приведен в безразмерных координатах. В качестве масштабов сдвигового напряжения взято характерное значение этой величины при рабочей температуре ( $\tau_0 = 120$  Па), от расстояния, выраженного в радиусах электрода ( $R = 0,25$  м). Как видно, понижение температуры подового электрода существенно влияет на величину сдвигового

напряжения в непосредственной близости подового электрода. Основной причиной этого является уменьшение скорости движения расплава в непосредственной близости подового электрода за счет увеличения вязкости расплава при снижении температуры. Так, при понижении температуры подового электрода до температуры плавления стали, скорость течения на уровне сдвигового подслоя снижается на 20 %, а величина сдвигового напряжения на 15 %.

В работе показана возможность снижения величины сдвигового напряжения, а следовательно и износа футеровки, в непосредственной близости подового электрода на 15 % путем снижения температуры подового электрода.

- [1] Зайцев В.А., Медовар Л.Б. Подовые электроды дуговых печей постоянного тока // Современная электрометаллургия / 2009, N 2. С. 3-8
- [2] Нехамин С.М., Крутянский М.М., Филиппов А.К. Дуговые печи постоянного тока – высокоэффективные плавильные агрегаты // Литейщик России / 2005, N 5. С. 25-26
- [3] Kazak O., Semko O. Modelling Vortex Fields in Metal Smelting Furnaces // The Inter-national Journal of Multiphysics / 2010, Volume 4, Number 4. P. 351-358
- [4] Kazak O. Modelling magnetohydrodynamic processes in DC arc steel making furnaces with bottom electrodes // Ironmaking and Steelmaking / 2011, Volume 38, Number 5. P. 353-358.
- [5] Kazak O. Modelling of vortex flows in DC electric arc furnace with different bottom electrode positions // Metallurgical and Materials Transactions B / 2013, Vol. 44, No 5. P. 1243-1250.
- [6] Kazak O. Numerical modelling of electrovortex and heat flows in DC electric arc furnace with cooling bottom electrode // Heat and mass transfer / 2013, DOI: 10.1007/s00231-013-1265-1.

### **Влияние температуры расплава на процессы кристаллизации в перитектических системах**

Л. В. Камаева<sup>1</sup>, И. В. Стерхова<sup>1</sup>, В. И. Ладьянов<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Физико-технический институт УрО, 324000 Россия, г. Ижевск, ул. Кирова, 132

Системы сплавов с эвтектиками, одна из фаз которой образуется по перитектической реакции, являются основой многих современных материалов с уникальными механическими и магнитными свойствами. К ним относятся объемно-аморфные сплавы на основе железа, постоянные магниты системы Fe-Nd-B, сплавы с квазикристаллическими фазами. Однако низкая скорость фазообразования при перитектическом превращении приводит к возможности

неравновесной кристаллизации даже при маленьких скоростях охлаждения ( $<1\text{K/s}$ ), в результате которой образуются неравновесные фазы ухудшающие свойства материалов. Поэтому важно исследовать влияние различных факторов на особенности неравновесной кристаллизации при перетектическом превращении.

В работе методами дифференциально-термического анализа, металлографии и рентгеноструктурного анализа изучены особенности кристаллизации расплавов Fe-P, Cr-C, Fe-Nd-B, Al-Cu-Fe вблизи перитектической точки при скоростях охлаждения  $1-100\text{K/s}$ . Исследования проводили при различных температурах перегрева расплава над ликвидусом.

Проведенные исследования показывают, что при небольших скоростях охлаждения ( $\sim 1\text{K/s}$ ) температура расплава оказывает существенное влияние на процесс кристаллизации. При охлаждении от температур, не превышающих температуру ликвидуса более чем на  $50-100\text{K}$ , сплавы затвердевают в условиях небольших переохлаждений согласно диаграмме состояния. При увеличении температуры расплава характер затвердевания резко изменяется, в условиях больших переохлаждений (более  $80\text{K}$ ) протекает неравновесная кристаллизация с образованием неравновесных эвтектик в системах Fe-P, Cr-C и Fe-Nd-B и без образования икосаэдрической квазикристаллической  $i$ -фазы в системе Al-Cu-Fe. Увеличение скорости охлаждения расширяет температурную область, при охлаждении из которой образуются равновесные фазы.

Таким образом, полученные результаты показывают, что образование равновесных фаз в исследованных системах с перетектической реакцией непосредственно из расплава при охлаждении в контейнере со скоростями до  $1\text{K/s}$  наблюдается в узком концентрационном интервале при небольших перегревах над температурой ликвидус.

Работа выполнена по теме НИР № гос. регистрации АААА-А16-116021010084-2 и частичной поддержке проекта Фундаментальных исследований УрО РАН № 15-17-2-9.

### **Исследование микроструктуры образцов литейного сплава на основе $\text{Ni}_3\text{Al}$ , кристаллизованных различными методами**

М. С. Коновалов<sup>1,2</sup>, Г. В. Сапожников<sup>2</sup>

<sup>1</sup>ФГБОУ ВПО «ИжГТУ имени М. Т. Калашникова», 426069, Россия, г. Ижевск, ул. Студенческая, 7

<sup>2</sup>ОАО «Научно-исследовательский институт металлургической технологии», 426010, г. Ижевск, ул. Азина, 2

Актуальной проблемой современной трубной промышленности является повышение жаропрочности оправок, используемых для прошивки металлических прутков (в особенности из коррозионно-стойких сталей) [1, 2].

Одним из основных параметров, определяющих жаропрочные свойства сплавов, является их микроструктура [3, 4]. В литейных сплавах воздействовать на микроструктуру возможно варьированием химического состава, режимами термической обработки отливок, скоростью затвердевания расплава. При этом, наиболее эффективным способом воздействия на микроструктуру изделий, работающих под нагрузкой при высоких температурах (до 1250 °С), например, прошивных оправок, является скорость затвердевания расплава.

В промышленных условиях скорость кристаллизации, зачастую, регулируют методами охлаждения расплава, а именно по средствам применения различных емкостей для затвердевания (изложниц, литейных форм, кристаллизаторов) [3-5]. Такие емкости изготавливают из разных материалов, имеющих различные коэффициенты теплопроводности и теплоемкости. Также в ряде кристаллизаторов применяют водное охлаждение.

Цель настоящей работы заключалась в исследовании микроструктуры образцов литейного сплава на основе Ni<sub>3</sub>Al, кристаллизованных различными методами, для определения оптимального способа получения заготовок прошивных оправок.

В ходе работы было изготовлено три слитка. Слиток № 1 массой 1,45 кг получен выплавкой в открытой индукционной печи СЭЛТ-20С/20 и охлаждением в металлической (Сталь 20) изложнице. Слиток № 2 массой 1,50 кг получен выплавкой в открытой индукционной печи СЭЛТ-20С/20 и охлаждением в керамической (корунд) изложнице. Слиток № 3 массой 1,50 кг получен выплавкой в открытой индукционной печи СЭЛТ-20С/20 электрода с последующим электрошлаковым переплавом в среде аргона (охлаждение в медном водоохлаждаемом кристаллизаторе). Химический состав сплава (Таблица 1) определяли при помощи многоканального оптико-эмиссионного спектрометра ДФС-500, анализатора МЕТЭК-200 и рентгено-флуоресцентного спектрометра α-2000.

Таблица 1

Слиток	Химический состав; мас. %									
	Ni	Al	Mo	W	Ti	Cr	C	S	P	Zr
№ 1	Осн.	8,0	9,22	1,32	1,22	4,73	0,02	0,003	0,005	0,19
№ 2	Осн.	8,0	9,23	1,31	1,21	4,74	0,02	0,003	0,005	0,20
№ 3	Осн.	7,8	9,25	1,32	1,19	4,73	0,02	0,002	0,005	0,18

От верха, середины и низа полученных слитков отбирались образцы и изготавливались поперечные и продольные шлифы. Исследование микроструктуры образцов проводилось при помощи металлографического микроскопа Альтами-МЕТ на шлифах, протравленных в растворе Марбле. Микротвердость измерялась на микротвердомере ПМТ-3.

В результате проведенной работы было установлено, что микроструктура всех образцов состоит из первичных кристаллов ( $\text{Ni}_3(\text{Al}, \text{Ti})$ ), вокруг которых располагается эвтектика ( $\text{Ni}_3(\text{Al}, \text{Ti}) + \text{твердый раствор на основе Ni}$ ). При этом, на образцах от слитков № 1 и № 2 первичные кристаллы расположены равномерно по всей площади поверхности шлифа, а также наблюдаются трещины идущие с наружной поверхности шлифов. На шлифах от слитка № 3 наблюдается строчечное распределение первичных кристаллов, и отсутствуют трещины. Микротвердость первичных кристаллов и эвтектики на всех шлифах одинакова.

Анализ микроструктур образцов литейного сплава на основе  $\text{Ni}_3\text{Al}$ , кристаллизованных различными методами показал, что оптимальный способ получения заготовок прошивных оправок из данного сплава заключается в выплавке в открытой индукционной печи электродов с последующим электрошлаковым переплавом в среде аргона (охлаждение в медном водоохлаждаемом кристаллизаторе).

Работа выполнена при поддержке Фонда содействия развитию малых форм предприятий в научно-технической сфере

- [1] Сазоненко И.О., Земцов В.А., Юрчак А.Н. К вопросу повышения стойкости оправок прошивных станов //Литье и металлургия 4(68), 2012. С. 135 - 138.
- [2] Вавилкин Н.М., Бухмиров В.В. / Прошивная оправка. - М.: МИСиС, 2000.
- [3] Химушин Ф.Ф. Жаропрочные стали и сплавы. 2-е изд. Переработанное. – М.: Металлургия, 1969. 749 с.
- [4] Гуляев А.П. Металловедение. 5-е переработанное издание / Э.М. Щербинина, Г.А. Жегин, Э.А. Кулакова, В.В. Михайлова, Н.И. Шефтель, Ю.И. Королева – М.: Металлургия, 1977. 648 с.
- [5] Сталеплавильное производство. Справочник. Том 1 / под общей редакцией чл.-корр. АН СССР А.М. Самарина – М.: Металлургия, 1964. 527 с.

### **О влиянии жидкой фазы на процессы затвердевания металлических расплавов**

В. И. Ладьянов<sup>1</sup>, Л. В. Камаева<sup>1</sup>, А. Л. Бельтюков<sup>1</sup>, И. В. Стерхова

<sup>1</sup>Физико-технический институт УрО, 324000 Россия, г. Ижевск, ул. Кирова, 132

Быстрое развитие науки и техники постоянно приводит к необходимости создания новых материалов с более высоким уровнем их служебных свойств. Получение металлических сплавов в большинстве технологических процессов так или иначе связано с прохождением через жидкую фазу. В последние годы на стыке фундаментальных и прикладных наук: высокотемпературной теплофизики

,физической химии металлофизики, металлургии сформировалось и интенсивно развивается новое направление в материаловедении, связанное с исследованием особенностей структуры и свойств жидкой фазы и ее влияния на твердое состояние. Для этого требуются надежные экспериментальные данные по теплофизическим свойствам, особенно в высокотемпературной области и глубокое понимание природы жидкого состояния, а также механизмов наблюдаемых в них явлений. В связи со сложностью и неоднозначностью интерпретации прямых дифракционных методов при исследовании особенностей структуры металлических расплавов часто используются косвенные методы, основанные на изучении температурных и концентрационных зависимостей различных свойств, в том числе вязкости как наиболее структурно-чувствительного. Кроме этого, вязкость является важным физико-химическим свойством, которое необходимо при разработке большинства металлургических процессов, связанных с прохождением через жидкую фазу.

В связи с этим в докладе рассмотрены следующие основные вопросы:

1. особенности временных температурных и концентрационных зависимостей вязкости расплавов бинарных систем (Fe, Co,Ni) – (B, P, Si, Cr), Al-(Cu,Fe,Ni,Y), связь с диаграммой фазовых равновесий и проявление при затвердевании;

2. закономерности влияния жидкой фазы на процессы затвердевания многокомпонентных расплавов на основе Fe, Co,Ni, проявляющих различную склонность к объемной аморфизации;

3. проявление структурной наследственности («структурной памяти») при сверхбыстрой закалке, поверхностной и объемной кристаллизации быстрозакаленных сплавов.

Работа выполнена по теме НИР №гос. регистрации АААА–А16–116021010084-2.

### **Алюминобаротермический синтез высокоазотистой стали**

В. И. Ладьянов, Г. А. Дорофеев, Е. В. Кузьминых, А. Н. Лубнин

<sup>1</sup>Физико-технический институт УрО, 324000 Россия, г. Ижевск, ул. Кирова, 132  
E-mail: las@ftiudm.ru

Легиrowание азотом является перспективным направлением в производстве коррозионностойких сталей. В докладе будут представлены результаты исследования синтеза безникелевых аустенитных нержавеющей Cr-N и Cr-Mn-N сталей из порошков оксидов металлов алюминотермическим методом под давлением азота (алюминобаротермия). Стали получали в реакторе самораспространяющегося высокотемпературного синтеза под давлением азота



до 15 МПа. За счет высокой экзотермичности распространение фронта реакции происходит в самоподдерживающемся режиме. Разработана термодинамическая модель алюминотермического восстановления смеси оксидов металлов под высоким давлением азота для установления закономерностей процесса и получения сплава заданного состава. Модель позволила оценить температуру горения шихтовой смеси, ее экзотермичность (удельную теплоту горения), химический состав продуктов алюминотермического синтеза (металла и шлака) в зависимости от состава исходной смеси и давления азота, а также установить характер изменения состава металла при его охлаждении после сгорания шихты. На основе проведенного численного термодинамического анализа сделаны следующие основные выводы: а) Алюминотермические реакции восстановления не идут до конца; б) Увеличение соотношения количеств алюминия и кислорода в составе оксидов в шихте  $Z = m_{Al}/m_O$  обеспечивает возрастание степени восстановления оксидов и полноты раскисления стали, но может привести к загрязнению стали включениями нитрида алюминия; в) Параметр  $Z$  является наиболее существенным параметром процесса, оптимальная величина которого для шихты системы  $Fe_2O_3-Cr_2O_3-Al$  должна находиться в пределах  $Z_{opt} = 0,94-1,04$ , то есть быть несколько меньше стехиометрического отношения  $Z_s = 1,125$ . Выполнена опытная плавка хромистых и хромомарганцевых высокоазотистых сталей алюминотермическим методом под давлением азота, анализ которых показал согласие с результатами моделирования. Слитки в литом состоянии имели структуру азотистого перлита, а после закалки - аустенита.

### Применение методов оптимизации для решения задач затвердевания слитков при непрерывной разливке металла

Ф. В. Недопекин<sup>1</sup>, В. К. Толстых<sup>1</sup>, Н. А. Володин<sup>1</sup>, В. Е. Бодряга<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Донецкий Национальный университет, 83001 ДНР г. Донецк, ул. Университетская, 24

Поле температур  $T(r, z)$  в затвердевающем непрерывном слитке можно описать задачей с эффективными теплофизическими коэффициентами [1]:

$$c\rho V \frac{\partial T}{\partial z} - \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r\lambda \frac{\partial T}{\partial r} \right) = 0, \quad (1)$$

$$\left. \frac{\partial T}{\partial r} \right|_{r=0} = 0; \quad T|_{z=0} = T_0; \quad \lambda_s \left. \frac{\partial T}{\partial r} \right|_{r=R} = -\gamma(T - T_c); \quad \left. \frac{\partial T}{\partial r} \right|_{r=R} = u(z), \quad (2)$$

где  $T_c$  - температура кристаллизатора;  $V$  - скорость литья,  $T_0$  - температура заливаемого в установку металла,  $\gamma$  - коэффициент теплопередачи в кристаллизаторе,  $u(z)$  - отток тепла в зоне вторичного охлаждения (ЗВО),

плотность  $\rho = \rho_L(1-\xi) + \rho_S\xi$ , теплопроводность  $\lambda = \lambda_L(1-\xi) + \lambda_S\xi$ ,  $\xi = 1 - \left(\frac{T_0 - T}{T_0 - T_L}\right)^{\frac{1}{1-k_0}}$  – доля твердой фазы. Теплоёмкость, с учётом теплоты фазового перехода  $W$  при кристаллизации:

$$c = \begin{cases} c_L, & T \geq T_L, \\ c_L(1-\xi) + c_S\xi - W \frac{\partial \xi}{\partial T}, & T_S < T < T_L, \\ c_S, & T < T_S. \end{cases}$$

Увеличение плотности дендритного строения предопределяет более высокие механические свойства литого металла. Следовательно, чтобы добиться оптимального распространения дендритных осей, необходимо минимизировать функционал, характеризующий степень дисперсности дендритной структуры [2]:

$$J_1(u) = \int_0^R \int_0^Z \left( \left( \frac{\partial T}{\partial r} \right)^2 + \left( \frac{\partial T}{\partial z} \right)^2 \right)^{1/2} \Theta(r-r_l) \Theta(r-r_s) r dr dz. \quad (3)$$

Минимизация уровня дисперсности дендритной структуры в форме функционала  $J_2$  осуществлялась совместно с реализацией требований минимальности градиентов температуры в твердой части металла и объема жидкой лунки. При этом учитывалось ограничение на температуру выхода металла из зоны вторичного охлаждения, которая не должна превышать  $T_{\max} = 950^\circ\text{C}$  в виде штрафного функционала  $J_2 = \int_0^R I_F dr$ ,  $I_F = (T - T_{\max})^2$  если  $T > T_{\max}$ , иначе  $I_F = 0$ .

Таким образом, минимизируемый функционал принимает вид [3]:

$$J(u) = \chi_1 J_2 + \int_0^R \int_0^Z \left( \frac{\partial T}{\partial r} \right)^2 \Theta(r-r_s) r dr dz + \chi_2 \int_0^R \int_0^Z \Theta(r-r_l) \Theta(r-r_s) r dr dz + \chi_3 J_F, \quad (4)$$

где  $\chi_i$  ( $i=1...3$ ) - весовые коэффициенты.

Увеличение точности моделирования процессов затвердевания слитка достигается посредством идентификации эффективной теплопроводности  $a = c\rho/\lambda$  в виде полинома [4]:

$$a(T) = a_0 + a_1(T - T_L) \Theta(r-r_s) + [d_2(T - T_L)^2 + a_2(T - T_L)^3] \Theta(r_s - r) \Theta(r - r_L), \quad (5)$$

при этом решение задачи сводится к параметрической идентификации вектора  $A = \{a_0, a_1, a_2\}$ .

Для решения задач параметрической идентификации и оптимального управления применен прямой экстремальный подход, основанный на непосредственной минимизации функционала  $J$  методом с регулируемым направлением спуска, предложенный Толстых В.К. [1]:

$$w^{k+1} = w^k - b^k \alpha^k \nabla J^k, \quad (6)$$

где  $w = u(z)$  либо  $w = a(T)$ .

Задачи идентификация теплопроводности и минимизации термических напряжений и степени дисперсности дендритной структуры решены с использованием методов оптимизации.

- [1] Огурцов А.П., Недопекин Ф.В., Толстых В.К., Володин Н.А. Прямая оптимизация теплофизических процессов. - Донецк: «Юго-восток», 1997.-150с.
- [2] Соболев В.В., Трефилов П.М. Теплофизика затвердевания металла при непрерывном литье. М.: Металлургия, 1988.-160с.
- [3] Володин Н.А., Недопекин Ф.В., Толстых В.К., Черноног В.Е. Минимизация степени дисперсности в непрерывном слитке при ограничении на температуру // Промышленная теплотехника (Измерение, контроль, автоматизация тепловых процессов), 2003. №1, том 25, С.88-91.
- [4] Толстых В.К. Идентификация эффективного коэффициента температуропроводности в непрерывном слитке/ В.К. Толстых, Ф.В. Недопекин, В.Е. Бодряга // X-тая национальная конференция по металлургии, Болгария г. София, 28-31 май, 2007 г. ISBN 978-954-92052-1-3

**Влияние тепловых потоков на формирование контактной зоны между установочными элементами и заливаемым расплавом при изготовлении композиционных отливок**

П. Г. Овчаренко<sup>1</sup>, К. Э. Чекмышев<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Институт механики УрО РАН, 426067, г. Ижевск, ул. Т. Барамзиной,34.

Композиционные материалы, сочетающие в себе комплекс характеристик, которыми не может обладать каждый из элементов, входящих в их состав отдельно, нашли широкое применение в различных отраслях промышленности. Существует значительное разнообразие, как материалов данного класса, так и способов их получения.

Изготовление литых композиционных материалов сводится, в основном, к фиксации в литейных формах установочных элементов (УЭ) и объединению их между собой матричным (основным) металлом в процессе заливки форм. УЭ, изготовленные из различных материалов и наиболее оптимальными способами, обладают определенными свойствами (коррозионная и химическая стойкость, высокая твердость, износостойкость, прочность и др.), которые, сохраняясь в отливках, обеспечивают получения комплекса свойств. Композиционные отливки по своей природе гетерогенны и их свойства во многом определяются параметрами контактной зоны (КЗ), образующейся между УЭ и заливаемым расплавом.

Технология литья по газифицируемым моделям (ЛГМ) позволяет изготавливать композиционные отливки путем фиксации на поверхности, либо в объеме модели из пенополистирола УЭ с последующей их заливкой металлическими расплавами. В процессе заливки материал модели (пенополистирол) газифицируется, создавая восстановительную атмосферу,

препятствующую окислению поверхности УЭ и расплава, обеспечивая оптимальные условия для формирования контактной зоны. На параметры КЗ влияет материал УЭ, характеристики расплава (состав, температура) и положение УЭ в отливке [1].

Формирование КЗ является сложным процессом включающим растворение и массоперенос, а ее параметры - количественным показателем взаимодействия УЭ и расплава. Прочность би-металлического соединения также будет зависеть от характеристик КЗ.

В работе представлены исследования системы УЭ (сталь 08Х18Н9Т) – серый чугун СЧ 15 с различным положением УЭ в отливке (на поверхности и в объеме). Показано влияние теплового потока на формирование КЗ в зависимости от температуры расплава (1350° С и 1500° С) и местоположения УЭ. Построена нестационарная математическая модель процесса взаимодействия и затвердевания двух металлов, один из которых находится в твёрдом состоянии (УЭ), а другой в жидком (расплав). В связи с серьезными вычислительными трудностями при моделировании межфазного взаимодействия при наличии нескольких межфазных границ взаимодействие двух металлов рассматривается в одномерном случае [2]. Основой математической модели являются дифференциальные уравнения Био-Фурье и уравнение диффузии.

Получены параметры КЗ в отливках между УЭ и чугуном в зависимости от температуры расплава и положения УЭ. По данным значениям оценены характеристики КЗ би-металлического соединения (наличие дефектов, плотность контакта).

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ № 16-38-00348

[1] Шуляк В.С. Литье по газифицируемым моделям. – СПб.: НПО «Профессионал», 2007. – 408 с.

[2] Жигунов В.В., Лавит А.И. Математическое моделирование изотермических диффузионных процессов в двойных многофазных системах // Металлы. – М.: ООО НПП «ЭЛИЗ», 2015. – №4. – С. 30-37.

### **Вязкость расплавов аморфизирующейся системы Со-В**

Н. В. Олянина<sup>1</sup>, А. Л. Бельтюков<sup>1</sup>, В. И. Ладьянов<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Физико-технический институт УрО РАН, 426000 Россия, г. Ижевск, ул. Кирова, 132

Вязкость является важным физико-химическим свойством, необходимым при разработке большинства металлургических процессов, связанных с прохождением через жидкую фазу. В работе проведены исследования вязкости

расплавов системы Co-B, которая является базовой для получения магнитомягких аморфных сплавов.

Методом крутильных колебаний исследованы температурные и концентрационные зависимости кинематической вязкости расплавов системы Co-B с содержанием бора до 50 ат.%. Исследования были проведены на автоматизированной установке [1] в защитной атмосфере гелия в тиглях из  $Al_2O_3$ . Температурные зависимости вязкости измеряли в режиме нагрева от температуры плавления до  $1700^\circ C$  и последующего охлаждения. Ранее на примере расплавов этой системы [2, 3] было показано существенное влияние поверхности расплава на результаты измерения вязкости. На поверхности расплава может формироваться вязкая пленка, которая выполняет роль второй торцевой поверхности трения. Наблюдение наличия такой пленки в ходе эксперимента практически невозможно, поэтому при обработке опытных данных выбор граничных условий на поверхности расплава является неоднозначным. Неучет при расчете вязкости возможности образования пленки и ее изменения в ходе опыта может привести к неправильным абсолютным значениям вязкости и аномалии на ее температурной зависимости. Поэтому измерения проводили с крышкой на поверхности расплава. Конструкция крышки позволяет ей плотно прилегать к поверхности расплава и двигаться вместе с тиглем при возникновении крутильных колебаний [3].

Температурные зависимости вязкости расплавов Co-B с содержанием бора до 50 ат.% имеют монотонный характер и хорошо аппроксимируются уравнением Аррениуса. Концентрационная зависимость вязкости исследуемой бинарной системы является немонотонной. В области малых добавок бора на концентрационной зависимости вязкости наблюдается минимум при 0.25 ат.% В. Следует отметить, что наблюдаемый эффект находится на границе погрешности эксперимента. Минимум на концентрационной зависимости близок к максимальной растворимости бора в твердом кобальте [4]. При содержании бора до 15 ат.% и в интервале от 36 до 50 ат.% вязкость расплава практически не зависит от концентрации бора. В интервале концентраций от 20 до 36 ат.% бора наблюдается интенсивный рост значений вязкости расплава, который, предположительно, обусловлен увеличением в расплаве доли атомных микрогруппировок, состоящих из атомов Co и B. С увеличением температуры характер концентрационной зависимости не изменяется, но уменьшается интенсивность изменения вязкости.

Для расчета вязкости существует ряд достаточно простых уравнений (моделей), основанных на термодинамических данных [5]. Для практического применения этих уравнений необходима их апробация на модельных системах. В работе проведены вычисления концентрационной зависимости вязкости расплавов системы Co-B с использованием уравнений Мелвина-Хьюза, Iida-Ueda-Morita, Kucharski, Козлова-Романова-Петрова, Hirai, Sichen-Bygden-Seetharaman, Chhabra, Kaptay, Sato, Schick-Brillo-Egry-Hallstedt, Gąsior-Moser, Hirai, Budai-Benkő-Kaptay. Сравнение расчетных концентрационных

зависимостей вязкости расплавов системы Co-V показало, что наилучшее совпадение с экспериментом дают уравнения Kaptay [6], Козлова-Романова-Петрова [7] и Budai-Benkö-Kaptay [8].

Работа выполнена при финансовой поддержке Программы фундаментальных исследований УрО РАН, проект № 15-6-2-40, и гранта РФФИ, проект № 16-33-00622 мол\_а.

- [1] Бельтюков А.Л., Ладьянов В.И. Автоматизированная установка для определения кинематической вязкости металлических расплавов // ПТЭ, 2008. № 2. С. 155-161.
- [2] Бельтюков А.Л., Ладьянов В.И., Олянина Н.В. Об особенностях измерения вязкости металлических расплавов методом крутильных колебаний // Расплавы, 2009. № 6. С. 19-27.
- [3] Олянина Н.В., Бельтюков А.Л., Гончаров О.Ю., Ладьянов В.И. Влияние поверхностной пленки на результаты измерения вязкости расплава  $Co_{83}V_{17}$  методом крутильных колебаний // Расплавы, 2012. № 2. С. 83-90.
- [4] Диаграммы состояния двойных металлических систем: Справочник: В 3т.: Т.1 / Под общ. ред. Н.П. Лякишева. - М.: Машиностроение, 1996. – 992 с.
- [5] Gąsior W. Viscosity modeling of binary alloys: comparative studies// CALPHAD, 2014. V. 44. P. 119-128.
- [6] Kaptay G. A new equation to estimate the concentration dependence of the viscosity of liquid metallic alloys from the heat of mixing data // Proceedings of microCAD 2003 conference, Section Metallurgy / University of Miskolc, Hungary, 2003. P. 23-28.
- [7] Козлов Л.Я., Романов Л.М., Петров Н.Н. Прогнозирование вязкости многокомпонентных металлических расплавов // Изв. вуз. Черная металлургия, 1983. № 3. С. 7-11.
- [8] Budai I., Benkő M.Z., Kaptay G. Comparoson of different theoretical models to experimental data on viscosity of binary liquid alloys // Mater. Sci. Forum, 2007. V. 537-538. P. 489-496.

### Температурные зависимости вязкости расплавов Co-Si

Н. В. Олянина<sup>1</sup>, А. Л. Бельтюков<sup>1</sup>, В. И. Ладьянов<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Физико-технический институт УрО РАН, 426000 Россия, г. Ижевск, ул. Кирова, 132

Вязкость является одним из наиболее структурно-чувствительных свойств жидких сплавов. В связи с этим исследования температурных и концентрационных зависимостей вязкости часто используется в качестве

косвенного метода при изучении особенностей структурного состояния расплава. Хотя система Co-Si является базовой для получения магнитомягких аморфных сплавов, данные о ее физико-химических свойствах в жидком состоянии имеют единичный характер. Поэтому в данной работе проведены исследования температурной зависимости вязкости расплавов системы Co-Si с содержанием кремния от 33,3 до 54 ат. %.

Исследования вязкости проводили методом крутильных колебаний на автоматизированной установке [1] в защитной атмосфере гелия в тиглях из  $Al_2O_3$ . Температурные зависимости вязкости измеряли в режиме нагрева от температуры плавления до  $1700^\circ C$  и последующего охлаждения. Ранее на примере жидкого кобальта [2] и расплавов систем Co-B [3, 4], Fe-B [5] и Fe-Cr [6] было показано существенное влияние на результаты измерения вязкости пленочных эффектов и явлений смачивания. При этом было показано [7], что для исключения влияния этих эффектов измерения вязкости следует проводить в условиях эксперимента, при которых исследуемый расплав находится в замкнутом объеме при полном смачивании внутренних стенок тигля. На поверхности расплава может формироваться вязкая пленка, которая выполняет роль второй торцевой поверхности трения. Наблюдение наличия такой пленки в ходе эксперимента практически невозможно, поэтому при обработке опытных данных выбор граничных условий на поверхности расплава является неоднозначным. Не учет при расчете вязкости возможности образования пленки и ее изменения в ходе опыта может привести к неправильным абсолютным значениям вязкости и аномалии на ее температурной зависимости. Поэтому в данной работе измерения проводили с крышкой на поверхности расплава [4]. Крышка в ходе эксперимента плотно прилегала к поверхности расплава. Об этом свидетельствует правильная цилиндрическая форма образцов после измерений.

Температурные зависимости (политермы) вязкости исследованных жидких сплавов имеют монотонный характер без каких-либо особенностей. Политермы, полученные в режиме нагрева и последующего охлаждения совпадают. Это указывает на отсутствие резких изменений структуры расплавов при их нагреве. При анализе политерм проведена их аппроксимация экспоненциальным уравнением Аррениуса. Показано, что температурные зависимости вязкости исследованных расплавов в пределах погрешности единичного эксперимента хорошо описываются уравнением Аррениуса.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 16-33-00622 мол\_а.

- [1] Бельтюков А.Л., Ладьянов В.И. Автоматизированная установка для определения кинематической вязкости металлических расплавов // ПТЭ, 2008. № 2. С. 155-161.

- [2] Олянина Н.В., Бельтюков А.Л., Ладьянов В.И. Об особенностях измерения вязкости жидких металлов методом крутильных колебаний // Вестник Казанского технологического университета, 2014. Т. 17. № 24. С. 88-91.
- [3] Бельтюков А.Л., Ладьянов В.И., Олянина Н.В. Об особенностях измерения вязкости металлических расплавов методом крутильных колебаний // Расплавы, 2009. № 6. С. 19-27.
- [4] Олянина Н.В., Бельтюков А.Л., Гончаров О.Ю., Ладьянов В.И. Влияние поверхностной пленки на результаты измерения вязкости расплава  $Co_{83}V_{17}$  методом крутильных колебаний // Расплавы, 2012. № 2. С. 83-90.
- [5] Lad'yanov V.I., Bel'tyukov A.L., Olyanina N.V. On peculiarities of measurements of metal melt viscosity by the method of damped torsional vibrations // XVI Liquid and Amorphous Metals Conference / «Sapienza» University of Rome. Rome, 2010. P. 145.
- [6] Стерхова И.В., Камаева Л.В., Ладьянов В.И. О вязкости  $Fe_{79}Cr_{21}$  конгруэнтного состава // Изв. РАН. Серия физическая, 2008. Т. 72. № 10, С. 1442-1444.
- [7] Бельтюков А.Л., Олянина Н.В. Особенности измерения вязкости металлических расплавов методом крутильных колебаний // Строение и свойства металлических и шлаковых расплавов / УрО РАН. Екатеринбург, 2015. С. 158-159.

### **Опыт нейтрализации структурной наследственности чугунных отливок обработкой расплавов барий-стронциевыми карбонатами**

А. Г. Панов<sup>1</sup>, Д. А. Гуртовой<sup>1</sup>, Э. С. Закиров<sup>1</sup>, Р. Г. Шамбазов<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Набережночелнинский институт (филиал) ФГАОУ ВПО «Казанский (При-волжский) федеральный университет», 423800 Россия, г. Набережные Челны, пр. Мира, 13А

В настоящее время высокий уровень дефектности структуры чугунных отливок является одной из главных причин низкой эффективности и конкурентоспособности отечественного литейного производства и машиностроения в целом.

Как известно, формирование дефектов структуры отливок происходит в зависимости от теплофизических свойств литейных расплавов, являющихся структурно чувствительными. Исследования строения чугунных расплавов проводятся достаточно давно, однако к настоящему времени не удаётся получить прямые и точные данные о структуре даже простых модельных железо-углеродистых расплавов, а тем более реальных многокомпонентных чугунных расплавов.



В то же время, анализ современных моделей позволяет сделать однозначный вывод о сложности строения реальных чугунных расплавов в термо-временных условиях литейного производства. А привлечение знаний о явлении структурной наследственности отливок – о разнообразии сохраняющихся в них структурных элементов при применении не стабильной по строению шихты.

При этом формирование дефектов структуры отливок в зависимости от исходной структуры чугунного расплава происходит либо напрямую через влияние на особенности кристаллизации, либо косвенно, через влияние на процессы заполнения формы и питания отливки.

Учитывая вышесказанное, разработан метод стабилизации структурного состояния чугунных расплавов за счёт нейтрализации наследственных структур с помощью материалов на основе карбонатов бария и стронция [1].

Механизмами воздействия на расплав в разработанном методе являются:

- предварительное расплавление и равномерное распределение карбонатов бария и стронция в расплаве на наномасштабном уровне;
- перемешивание расплава за счёт движения газовых пузырьков  $\{CO_2+CO\}$ , образующихся при разложении карбонатов, повышающее его макрооднородность;
- дегазация расплава от растворённых в нём газов в объём пузырьков  $\{CO_2+CO\}$ ;
- механо-энергетическое воздействие микропузырьков  $\{CO_2+CO\}$  на наследственные элементы структуры расплава, обеспечивающее разрыв их внутренних связей, повышающее микрооднородность расплава;
- рафинирующее действие «свежеприготовленных» оксидов ЦЗМ.

При этом воздействии происходит:

- снижение дефектов поверхности, макро и микроструктуры отливок;
- снижение материальных и энергетических затрат за счёт снижения температуры заливки на  $\sim 20$  °С и снижения брака отливок;
- увеличение производительности за счёт уменьшения зашлаковывания ковшей и печей.

При применении разработанных технологий в чугунных отливках всех исследованных видов происходит выравнивание микроструктуры графита, карбидов и матрицы, твёрдости, прочности, увеличение доли и дисперсности перлита, измельчение карбидов.

Результаты исследования с помощью дифференциального термического анализа влияния нового технологического инструмента на кристаллизацию синтетического чугуна также соответствуют описанным механизмам воздействия карбонатов на чугунный расплав.

Рассматриваемый метод обработки достаточно молодой, однако к настоящему времени уже показал свою эффективность [2]. Так, в ЛП КАМАЗа по настоящему методу уже в течение 5 лет производится обработка расплавов почти всей номенклатуры отливок из высокопрочного чугуна и особо ответственных отливок из серого чугуна [3]. В ЛП АВТОВАЗа на основании

опыта КАМАЗа работы по исследованию нового метода начались в 2013 г., и к настоящему времени технологии уже постоянно применяются на особо проблемных отливках [4]. Наиболее существенные результаты представляемый метод даёт на легированных чугунах, в частности, типа НИРЕЗИСТ. Хорошие результаты получены при освоении отливок из аустенитно-бейнитных чугунов.

- [1] Панов А.Г., Чернявский М.С., Пимнев Д.Ю., Корниенко А.Э. Новые возможности подготовки расплавов чугунов для сфероидизирующей обработки // М: Литейщик России, 2010, № 12. – С. 40-42.
- [2] Панов А.Г., Цепелев В.С., Конашков В.В. Исследование возможности повышения качества центробежнолитых чугунных заготовок обработкой расплавов карбонатами ЩЗМ // М: Известия Высших Учебных Заведений. Чёрная металлургия, 2016, № 59(1). – С. 43-48.
- [3] Панфилов Э.В., Гуртовой Д.А., Закиров Э.С., Панов А.Г., Пимнев Д.Ю. Импортозамещение технологических материалов, используемых при производстве ответственных чугунных отливок на Литейном заводе ОАО «КАМАЗ» // М: Литейщик России, 2015, № 6. – С. 11-13.
- [4] Мухаев О.Н., Панов А.Г. Применение современных материалов в чугунолитейном производстве МТП ОАО «АВТОВАЗ» // М: Литейщик России, 2013, № 10. – С. 23-25.

### **Эволюция структуры и свойств полученных литьем сплавов Cu-Zn в процессе интенсивной пластической деформации**

Е. А. Печина<sup>1</sup>, Е. С. Данилова<sup>2</sup>, С. М. Иванов<sup>1</sup>, Е. В. Кузьминых<sup>1</sup>,  
Г. А. Дорофеев<sup>1</sup>, В. И. Ладыанов<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Физико-технический институт УрО РАН, 426000, Россия, г. Ижевск, ул. Кирова, 132

<sup>2</sup>Удмуртский государственный университет, 426034, Россия, г. Ижевск, ул. Университетская, 1

Интерес к процессам структурообразования в медно-цинковых сплавах обусловлен широким применением этих материалов в машиностроении, а также характерным для них набором свойств, обуславливающих особенности при производстве заготовок [1]. Двухфазные ( $\alpha+\beta$ )-латуни получили широкое распространение, т.к. обладают наиболее удачным сочетанием высоких технологических и эксплуатационных свойств. Введение легирующих элементов позволяет повысить прочность, коррозионную стойкость и износостойкость, поэтому сложнелегированные латуни нашли успешное применение в парах трения. Интенсивная пластическая деформация (ИПД) – эффективный способ формирования объемных субмикро- и наноструктурных материалов с новыми

функциональными свойствами [2]. Тем не менее, данные об изменении структуры и свойств сплавов на основе системы Cu-Zn в процессе ИПД практически отсутствуют. Ранее в работе [3] обнаружено, что ИПД кручение двухфазной латуни приводит к распаду второй фазы, наряду с сильным упрочнением. Таким образом, изучение закономерностей формирования структуры и свойств сплавов Cu-Zn является, безусловно, актуальным.

В качестве объектов исследования выбраны отливки в однофазном и двухфазном состояниях с различным химическим составом: Cu – x% (вес.) Zn (x = 18; 42). Образцы двухфазной латуни Cu-42%Zn имели долю  $\beta$ -фазы ~30% и 60% соответственно, что варьировалось условиями охлаждения расплава. Из отливок вырезали образцы диаметром 8 мм и толщиной 1 мм.

ИПД кручение проводили на установке, реализованной на базе гидравлического пресса [4]. Деформацию в наковальнях Бриджмена с сердечниками из стали ШХ15  $\varnothing$ 10 мм проводили при комнатной температуре под давлением 3 ГПа со скоростью вращения подвижной наковальни 1 об/мин. Число оборотов подвижной наковальни изменяли до 8.

Схема деформации при проведении ИПД заключается в кручении нижней наковальни вокруг оси приложенной на верхнюю наковальню нагрузки, что создает в образце под высоким квазигидростатическим давлением сдвиговую деформацию, зависящую от радиуса. Таким образом, фронт деформационной волны в образце в процессе ИПД кручением продвигается от центра к краю образца с увеличением угла закручивания. Поэтому для расчета истинной логарифмической степени деформации  $e$  использовали формулу:

$$e = \ln(h_0 / h_{iR}) + \ln(1 + ((\varphi \cdot R) / h_{iR})^2)^{1/2}, \quad (1)$$

где  $h_0$  – исходная толщина образца,  $h_{iR}$  – толщина образца после деформации на  $i$ -ом расстоянии от центра,  $\varphi$  – угол поворота подвижной наковальни,  $R$  – радиус рабочей площадки наковальни.

Микротвердость образцов измеряли на приборе ПМТ-3 по методу Виккерса. Измерения проводили с шагом 0,25 мм по двум взаимноперпендикулярным диаметрам образца. Металлографические исследования шлифов проведены на микроскопе Neophot 21. Рентгеноструктурный и фазовый анализ (РСА) образцов с помощью съемки на установке ДРОН-6 в Cu- и Co-K $\alpha$  излучении.

Измерения микротвердости образцов после ИПД кручения на 8 оборотов показали увеличение средних значений по сравнению с исходным состоянием: до 2 раз – для однофазной Cu-18%Zn; до 2,5 раза – для двухфазных латуней.

Металлографический анализ однофазной латуни Cu-18%Zn показал, что дендритная структура после деформации сильно измельчается. Для двухфазных латуней характерно образование полосовой структуры, ориентированной по направлению сдвиговой деформации. При этом по радиусу образца структура неоднородна: периферийные участки более искажены, по сравнению с центральными. После кручения на 8 оборотов на дифрактограммах двухфазных латуней линий второй фазы не наблюдается.

Работа выполнена по направлению исследований в рамках Программы фундаментальных научных исследований государственных академий наук на 2013-2020 г.г. № гос. регистрации АААА-А-16-116021010084-2.

- [1] Пугачева Н.Б., Панкратов А.А., Фролова Н.Ю., Котляров И.В. Структурные и фазовые превращения в  $(\alpha+\beta)$ -латунях // *Металлы*, 2006. №3. С.65-75.
- [2] Валиев Р.З., Александров И.В. Объемные наноструктурные металлические материалы: получение, структура и свойства / М.: ИКЦ «Академкнига», 2007. 398 с.
- [3] Печина Е.А., Иванов С.М., Ладьянов В.И., Чуков Д.И., Дорофеев Г.А., Кузьминых Е.В., Мокрушина М.И. Непрерывная регистрация крутящего момента при деформации сдвигом как метод оценки эволюции структурно-фазовых превращений // *Деформация и разрушение материалов*, 2013. №4. С.41-48.
- [4] Иванов С.М., Печина Е.А., Ладьянов В.И., Дорофеев Г.А., Пилюгин В.П., Кузьминых Е.В. Измерение момента кручения в процессе интенсивной пластической деформации в наковальнях Бриджмена // *Заводская лаборатория. Диагностика материалов*, 2013. Т.79. Ч.1. №7. С.49-51.

#### **Структура высокоазотистого сплава, полученного алюминотермическим методом**

И. В. Сапегина<sup>1</sup>, М. И. Мокрушина<sup>1</sup>, Б. Е. Пушкарев<sup>1</sup>, В. А. Карев,  
С. А. Терешкина, Г. А. Дорофеев.

<sup>1</sup>Физико-технический институт УрО РАН, 426000, Россия, г. Ижевск, ул. Кирова, 132

Высокоазотистые стали (ВАС) уже получили применение в различных областях техники, поскольку выгодно сочетают в себе высокие свойства прочности, пластичности и коррозионной стойкости. Кроме того, благодаря высокой аустенитообразующей способности азота, как легирующего элемента в стали, возникает возможность снижения содержания дорогостоящего и дающего аллергическую реакцию на организм человека никеля в составе ВАС. Однако, производство ВАС связано с использованием сложного дорогостоящего энергоемкого металлургического оборудования, что удорожает их стоимость. По сравнению с традиционной металлургической технологией СВС- металлургия не требует больших энергетических затрат. В результате окислительно-восстановительных реакций реализуются высокие температуры без использования внешних источников тепла. Высокая экзотермичность обеспечивает распространение фронта реакции в самоподдерживающемся

режиме. Процесс протекает в несколько стадий: инициирование реакции горения, химическое превращение (горение шихты), разделение жидких металла и шлака, кристаллизация металлического слитка. При проведении синтеза в реакционной газовой атмосфере азота возможно насыщение расплава этим элементом.

В данной работе для получения ВАС использовался алюминотермический метод, основанный на протекании высокоэкзотермических реакций между исходными компонентами порошковой смеси, состоящей из оксидов металлов и металла-восстановителя - алюминия. Используя термодинамическую модель [1], получен сплав состава Fe-23Cr-9Mn-1N (мас.%) с насыщением расплава азотом одновременно из газовой фазы и с помощью нитридов хрома в составе шихты. В качестве реагентов при составлении порошковых смесей использовали следующие материалы: оксид  $Fe_2O_3$ , оксид хрома  $Cr_2O_3$ , порошки марганца (99,6%) и нитридов хрома (смесь состава 80% CrN + 20% Cr<sub>2</sub>N (мас. %)), порошок алюминиевый марки АСД-Ч. Алюминотермический синтез ВАС проводили в СВС-реакторе РВС-25 для азотирования ферросплавов под давлением азота до 15 МПа. Анализ плавки показал удовлетворительное согласие с предсказаниями модели по получению сплава заданного состава.

Рентгеновская дифрактограмма литого сплава показывает наличие аустенита, феррита и нитрида хрома, около 50%, 35% и 15% соответственно. Послековки при  $T = 1150-1170$  °С количество аустенита увеличивается до 80%. Согласно данным электронной микроскопии, наблюдаемая в кованом образце структура представляет собой аустенит с включениями нитрида хрома. После термообработки кованого образца при  $T = 1200$  °С, 2 часа, закалка в воду, по результатам рентгеновской дифракции, в сплаве наблюдается единственная фаза – аустенит.

[1] Дорофеев Г.А., Карев В.А., Кузминых Е.В. и др. К вопросу получения высокоазотистой коррозионно-стойкой стали алюминотермическим методом в среде азота высокого давления// *Металлы*, № 1, с. 3-14, 2013.

### **Концентрационные зависимости кинематической вязкости расплавов $Fe_{75-x}Cr_{15}C_x$ ( $x=10-15$ ).**

И. В. Стерхова<sup>1</sup>, Л. В. Камаева<sup>1</sup>, В. И. Ладьянов<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Физико-технический институт УрО РАН, 426000, Россия, г. Ижевск, ул. Кирова, 132.

Важнейшим физико-химическим свойством металлических расплавов является вязкость, которая чувствительна к структурным изменениям в системе и

выступает в качестве одного из основных технологических параметров металлургического процесса.

Система Fe-C является базовой для большинства сталей и сплавов, имеющих широкое применение в качестве функциональных и конструкционных материалов. Легирование Cr способствует повышению прочностных и износостойких свойств этих материалов, за счет формирования карбидной фазы. Сплавы системы Cr-Fe-C широко используются в современной промышленности в качестве наплавочных материалов благодаря повышенным механическим свойствам, в том числе высокой стойкости к различным видам износа (абразивному, эрозионному, коррозионному и др.) [1, 2]. В зависимости от практического назначения состав этих сплавов может значительно отличаться. Наиболее важной составляющей при определении сопротивления абразивному износу при низком напряжении является содержание углерода [1, 2]. В сплавах с большим содержанием углерода образуется карбид  $M_7C_3$ , окруженный более мягкой аустенитной матрицей, что приводит к образованию трещин на границе раздела фаз и затрудняет использование таких материалов без дополнительной обработки. Оптимальное соотношение компонентов определяется областью существования в тройной системе Cr-Fe-C карбида  $Me_{23}C_6$  и эвтектики [1, 2]. Помимо выбора химического состава сплава его структура и свойства определяются состоянием жидкой фазы перед затвердеванием и условиями охлаждения [3]. Прямые структурные исследования высокотемпературных расплавов практически не проводятся, в силу сложности эксперимента и трудности интерпретации получаемых данных. Основным источником сведений о структурных изменениях в расплавах являются данные о температурных и концентрационных зависимостях их структурно-чувствительных свойств. В связи с этим в работе были проведены исследования кинематической вязкости расплавов  $Fe_{75-x}Cr_{15}C_x$   $x=10-17at\%$ . Исследуемая область концентраций системы Fe-Cr-C включает составы вблизи эвтектики, в которых присутствует карбидная фаза  $(Fe,Cr)_{23}C_6$  или  $(Fe,Cr)_7C_3$ .

Кинематическую вязкость ( $\nu$ ) измеряли методом затухающих крутильных колебаний корундового тигля с расплавом с двумя торцевыми поверхностями в режимах ступенчатого нагрева и последующего охлаждения. Ранее при исследовании вязкости углеродсодержащих систем с определенной долей карбидной фазы нами было показано, что после плавления в системе длительное время устанавливается термодинамическое равновесие и необходимо проведение предварительной термовременной обработки расплава [4]. Поэтому перед измерением вязкости проводили переплав исследуемых слитков в вакууме. Максимальная ошибка при измерении вязкости не превышала 4%.

Полученные равновесные политермы вязкости расплавов  $Fe_{75-x}Cr_{15}C_x$   $x=10-17at\%$  при нагреве и последующем охлаждении характеризуются монотонными зависимостями аррениусовского типа. Расчет концентрационных зависимостей вязкости проводили по двум сериям измерений температурных зависимостей  $\nu$  (первые нагрев-охлаждение и повторные измерения после кристаллизации

расплава). Согласно полученным результатам на изотермах системы Fe-Cr-C вблизи 14 ат% С наблюдается резкий скачок значений  $\nu$ , который соответствует эвтектическому составу. Резкое увеличение вязкости на концентрационных зависимостях, как правило, свидетельствует об усилении химического взаимодействия в расплаве. Однако такое поведение не характерно для эвтектического состава.

Таким образом, проведенные исследования показали, что вязкость расплавов  $Fe_{75-x}Cr_{15}C_x$   $x=10-17$  ат% не проявляет сильной зависимости от содержания углерода в сплаве и только вблизи эвтектики наблюдается резкое повышение ее значений.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ № 16-43-180629p\_a.

- [1] Fan C., Chen M.C., Wu W., Microstructure change caused by (Cr,Fe)<sub>23</sub>C<sub>6</sub> carbides in high chromium Fe-Cr-C hardfacing alloys // Surface and Coating Technology, 2006. V. 201, pp. 908-912.
- [2] Lin C.M., Chang C.M., Chen J.H., Hsieh C.C., Wu W., Microstructural evolution of hypoeutectic, near-eutectic and hypereutectic high-carbon Cr-based hard-facing alloys // Metallurgical and materials transactions A, 2009. V 40A, pp. 1031-1038.
- [3] Lad'yanov V.I., Sterkhova I.V., Kamaeva L.V., Chueva T.R., Molokanov V.V., On the solidification of the Fe<sub>50</sub>Cr<sub>15</sub>Mo<sub>14</sub>C<sub>15</sub>B<sub>6</sub> bulk-amorphous alloy // Journal of Non-Crystalline Solids, 2009. V. 356, pp. 65-71.
- [4] Стерхова И.В., Камаева Л.В., Ладьянов В.И., Об особенностях измерения вязкости расплавов Cr-C вблизи эвтектического состава с большой долей карбидной фазы. // Расплавы, 2013, N 3, С. 3-12.

### **Наномодифицирование в литейном производстве**

А. Н. Черепанов<sup>1</sup>, В. К. Манолов<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Институт теоретической и прикладной механики им. С. А. Христиановича, г. Новосибирск, Россия

<sup>2</sup>Институт металловедения, сооружений и строительных технологий. «Акад. А. Балеvски» БАН, София, Болгария

В последние годы в связи с возросшими требованиями к рабочим характеристикам металлопродукции большое внимание уделяется проблеме коренного улучшения свойств литого металла. Известные методы повышения качества металлоизделий за счет легирования достигли своего предела, становятся дорогостоящими и часто мало эффективными. Одним из перспективных способов решения этой проблемы является применение специально подготовленных нанопорошковых композиций

(наномодификаторов) из тугоплавких соединений (нитридов, карбидов, оксидов и т.д.), плакированных металлом. Эти композиции сравнительно недороги. Введенные в расплав в малом количестве (не более 0,05 % по массе), они равномерно распределяются по всему объему и служат активными центрами кристаллизации, что приводит к значительному измельчению зерна и изменению морфологии структуры отливки. В результате этого формируется мелкодисперсная кристаллическая структура. Измельчаются также и неметаллические включения (карбиды, интерметаллидные соединения и др.), вследствие этого повышаются механические и служебные свойства металлов и сплавов. В работе приводятся результаты теоретического и экспериментального исследований влияния различных по составу наномодифицирующих добавок на свойства широкого класса материалов – сплавов на основе железа, алюминия и никеля. Сформулированы условия, которым должны удовлетворять потенциальные центры кристаллизации, позволяющие произвести выбор химических соединений, которые могут быть использованы в качестве эффективных центров кристаллизации, имеющих температуру плавления свыше 2500 °С и наиболее стойких к растворению в перегретых расплавах стали сплавов. Приведенные опытные результаты получены в лабораторных, либо в реальных производственных условиях. В основном использовались нанопорошки, синтезированные плазмохимическим способом, а также полученные методом механического дробления в центробежных планетарных мельницах [1,2].

Исследовано влияние различных наномодификаторов (НМ) на морфологию и дисперсность кристаллического зерна и внутреннюю структуру непрерывно - литого слитка стали. Установлено, что применение НМ существенно изменило морфологию и дисперсность кристаллических зерен. Вместо грубой столбчатой структуры сформировалась глобулярная дисперсная кристаллическая структура. Значительно снизились показатели центральной пористости (ЦП), общей химической неоднородности (ОХН), ликвации, пористости и общей трещиноватости ( $ЛПТ_{общ}$ ). Увеличилась толщина корочки слитка, уменьшились размер дендритной зоны и длина дендритных осей. При воздействии наноконпозиции TiN +Cr со средним размером частиц TiN равным 30 мкм в соотношении TiN:Cr = 1:2 на расплав стали 110Г13Л получено увеличение предела текучести на 16.3%, предела прочности на растяжение на 18%, относительного удлинения на 36% и твердости (НВ) на 8%. Определена износостойкость, которая возросла на 60% в результате наномодифицирования. Ввод в расплав серого чугуна наномодификатора TiCN+Y<sub>2</sub>O<sub>3</sub>+Ni+Fe в составе TiCN:Y<sub>2</sub>O<sub>3</sub>:Ni:Fe = 2:1:1:6 вызвало изменение морфологии и размера графитовой фазы. Вместо классической формы протяженных пластин, формирующихся при обычном литье, в модифицированном сплаве- образуется сетка в виде булавовидных и округлых мелких включений. Соответственно возрастают механические характеристики. Предела текучести увеличился на 9%, предел прочности на растяжение на 15%, относительное удлинение на 36%, а



износостойкость на 16 %. Исследовалось влияние НМ на свойства жаропрочных сплавов марок ЖС- 6К и Инконель 718. Плавку проводили в вакуумной индукционной печи до температуры 1580-1650 °С, разливка осуществлялась при температуре 1460-1550 °С в керамические формы, стенки которых предварительно разогревались до 900 °С. Применение НМ приводит к измельчению зерен более чем в 2- 3 раза. При этом более чем в 2- 3 раза повышаются пластические и термоциклические свойства сплавов, в 1.5 раза увеличилось время до разрушения при нагрузке 195 МПа и температуре  $T = 975$  °С (в случае сплава ЖС-6К) и при  $T = 650$  °С для сплава Инконель 718. Аналогичные эффекты наблюдаются при воздействии наномодифицирующих добавок на алюминиевые сплавы. Исследовалось влияние НМ на свойства сплава AlSi7Mg при получении отливки „Лодочка”, кокильным литьем при температуре заливки металла 720-730°С и формы - 150-160°С. Отливка используется в электропередвижных сетях. Сплав обрабатывался нанопорошком AlN при концентрации AlN 0,05 % по массе.

Плакирование осуществлялось в планетарной мельнице АГО-2 смесью порошков Al+Cu. Отливки, полученные без НМ, характеризуются повышенной пористостью ~ 1%. во всех зонах. В отливках с НМ пористость уменьшается в среднем на 60-70 %. Это коррелирует с результатами снижения размера дендритных осей на 26 % и измельчением микроструктуры после ввода НМ. Измельчение структуры и снижение пористости привело к увеличению  $\sigma_b$  на 7,4 %, а  $\delta$  - на 7,5 %.

- [1] Упрочнение металлических полимерных и эластомерных материалов ультрадисперсными порошками / Жуков М.Ф., Черский И.Н., Черепанов А.Н., и др. Новосибирск: Наука. 1999. 307 с.
- [2] А.Н. Черепанов, В.Е. Овчаренко, Г. Лю, Л. Цао. Модификация структуры и свойств никелевых сплавов наноструктурированными композиционными порошками// Теплофизика и аэромеханика, 2015. Т. 22, № 1. С. 131 – 136. (DOI) 10.1134/S0869864314010114

## **Секция IV**

### **Метод фазового поля и расчет микроструктур**

### Трёхмерная структурная диаграмма железа в модели кристаллического фазового поля

В. Е. Анкудинов<sup>1</sup>, П. К. Галенко<sup>2</sup>, Н. В. Кропотин<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Удмуртский государственный университет, 426034 Россия, г. Ижевск, ул. Университетская, 1, к. 4

<sup>2</sup>Friedrich-Schiller-Universität Jena, Physikalisch-Astronomische Fakultät, D-07743 Germany, Jena

Модель кристаллического фазового поля может использоваться для описания атомной плотности и структуры на масштабах отдельных атомов при диффузионных временах протекания различных реакций и фазовых превращений [1]. Основанная на функционале свободной энергии, физико-математическая модель сформулирована для описания непрерывных переходов из однородного состояния в кристаллическое, а также между различными кристаллическими микроструктурами. Особое место в модели фазового поля отводится определению равновесных структур и их взаимному сосуществованию на диаграммах «средняя атомная плотность – температура» или «средняя атомная плотность – движущая сила перехода». Такие диаграммы необходимы для определения структур, к которым должны эволюционировать неустойчивые или метастабильные состояния.

Для построения структурной диаграммы фазовых превращений в железе будем использовать свободную энергию в виде потенциала Landau-De-Genes, в двухмодовом приближении [4]:

$$F(n, T) = \int_V dV \left( \Delta B_0 \frac{n^2}{2} + B_0^x \frac{n}{2} Dn - 2a \frac{n^3}{3} + 15v \frac{n^4}{4} \right), \quad (1)$$

где  $n$  – атомная плотность,  $\Delta B_0 = B_0^l - B_0^x$  – разность между сжимаемостью жидкости  $B_0^l$  и модулем упругости  $B_0^x$  (при этом фазовый переход происходит из метастабильного состояния при  $\Delta B_0 > 0$ , мы рассматриваем только такие трансформации),  $a, v$  – параметры функционала, определяющие физические характеристики системы, они вычисляются из структурного фактора,  $D$  – дифференциальный оператор, который в двухмодовом приближении равен  $D_2 = [r_0 + (q_0^2 + \nabla^2)^2][r_1 + (q_1^2 + \nabla^2)^2]$ , где  $R, r_1, r_2$  – волновые вектора, для первой и второй подрешётки соответственно,  $q, q_0, q_1$  – волновые числа подрешёток [3, 4]. Таким образом, в двухмодовом приближении при помощи  $D_2$  имеется возможность учитывать первую и вторую кристаллические подрешетки, что открывает возможности для описания более сложных структур, например гранецентрированной кубической.

Для построения структурных диаграмм были использованы методы, описанные в работах [2-4]. Диаграмма трехмерных структур гомогенной и объёмноцентрированной кубической решетки предсказывает равновесные атомные конфигурации при переходах из метастабильного состояния и включает области существования и сосуществования указанных структур.

- [1] Provatas N., Elder K., Phase-Field Methods in Materials Science and Engineering. — Wiley, VCH, 2010. — P. 312.
- [2] Galenko P.K., Gomez H., Kropotin N.V., Elder K. Unconditionally stable method and numerical solution of the hyperbolic phase-field crystal equation // Phys. Rev. E 88, 2013. — P. 013310.
- [3] Jaatinen A., Achim C.V., Elder K.R., Ala-Nissila T., Thermodynamics of BCC metals in phase-field-crystal models // Physical Review E 80, 2009. — P. 031602.
- [4] Анкудинов В. Е., Галенко П. К., Кропотин Н. В., Кривилев М. Д. Функционал атомной плотности и диаграмма структур в модели кристаллического фазового поля // Журнал экспериментальной и теоретической физики, том 149, вып. 2, 2016. — С. 343-356.

### **Теоретическое описание немонотонных релаксационных процессов в расплавах Al-Y**

М. Г. Васин<sup>1</sup>, С. Г. Меньшикова<sup>1</sup>, М. Д. Ившин<sup>1</sup>

<sup>1</sup>ФТИ УрО РАН, Ижевск, Россия

E-mail: dr\_vasin@mail.ru

Некоторые хорошо известные физические явления, наблюдаемые в металлургических процессах, до сих пор вызывают вопросы у физиков. Причиной непонимания является отсутствие объяснения этих явлений в рамках общепринятых физических теорий. Одно из таких явлений это макроскопически большое время релаксации, наблюдаемое в некоторых многокомпонентных металлических расплавах [1, 2]. Иногда время релаксации таких систем составляет десятки минут и даже часов. В металлургии такие процессы часто объясняют доплавлением и представляют их как постепенное разрушение тугоплавкой кристаллической фазы в жидком расплаве. Однако, кинетика таких релаксационных процессов плохо укладывается в стандартные представления о диффузионном механизме релаксации. Поскольку характерные времена релаксации (для расплава AlY, например, размер исходных неоднородностей  $\sim 10^{-5}$  м [3]), соответствующие этому механизму, порядка секунды. На эксперименте же наблюдаются расплавы без остатков твердой фазы, время релаксации которых на несколько порядков превосходит характерные для

диффузионных процессов времени, при этом, в некоторых случаях, релаксация является немонотонной.

В представленной работе мы предлагаем физическое объяснение немонотонных релаксационных процессов с большими временами релаксации в металлических расплавах Al-Y. Наше объяснение основано на хорошо известной теории гомогенного расслоения фаз Кана-Хильярда [3] и функциональных методах статистической физики неравновесных систем [4]. По нашему мнению, это явление связано с нелинейностью концентрационной зависимости химического потенциала системы. Слабая нелинейность, а точнее, существование разделенных очень малым энергетическим барьером локальных минимумов на этой зависимости, приводит к релаксационным процессам с критически медленной флуктуационной динамикой. Данные процессы представляют собой кооперативное движение атомов системы. В однородном расплаве амплитуда подобных флуктуаций мала и не может быть зафиксирована экспериментально. Однако в случае сильной начальной концентрационной неоднородности расплава эта неоднородность оказывает заметное влияние на экспериментально измеримые характеристики (такие, например, как вязкость), а время разрушения оставшихся после плавления интерметаллических комплексов определяется временем жизни флуктуации аналогичного размера. Это время жизни вычисляется с помощью методов неравновесной критической динамики и может быть макроскопически большим. Используя методы неравновесной динамики, удастся теоретически воспроизвести и объяснить немонотонные временные зависимости вязкости релаксирующих расплавов, обнаруженные в расплавах AlY [5].

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (гранты №14-02-00359 и № 15-32-50291).

- [1] *Замятин В.М., Баум Б.А., Мезенина А.А. и др. // Расплавы, 2010. № 5. С. 19.*
- [2] *Бельтюков А.Л., Меньшикова С.Г., Васин М.Г., Ладьянов В.И., Корепанов А.Ю. // Расплавы, №1, 2015, С.3-16.*
- [3] *Cahn J.W. // Trans. Metall. Soc. AIME, 1968. V.242, P.166.*
- [4] *Vasil'ev A.N., 2004 Quantum-Field Renormalization Group in the Theory of Critical Phenomena and Stochastic Dynamics (Boca Raton, FL: CRC Press) p 705.*
- [5] *Vasin M.G., Menshikova S.G., Ivshin M.D. // Physica A: Statistical Mechanics and its Applications, 2016, V.449, P.64–73.*

### Моделирование процессов эпитаксиального зарастивания подложек из пористого оксида алюминия

А. В. Вахрушев<sup>1,3</sup>, А. Ю. Федотов<sup>1,3</sup>, А. В. Северюхин<sup>1</sup>, Р. Г. Валеев<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Институт механики УрО РАН, 426067, Россия, г. Ижевск, ул. Т. Барамзиной, 34

<sup>2</sup>Физико-технический институт УрО РАН, 426000, Россия, г. Ижевск, ул. Кирова, 132

<sup>3</sup>Ижевский Государственный Технический Университет им. М.Т. Калашникова, 426069, Россия, г. Ижевск, ул. Студенческая, 7

Материалы на основе пористого алюминия широко используются в науке и технике. Данные материалы нашли применение в микро- и нанoeлектронике [1], например, в качестве чувствительных слоев для сенсорных устройств [2]. Поры оксида алюминия заполняют диэлектрическими материалами, что впоследствии позволяет получить пленку с низкой диэлектрической проницаемостью [3]. Несмотря на широкое использование нанопленок, возникают вопросы детального исследования их состава, структуры и протекающих в них процессов. Подобные проблемы активно рассматриваются и решаются другими авторами, зачастую, с целью уменьшения затрат, при помощи теоретических методов и аппарата моделирования [4].

Задача моделирования формирования нанопленочных покрытий решалась в несколько этапов. На первом этапе происходит формирование подложки из аморфного оксида алюминия. Атомы алюминия и кислорода в необходимой пропорции (2:3) помещаются в расчетную ячейку с периодическими граничными условиями по бокам (рис. 1 а). Под воздействием потенциальных сил при нормальных термодинамических условиях подложка стабилизируется и приходит в состояние покоя (рис. 1 б). Стабилизация подложки обусловлена именно потенциальными силами, так как ее формирование происходит за счет самоорганизации атомов алюминия и кислорода. При этом тепловые флуктуации и диффузия в рамках заданной температуры в сформированной подложке присутствует, но существенной перестройки ее структуры не происходит, атомы незначительно колеблются вблизи занятых положений.

На втором этапе в подложке (длина – 12,4 нм, ширина 12,4 нм, высота – 6,2 нм) вырезается отверстие – пора 2 нм диаметром и глубиной 4 нм (разрез подложки с порой показан на рис. 1 в). Впоследствии эта пора будет зарастиваться атомами различного типа (рис. 1 г). В силу периодических граничных условий по направлениям  $x$  и  $y$ , в работе рассматривалась только одна пора. В горизонтальных направлениях периодические граничные условия предусматривают параллельный перенос расчетной ячейки. Сверху и снизу моделируемая система находилась под воздействием жестких граничных условий.

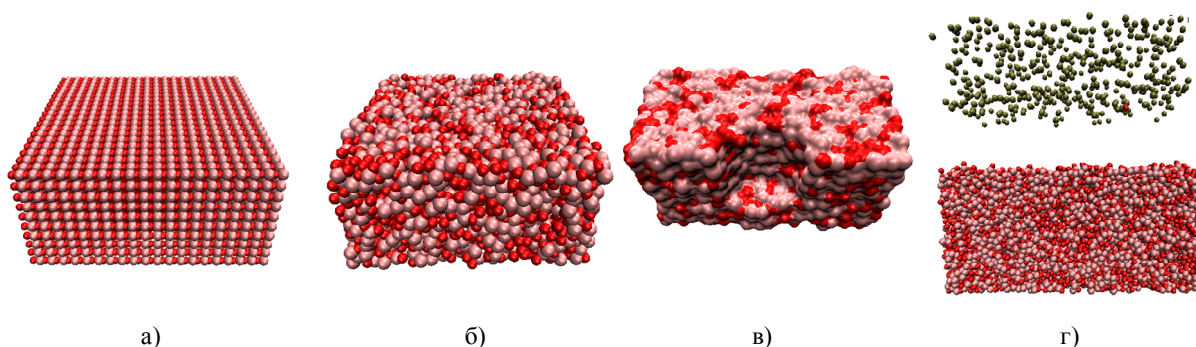


Рис. 1. Этапы решения задачи формирования нанопленочных покрытий на основе пористого оксида алюминия

Заращивание пористой подложки осуществлялось равномерным напылением атомов по нормали по отношению к подложке. В течение стадии заращивания в области над подложкой добавлялись осаждаемые атомы, положение которых определялось равномерным законом распределения. Управляющими параметрами процесса являлись количество добавляемых атомов в единицу времени и их общее число. Молекулярно-динамическое моделирование проводилось при постоянной температуре. Постоянная температура в системе поддерживается при помощи алгоритма термостата. Скорости атомов в начальный момент времени задавались в соответствии с распределением Максвелла. Более подробно методика моделирования приведена в [5].

В работе на подложку оксида алюминия осаждались различные типы атомов: золото (Au), серебро (Ag), железо (Fe), галлий (Ga), германий (Ge), палладий (Pd). До начала процесса осаждения подложка находилась в состоянии покоя, ее температура в начальный момент была равна 300 К и в дальнейшем поддерживалась на таком же уровне. Количество осаждаемых – 20000. Осаждение происходило равномерно по всей поверхности подложки и с одинаковой интенсивностью по времени. Скорость атомов при эпитаксии – 0,05 нм/пс.

В результате проведенных исследований были зафиксированы различные варианты эпитаксиального заращивания пористых подложек на основе оксида алюминия различными типами атомов. Для случаев заращивания атомами серебра и золота наблюдалось равномерное покрытие поры нанопленкой, основная часть осаждаемых атомов не проникает внутрь. В области поры происходило незначительное проседание нанопленки. Атомы железа демонстрировали образование наноструктур еще в безвоздушной среде над подложкой, заращивание подложки происходило по островному принципу. Мелкие наноструктуры железа на подложке постепенно укрупнялись и группировались в большие по размеру, наблюдалось образование наноструктуры железа внутри поры. При осаждении атомов галлия пора также полностью не зарастает, нанопленка на поверхности подложки формируется областями. Заметны небольшие наночастицы галлия на поверхности подложки. Нанопленка при эпитаксии атомов палладия формировалась равномерная, с небольшим

проседанием в области поры, но непосредственно над порой на протяжении всего этапа конденсации наблюдалось отверстие, которое так и не заросло.

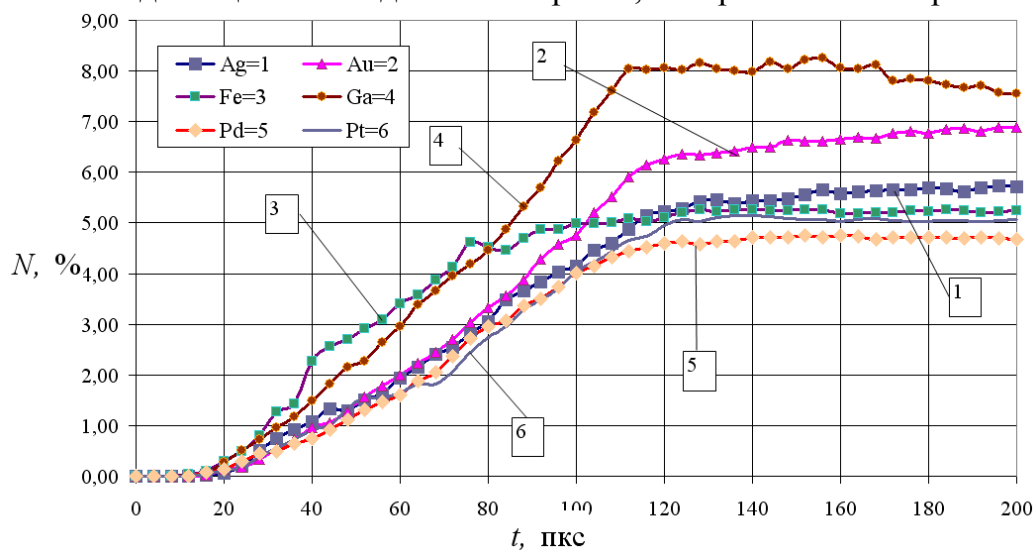


Рис. 2. Процент попавших в пору осажденных атомов по отношению к общему числу осажденных атомов

Для всех типов осаждаемых атомов наблюдались единичные атомы, которые достигали дна поры. Наиболее полное и плотное зарастивание поры было зафиксировано при эпитаксии галлия (рис. 2). Пора, заполненная атомами может рассматриваться как квантовая точка и использоваться для получения оптических и электрических эффектов.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФ (проект № 15-19-10002).

- [1] Mozalev A., Sakairi M., Saeki I., Takahashi H. Nucleation and growth of the nanostructured anodic oxides on tantalum and niobium under the porous alumina film // *Electrochimica Acta*, 2003. No. 48. P. 3155-3170.
- [2] Vasiliev A.A., Pavelko R.G., Gogish-Klushin S.Yu., Kharitonov D.Yu., et. al. Alumina MEMS platform for impulse semiconductor and IR optic gas sensors // *Sensors and Actuators B: Chemical*, 2008. Vol. 132, Issue 1. P. 216-223.
- [3] Филяк М.М., Каньгина О.Н. Особенности формирования анодного оксида алюминия в щелочных электролитах // *Вестник ОГУ*, 2013. N 1. С. 154-159.
- [4] Song H., Pegbusi O.J., Trakhtenberg L.I. Modeling vapor deposition of metal/semiconductor-polymer nanocomposite // *Thin Solid Films*, 2005. Vol. 476. P. 190-195.
- [5] Вахрушев А.В., Федотов А.Ю., Северюхин А.В., Суворов С.В. Моделирование процессов получения специальных наноструктурных слоев в эпитаксиальных структурах для утонченных фотоэлектрических преобразователей // *Химическая физика и мезоскопия*, 2014. Т. 16, № 3. С. 364-380.



## Динамические характеристики конденсированных систем вблизи температуры стеклования

Б. Н. Галимзянов<sup>1</sup>, А. В. Мокшин<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Казанский (Приволжский) федеральный университет, 420008 Россия, г. Казань, ул. Кремлевская, 18

В работе рассматриваются динамические характеристики неупорядоченных конденсированных систем в температурной области, находящейся вблизи температуры стеклования  $T_g$ . Исследуется задача, связанная с единым описанием поведения динамической вязкости [1]. Для решения этой задачи в работе используется оригинальная приведенная температура и соответствующая приведенная температурная шкала, которая является единой для различных систем [2,3]. Также в работе изложен метод масштабирования абсолютной температурной шкалы, который позволяет корректно сопоставить и выполнить анализ температурного поведения различных физических величин, полученных как через моделирование, так и с помощью экспериментальных методов.

Особое внимание уделяется к рассмотрению динамических характеристик различных конденсированных систем - силикатных, боратных, германиевых, а именно температурной зависимости вязкости. Известно, что исходя из температурного поведения вязкости, эти системы можно классифицировать на сильные и хрупкие стеклообразующие системы, где используется приведенная температурная шкала  $T_g / T$  [2]. Здесь возникает необходимость в приведенной температурной шкале, независимой от свойств системы и от способа его приготовления (например, от скорости охлаждения жидкости или расплава) [3].

В настоящей работе предлагается оригинальный метод масштабирования абсолютной температурной шкалы  $T$ , которая заменяется приведенной температурой  $\tilde{T}$  следующим образом [3]

$$\tilde{T} = \frac{0.5T_m^2 - T_g^2}{T_m(T_m - T_g)} \left( \frac{T}{T_g} \right) + \frac{T_g(T_g - 0.5T_m)}{T_m(T_m - T_g)} \left( \frac{T}{T_g} \right)^2, \quad (1)$$

где  $T_m$  - есть температура плавления системы. Если для системы известны температуры  $T_m$  и  $T_g$ , то температурные точки ранжируются одинаковым образом для всех систем с учетом следующих условий [3]: при  $T=0$  имеем  $\tilde{T}=0$ , при  $T=T_g$  имеем  $\tilde{T}=0.5$  и при  $T=T_m$  имеем  $\tilde{T}=1.0$ .

При использовании приведенной температурной шкалы  $\tilde{T}$  наблюдается универсальность и корреляция в температурном поведении вязкости различных систем, полученных как через моделирование молекулярной динамики, так и с помощью экспериментальных методов [1-3].

Молекулярно-динамические расчеты выполнены на вычислительном кластере Казанского федерального университета и на суперкомпьютере межведомственного суперкомпьютерного центра Российской академии наук.

*Работа выполнена при финансовой поддержке грантом Президента РФ МД-5792.2016.2 и грантом РФФИ № 14-02-00335-а.*

- [1] Fokin V.M., Zanotto E.D., Schmelzer J.W.P. Homogeneous nucleation versus glass transition temperature of silicate glasses // J. Non-Cryst. Solids, 2003. 321. P. 52-65.
- [2] Martinez L.-M. and Angell C.A. A thermodynamic connection to the fragility of glass-forming liquids // Nature, 2001. 410. P. 663-667.
- [3] Mokshin A.V. and Galimzyanov B.N. Scaling law for crystal nucleation time in glasses // J. Chem. Phys, 2015. 142. P. 104502(1)-104502(10).

### Дендритная структура: эмпирика, эволюция, системный анализ

В. М. Голод<sup>1</sup>, К. И. Емельянов<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого

Дендритная структура литого металла, интенсивно изучаемая на протяжении многих лет [1-2], остается объектом, значимость которого для управления качеством отливок и слитков является общепризнанной, и вместе с тем она не может быть достоверно охарактеризована как с использованием теоретических разработок, так и на основе обобщения накопленных экспериментальных данных. Обзор обширного круга публикаций по дендритной структуре стали, материалы которого опубликованы в трех номерах журнала «Черные металлы» [3-5], приводит к следующим выводам:

- публикуемые данные о структуре дендритов содержат почти исключительно характеристики *средних* значений первичных  $\lambda_1$  и вторичных  $\lambda_2$  междоусных промежутков, как правило, – без указания условий регистрации (без разделения стационарных опытных и нестационарных производственных данных), количества обработанных значений и характеристик полученного разброса данных  $\sigma_\lambda$  или коэффициента корреляции  $R$  приводимых однофакторных степенных статистических моделей;
- в качестве определяющих факторов в этих моделях используется статистический набор кинетических параметров  $\lambda_i = K(G_T)^a (G_T)^b (G_T)^c (G_T)^d$ ;  $i=1,2$  – температурного градиента  $G_T$ , скорости кристаллизации  $V$ , скорости охлаждения  $V_0$  или локальной продолжительности затвердевания  $\tau_{LS}$ , определяемых по различным методикам и формулам (на ликвидусе или солидусе, в среднем по ширине зоны затвердевания, на основе равновесных или фактических значений температур и т.д.) ;

- математическая структура различных выражений, описывающих влияние компонентов сплава на их дендритные параметры  $\lambda_1$  и  $\lambda_2$ , носит произвольный характер и вследствие этого не поддается обобщению; коэффициенты регрессии, отражающие вклад отдельных компонентов, нередко отличаются обратным знаком, в силу этих причин дендритная структура сплавов разного состава не поддается какому-либо прогнозированию;
- локальная структурная неоднородность (размах значений параметров  $\lambda_1$  и  $\lambda_2$ ), отмечаемая в отдельных исследованиях, и ее зависимость от условий формирования дендритов практически не исследована, в то время как развитие литейных дефектов (фильтрационное развитие усадочных пустот, формирование дендритной ликвации, горячих трещин и т.д.) в значительной степени обусловлено характером распределения в объеме дендрита и его ближайшего окружения вторичных ветвей, характеризующихся различной толщиной, протяженностью и междусосными промежутками;
- существующие теоретические представления о возникновении ансамбля дендритов и изменении их морфологических параметров в процессе неравновесной кристаллизации сплавов носят весьма схематичный характер, при этом остается не выявленным статистический характер эволюции дендритной структуры и ее локальной неоднородности в условиях системного сопряжения теплофизических, кристаллизационных, диффузионных и капиллярных явлений.

В работе исследована кинетика *мезомасштабной* равноосной кристаллизации многокомпонентной стали на основе решения системы уравнений, описывающих условия выделения твердой фазы, образования и роста ансамбля дендритных кристаллитов в *междендритном* расплаве до их взаимного смыкания (первый этап) с последующим утолщением/растворением возникших вторичных ветвей (второй этап) вследствие интенсивного протекания в объеме *внутридендритной* жидкой фазы их диффузионной коалесценции при частичном подавлении диффузии компонентов сплава в твердой фазе.

Путем решения базовой системы уравнений [6], включающей расчет переохладения расплава, зарождения, свободного роста и ветвления первичных дендритов, исследовано дальнейшее формирование, рост и морфологическая эволюция микроструктуры при изменении средних значений состава жидкой фазы и вторичных междусосных промежутков дендритов.

Начальные характеристики дендритной структуры ( $D_0$ ,  $L_0$ ,  $\lambda_0$  – диаметр ветвей, их длина, междусосное расстояние и др.), формирующиеся на первом этапе кристаллизации, в период нарастающего до максимальной величины переохладения расплава и его последующей рекалесценции, образуют первичный статистический ансамбль параметров, инициирующий механизм капиллярно-диффузионной коалесценции вторичных боковых ветвей. Для его количественного исследования с помощью метода Монте-Карло [5-6] рассмотрена совместная последовательно-параллельная реализация четырех

выявленных механизмов коалесценции [7] (путем растворения ветвей радиального, осевого или у основания, а также при слиянии ветвей) и дана оценка относительного вклада исследованных механизмов с помощью коэффициентов принадлежности теории нечетких множеств. На примере низкоуглеродистой стали выявлен характер получаемых гистограмм распределения значений  $\lambda_2$  и его эволюции в процессе кристаллизации сплава, которая проявляется в непрерывном увеличении во времени как среднего  $(\lambda_2)_{cp}$ , так и граничных значений  $(\lambda_2)_{max}$  и  $(\lambda_2)_{min}$  при последовательном возрастании их размаха, являющегося движущей силой их многократного увеличения вплоть до момента исчерпания внутريدендритной жидкой фазы.

Обобщение полученных расчетных и экспериментальных значений параметров дендритной структуры, выполненное на значительном массиве данных для ряда марок углеродистой и низколегированной стали ( $\sigma_D/D=0.12-0.29$ ;  $\sigma_L/L=0.27-0.54$ ;  $\sigma_\lambda/\lambda=0.18-0.31$ ), указывает, что наблюдаемый разброс характеристик не связан с измерительными и/или расчетными погрешностями и обусловлен специфическим механизмом их генезиса и эволюции, и требует – для выявления средств управления микроструктурой – соответствующего теоретического и экспериментального анализа. Расчетные параметры локально-неоднородной дендритной структуры являются базовой информацией для анализа возникновения и развития пространственного распределения литейных дефектов в фасонных отливках [5-6].

- [1] Голод В.М., Савельев К.Д., Басин А.С. Моделирование и компьютерный анализ кристаллизации многокомпонентных сплавов на основе железа. – СПб., Изд-во Политехн. ун-та, 2008. – 372 с.
- [2] Rappaz M., Jacot A., Boettinger W.J. Last-stage solidification of alloys: theoretical model of dendrite-arm and grain coalescence // Metall. Mater. Trans., 2003, № 3, p. 467-479.
- [3] Голод В. М., Емельянов К. И., Орлова И. Г. Дендритная микронеоднородность литой стали: обзор проблем и их компьютерный анализ (Часть 1) // Черные металлы, 2013, № 8. – С. 9-16.
- [4] Голод В. М., Емельянов К. И., Орлова И. Г. Дендритная микронеоднородность литой стали: обзор проблем и их компьютерный анализ (Часть 2) // Черные металлы, 2013, № 9. – С. 25-32.
- [5] Голод В. М., Емельянов К. И., Орлова И. Г. Дендритная микронеоднородность литой стали: обзор проблем и их компьютерный анализ (Часть 3) // Черные металлы, 2013, № 11. – С. 18-25.
- [6] Голод В. М., Емельянов К. И. Системный анализ морфологической эволюции дендритной структуры стали // Черные металлы, 2014, № 4 (988). – С. 49-54.
- [7] Han Q., Hu H., Zhong X. Models for the isothermal coarsening of secondary dendrite arms in multicomponent alloys // Metall. Mater. Trans., 1997, v. 28B, p.1185-1187.

### Моделирование интенсивного ударного воздействия на аморфный сплав Fe<sub>80</sub>P<sub>20</sub>.

А. Ю. Дроздов<sup>1</sup>, Н. М. Созонова<sup>1</sup>, В. Я. Баянкин<sup>1</sup>.

<sup>1</sup>Физико-технический институт УрО РАН, Ижевск (less@ftiudm.ru)

Со времени получения аморфных металлических материалов ведутся интенсивные экспериментальные и теоретические исследования их свойств и структуры. Разработка методов получения аморфных металлов и широкая их доступность привела к внедрению этих материалов в практику и к появлению огромного числа работ, посвященных исследованию их физических свойств. Комплексное исследование закономерностей эволюции структуры и механических свойств металлических сплавов, подвергнутых ионному и лазерному облучению, а также установление причин перераспределения компонентов сплава является актуальным направлением фундаментальных и прикладных исследований. При воздействии коротких лазерных импульсов (пико-, фемтосекундного диапазона) на металлы наблюдается возникновение сверхупругих ударных волн. Это ударные волны, движущиеся как упругие, несмотря на то, что давление за фронтом такой волны значительно превышает классический предел упругости Гюгонио. Часто одновременно с такой волной наблюдается следующая за ней пластическая ударная волна, причем в течение заметного времени они движутся практически синхронно, как единая сложная волна.

В данной работе изучалось поведение аморфного сплава Fe<sub>80</sub>P<sub>20</sub> после интенсивного ударного воздействия. После воздействия ударника и прохождения ударной волны через объем происходит нагрев образца с температуры 300 К до 1030 К, что меньше температуры плавления данного материала. С помощью разработанного приложения получены графики зависимости изменения температуры аморфного материала при воздействии на него пикосекундного лазерного импульса от расстояния со временем. В результате решения системы уравнений теплопроводности вычислено время выравнивания температур электронной и ионной подсистем материала и получены графики распределения температуры по поверхности и глубине образца. После распространения ударной волны расстояние между ближайшими соседними атомами увеличивается. За фронтом волны, где давление повышено, идет волна разгрузки. Образование дефектов происходит за фронтом ударной волны. Изучение структуры аморфного сплава Fe<sub>80</sub>P<sub>20</sub> после прохождения ударной волны через 7 пс после удара позволяет предположить, что атомы фосфора начинают образовывать кластеры, равномерно распределенные по всему объему модельного образца.

**Модель формирования мелкозернистой структуры в процессе непрерывной динамической рекристаллизации**

Н. С. Кондратьев<sup>1</sup>, П. В. Трусов<sup>1</sup>, Т. В. Останина<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Пермский национальный исследовательский университет, Россия, 614990, г. Пермь, Комсомольский проспект 29

Целью настоящей работы является построение многоуровневой статистической модели для описания непрерывной динамической рекристаллизации, основанной на физической теории упруговязкопластичности [1]. Математическая модель базируется на проведенном тщательном анализе физических механизмов динамической рекристаллизации. Аналитический обзор научной литературы позволил выявить общие закономерности в механизмах непрерывной рекристаллизации – ротационной, геометрической или ячеистой. Для реализации последних необходимо выделение разориентированных областей кристаллической решетки с большеугловыми границами. Дальнейшей диффузионный рост «зародышей» рекристаллизации обусловлен температурными воздействиями и приложенными напряжениями. Задача построения физически обоснованной модели фрагментации в рамках описания непрерывной динамической рекристаллизации является одной из ключевых. Полагается, что в тройных стыках зерен образуются дефекты дисклинационного типа [2], которые возникают вследствие несовместности пластических деформаций соседних зерен, обусловленной различной ориентацией примыкающих к ним зерен. Поля напряжений стыковых дисклинаций приводят к формированию частичной дисклинации внутри объема кристаллита. Указанную дисклинацию в первом приближении предполагается рассматривать подобно стенке дислокаций. В процессе продолжающейся пластической деформации мощность дисклинаций возрастает, увеличивая разориентацию подобластей вплоть до появления высокоугловых границ. Параллельно проходящие процессы динамического возврата приводят к формированию малодефектных зерен. В результате этого за счет разности плотности дефектов соседних зерен создаются благоприятные условия для роста рекристаллизованных зерен с низкой плотностью дефектов. Предлагаемый подход к описанию пластического деформирования позволяет рассмотреть эволюцию не только дефектной, но и зеренной структуры, что в моделях статистического типа, как правило, не делается.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (№16-31-60002-мол-а-дк, № 16-31-00215-мол-а, № 15-08-06866-а).

[1] Трусов П.В., Швейкин А.И. Многоуровневые физические модели моно- и поликристаллов. Статистические модели // Физическая мезомеханика. – 2011. – Т. 14. – № 4. – С. 17-28.

[2] Rybin V.V., Zisman A.A., Zolotarevsky N.Yu. Junction disclinations in plastically deformed crystals // Acta metal. mater. –1993. – Vol. 41, No. 7. – Pp. 2211-2217.

## Предел резкой границы для фазово–полевой модели затвердевания концентрированных растворов

В. Г. Лебедев<sup>1,2</sup>, А. А. Новокрещенова<sup>1</sup>, П. К. Галенко<sup>3,4</sup>

<sup>1</sup>Удмуртский государственный университет, 426034 Россия, г. Ижевск

<sup>2</sup>НПО МКМ, 426072 Россия, г. Ижевск, ул. Героя России И. Закирова, 24

<sup>3</sup>Friedrich–Schiller–Universität Jena, Physikalisch-Astronomische Fakultät,  
D 07743 Jena, Germany

<sup>4</sup>Уральский Федеральный Университет, 620002 Россия, Екатеринбург

Метод фазового поля является универсальным подходом к моделированию широкого класса явлений, возникающих при затвердевании растворов [1]. Продолжительное время объектом исследования в таком подходе оставались только разбавленные растворы. Важные шаги к описанию концентрированных растворов были сделаны в работах [2-6], предлагающих различные механизмы реализации процессов перераспределения примеси на границе фаз. Один из распространенных подходов к изучению свойств фазово-полевых моделей и их верификации состоит в изучении предела «резкой границы» [7], позволяющего стандартными методами асимптотического анализа сопоставить динамику поведения фазово–полевой модели с ранее изученной динамикой [8, 9].

Уравнения исследуемой модели [6] имеют вид:

$$\tau_\phi \ddot{\phi} + \dot{\phi} = M_\phi (\sigma \nabla^2 \phi - Wg' - \Omega p'), \quad (1)$$

$$\begin{cases} p^S \dot{x}^S = -\nabla \cdot J^S + F - p'(\phi) \dot{\phi} \theta(-\Omega) \Delta x, \\ p^L \dot{x}^L = -\nabla \cdot J^L - F - p'(\phi) \dot{\phi} \theta(\Omega) \Delta x. \end{cases} \quad (2)$$

Для описания диффузной границы между фазами, используется переменная фазового поля  $\phi$ , принимающая значения  $\phi=0$  в жидкой фазе и  $\phi=1$  в твердой. Объемные свойства внутри диффузной границы интерполируются с помощью гладких функций вида [7]:  $p(\phi) = \phi^2(3 - 2\phi)$ ,  $g(\phi) = \phi^2(1 - \phi^2)$ . Выбирая интерполяционные функции для фаз как  $p^S(\phi) = p(\phi)$ ,  $p^L(\phi) = p(1 - \phi) = 1 - p(\phi)$ , и используя обозначения

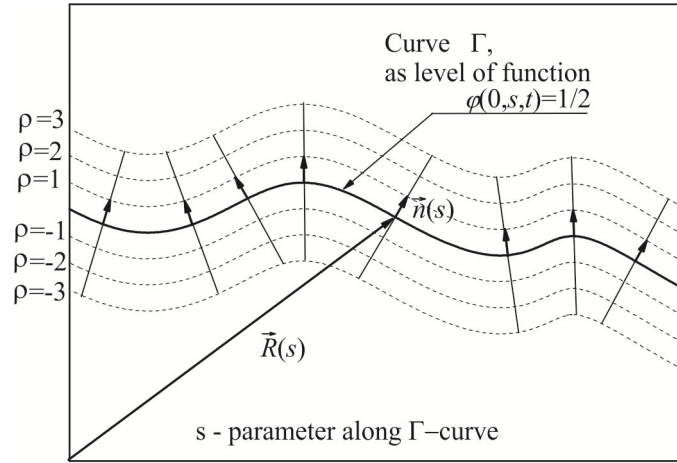
$$\Omega = \Omega_{LS} \theta(\Omega_{SL}) - \Omega_{SL} \theta(\Omega_{LS}), \quad (3)$$

для движущей силы границы фазового перехода, где

$$\begin{cases} \Omega_{LS} = G^S(x^S) - G^L(x^L) - \mu^S(x^S) \Delta x, \\ \Omega_{SL} = G^L(x^L) - G^S(x^S) + \mu^L(x^L) \Delta x, \end{cases} \quad (4)$$

$x^\alpha$  — концентрации примеси в фазах,  $\Delta x = x^S - x^L$ , потенциалы  $G^\alpha(x^\alpha)$  и химические потенциалы  $\mu^\alpha(x^\alpha) = (\partial G^\alpha / \partial x^\alpha)$  заданы как функции мольных концентраций  $x^\alpha$ , при постоянных значениях температуры  $T$ , и  $\Delta \mu = \mu^S - \mu^L$ . Потоки  $J^\alpha$  подчиняются закону Максвелла–Катанео [10]:

$$\tau_\alpha J^\alpha + J^\alpha = -D_\alpha \nabla x^\alpha,$$



$$F = -q_0(T)c_i^2 D(\varphi)(\nabla \varphi)^2 \Delta \mu / RT,$$

где  $c_i = x^L p^L \theta(-\Delta \mu) - x^S p^S \theta(\Delta \mu)$ .

Ограничимся двумерной ситуацией, показанной на рисунке, считая, что область  $V_L$  жидкой фазы и область  $V_S$  твердой фазы разделены межфазной границей  $\Gamma$ . Переходная область между чистыми фазами соответствует пространственному масштабу

порядка  $2\delta$  по нормали к границе, направленной из твердой фазы в жидкую. На мезоскопических масштабах граница  $\Gamma$  является гладкой кривой, в каждый момент времени  $t$  параметризованной как  $\Gamma(s, t)$ , где  $s$  — длина вдоль кривой  $\Gamma$ . Следуя работе [7], определим переход к криволинейным координатам и раскладывая каждую из функций  $f(\xi, s, t)$  в ряд по малому параметру  $\bar{\delta}$ , получаем

$$f(\xi, s, t) = f_0(\xi, s, t) + f_1(\xi, s, t)\bar{\delta} + \dots \quad (5)$$

Переходя в систему отсчета движущейся границы  $\Gamma$ , перепишем уравнения (1)–(2) во внутренней области с учетом разложений (5). Уравнение для фазового поля (1) сведется к выражению

$$\begin{aligned} & (\alpha - \bar{\tau}_\varphi v_n^2) \varphi'' - 2\alpha g'(\varphi) = \\ & = [\alpha \Omega p'(\varphi) - (v_n + a_n \bar{\tau}_\varphi + \alpha \kappa) \varphi'] \bar{\delta} + O(\bar{\delta}^2). \end{aligned} \quad (6)$$

Уравнения динамики примеси (2) примут вид

$$\begin{cases} \bar{q}_0 \Delta \mu \varphi'^2 = [v_n (p^S x^{S'} + p'(\varphi) \varphi' \Delta x \theta(-\Omega)) - u_\xi^{S'}] \bar{\delta} + O(\bar{\delta}^2), \\ \bar{q}_0 \Delta \mu \varphi'^2 = -[v_n (p^L x^{L'} + p'(\varphi) \varphi' \Delta x \theta(\Omega)) - u_\xi^{L'}] \bar{\delta} + O(\bar{\delta}^2), \end{cases} \quad (7)$$

где  $\bar{q}_0 = q_0 c_i^2 D(\varphi) / RT D_L$ . Изменение «трансверсальных» компонент потоков вблизи кривой  $\Gamma$  будет определяться соотношениями

$$-v_n \bar{\tau}_\alpha u_\xi^{\alpha'} + \bar{\delta} u_\xi^\alpha = -\bar{D}_\alpha x^{\alpha'} + O(\bar{\delta}^2). \quad (8)$$

В нулевом порядке по  $\bar{\delta}$ , используя уравнение (6), находим

$$(\alpha - \bar{\tau}_\varphi v_n^2) \varphi_0'' - 2\alpha g'(\varphi_0) = 0, \quad (9)$$

из которого, с учетом граничных условий, получаем решение для профиля фазового поля в виде «кинка»:  $\varphi_0 = 0.5[1 - (\xi/\sqrt{1 - \bar{\tau}_\varphi v_n^2/\alpha})]$ , с «релятивистским» ограничением на скорость фронта  $v_n^2 \leq \alpha/\bar{\tau}_\varphi$ . В первом порядке по  $\bar{\delta}$  уравнение (6) определяет  $\varphi_1$  через правую часть  $f_0$ , вычисленную на функциях нулевого порядка разложения. Прямым дифференцированием (9) нетрудно убедиться, что

$$\begin{aligned} \hat{L} \varphi_1 & \equiv (\alpha - \bar{\tau}_\varphi v_n^2) \varphi_1'' - 2\alpha g''(\varphi_0) \varphi_1 = \\ & = [\alpha \Omega_0 p'(\varphi_0) - (v_n + a_n \bar{\tau}_\varphi + \alpha \kappa) \varphi_0'] \equiv f_0, \end{aligned} \quad (10)$$

$\varphi_0'(\xi)$  является нулевой модой оператора  $\hat{L}$ :  $\hat{L} \varphi_0'(\xi) = 0$ .



Наличие нулевой моды оператора  $\hat{L}$  в правой части  $f_0$  уравнения (10) приводит к появлению резонанса в первом порядке по  $\bar{\delta}$ , и, как следствие, к нарушению асимптотического разложения (5). Чтобы избавиться от резонанса, введем скалярное произведение вида

$$\langle \varphi | \psi \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(\xi) \psi(\xi) d\xi, \quad (11)$$

относительно которого оператор  $\hat{L}$  будет самосопряжен. Тогда наличие нулевой моды в первом порядке по  $\bar{\delta}$  эквивалентно ортогональности  $\varphi'_0(\xi)$  и правой части  $f_0$  уравнения (10), откуда получаем связь между кинематикой движения фронта и термодинамикой в виде

$$v_n + a_n \bar{\tau}_\varphi + \alpha \kappa = \frac{\alpha}{\gamma} \int_{-\infty}^{+\infty} \Omega_0 p'(\varphi_0) \varphi'_0(\xi) d\xi, \quad (12)$$

где  $\gamma = \langle \varphi'_0 | \varphi'_0 \rangle$ .

Из полученных уравнений следуют законы сохранения примеси на границе условие на потоки примеси  $u_\xi^L |_L - u_\xi^S |_S = v_n (x^L |_L - x^S |_S)$ , и ограничение на скорость движения фронта

$$v_n^2 \leq \min \left\{ \frac{\bar{D}_S}{\bar{\tau}_S}, \frac{\bar{D}_L}{\bar{\tau}_L}, \frac{\alpha}{\bar{\tau}_\varphi} \right\}.$$

- [1] Provatas N., Elder K. Phase-Field Methods in Materials Science and Engineering // Wiley-VCH Weinheim, 2010.
- [2] Plapp M. // Phys. Rev. E, 2011. V. 84. №3. P. 03160.
- [3] Danilov D. A., Lebedev V. G., Galenko P. K. // J. Non-Equilib. Thermodyn. 2014. V. 39. № 2. P. 93.
- [4] Hillert M., Rettenmayer V. // Acta Mater. 2003. V. 51. P. 2803.
- [5] Steinbach I., Zhang L., Plapp M. // Acta Mater. 2012. V. 60. P. 2689.
- [6] Лебедев В. Г., Галенко П. К. // Расплавы, 2016. № 3, (в печати).
- [7] Kessler D. // J. of Crystal Growth. 2001. V. 224. P. 175.
- [8] Galenko P., Danilov D. // Phys. Lett. A. 1997. V. 235. № 3. P. 271.
- [9] Galenko P., Danilov D. // J. Crys. Growth. 1999. V. 197. № 4. P. 992.
- [10] Galenko P., Jou D. // Phys. Rev. E. 2005. V. 71. P. 04

### Об описании процесса направленного затвердевания в рамках неизотермической модели фазового поля

В. Г. Лебедев<sup>1,2</sup>, А. А. Лебедева<sup>1</sup>, А. А. Новокрещенова<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Удмуртский государственный университет, 426034 Россия, г. Ижевск

<sup>2</sup>НПО МКМ, 426072 Россия, г. Ижевск, ул. Героя России И. Закирова, 24

Обычно, для процессов затвердевания в растворах считается, что они полностью контролируются диффузией и поэтому вполне допустимо изотермическое

приближение. Тем не менее, согласованное термодинамическое описание процессов фазового перехода должно естественным образом учитывать также влияние температуры, что особенно актуально для сильно-неравновесных явлений.

Используя метод фазового поля [1] равновесную плотность потенциала Гиббса бинарной системы запишем в виде с помощью стандартных обозначений:

$$G_{eq}(r, t) = \sum_{\alpha} \xi^{\alpha}(\varphi) G^{\alpha}(T, x^{\alpha}) + Wg(\varphi), \quad (1)$$

так что полная энтропия с учетом неравновесных вкладов может быть записана в виде:

$$S(t) = \int \left[ \sum_{\alpha} \xi^{\alpha}(\varphi) G_T^{\alpha}(T, x^{\alpha}) + \frac{1}{2} \sum_{\alpha} \chi_{\alpha} J_{\alpha}^2 + \frac{1}{2} \sigma (\nabla \varphi)^2 + \frac{1}{2} \beta J_T^2 + \frac{1}{2} \gamma \dot{\varphi}^2 \right] dV. \quad (2)$$

Здесь и далее  $J_T, J_{\alpha}$  соответствуют тепловым и диффузионным потокам,  $G_T, G_{\alpha}, G_{\varphi}$  - обозначают частные производные по  $T, x^{\alpha}, \varphi$ . Из закона сохранения внутренней энергии следует уравнение теплопроводности

$$C_p \dot{T} = -\nabla J_T - \dot{\varphi} (G_{\varphi} - T G_{T\varphi}) - \sum \dot{x}_{\alpha} (G_{\alpha} - T G_{T\alpha}), \quad (3)$$

а закон сохранения вещества, следуя [2], запишем отдельно для каждой из фаз в виде

$$\begin{cases} p^S \dot{x}^S = -p'(\varphi) \dot{\varphi} \theta(-\Omega) \Delta x - \nabla \cdot J_S + F, \\ p^L \dot{x}^L = -p'(\varphi) \dot{\varphi} \theta(\Omega) \Delta x - \nabla \cdot J_L - F, \end{cases} \quad (4)$$

где величина движущей силы для движения границы равна

$$\Omega = \Omega_{SL} \theta(\Omega_{LS}) - \Omega_{LS} \theta(\Omega_{SL}), \quad (5)$$

а с диссипативным источником  $F$  в (4) связан обмен примесью через границу фаз [2], поэтому его ищем в виде:

$$F = c_i q \cdot \nabla \varphi. \quad (6)$$

Концентрация на границе  $c_i$  выбирается в зависимости от соотношения химических потенциалов фаз

$$c_i = x^L p^L \theta(-\Delta \mu) + x^S p^S \theta(\Delta \mu),$$

где  $\Delta \mu = \mu^S - \mu^L$ .

Условие монотонного возрастания полной энтропии [3] приводит к уравнениям динамики в виде

$$\tau_{\varphi} \ddot{\varphi} + \dot{\varphi} = M_{\varphi} \left( \sigma \nabla^2 \varphi - \frac{1}{T} (Wg' + \Omega p') \right), \quad (7)$$

$$\tau_{\alpha} \frac{\partial}{\partial t} J_{\alpha} + J_{\alpha} = -M_{\alpha} \nabla \frac{\mu^{\alpha}}{T}, \quad (8)$$

$$\tau_T \frac{\partial}{\partial t} J_T + J_T = -M_T \nabla \frac{1}{T}. \quad (9)$$

Уравнения (3), (4), (7)-(9) образуют полную систему уравнений, которая совместно с потенциалами Гиббса для Mg-6%Al [4] исследовалась численно в

одномерном случае для задачи направленного затвердевания. Для сравнения исследовалось движение плоского фронта при постоянном градиенте температур с учетом и без учета выделения тепла в уравнении (3).

- [1] Provatas N., Elder K. Phase-Field Methods in Materials Science and Engineering // Wiley-VCH Weinheim, 2010.  
 [2] Лебедев В. Г., Галенко П. К. // Расплавы, 2016. № 3, (в печати).  
 [3] Danilov D. A., Lebedev V. G., Galenko P. K. // J. Non-Equilib. Thermodyn. 2014. V. 39. № 2. P. 93.  
 [4] Available at: <http://cpddb.nims.go.jp/cpddb/periodic.htm> (accessed 25.02.2016)

### Фазово-полевая модель перераспределения примеси на границе фаз

В. Г. Лебедев<sup>1,2</sup>, П. К. Галенко<sup>3,4</sup>

<sup>1</sup>Удмуртский государственный университет, 426034 Россия, г. Ижевск

<sup>2</sup>НПО МКМ, 426072 Россия, г. Ижевск, ул. Героя России И. Закирова, 24

<sup>3</sup>Friedrich-Schiller-Universität Jena, Physikalisch-Astronomische Fakultät, D-07743 Jena, Germany

<sup>4</sup>Уральский Федеральный Университет, 620002 Россия, Екатеринбург

Одной из центральных проблем метода фазового поля является описание процессов перераспределения примеси при затвердевании (плавлении) концентрированных систем (растворов или расплавов). Термодинамические основы фазовых превращений в концентрированных системах заложены Хиллертом с соавторами [2, 3], недавно подобная конструкция использовалась в моделях [4, 5] при определении движущих сил фронта затвердевания через разность потенциалов Гиббса. Развиваемая модель может быть применена при оценке химической неоднородности и микроструктуры в процессах быстрого плавления и кристаллизации, например, при высокоскоростной и интенсивной лазерной обработке поверхностей [6].

Плотность потенциала Гиббса бинарной системы запишем в виде с помощью стандартных обозначений:

$$G_{eq}(r, t) = \sum_{\alpha} p^{\alpha}(\varphi) G^{\alpha}(x^{\alpha}) + Wg(\varphi), \quad (1)$$

так что полная энергия с учетом неравновесных вкладов может быть записана в виде:

$$G^{sys}(t) = \int [\sum_{\alpha} p^{\alpha}(\varphi) G^{\alpha}(x^{\alpha}) + Wg(\varphi) + \frac{1}{2} \sigma (\nabla \varphi)^2 + \frac{1}{2} \sum_{\alpha} \beta_{\alpha} J_{\alpha}^2 + \frac{1}{2} \gamma \dot{\varphi}^2] dV, \quad (2)$$

Вместо единого закона сохранения вещества рассмотрим законы сохранения по отдельности в каждой из фаз:

$$\begin{cases} p^S \dot{x}^S = -\nabla \cdot J_S - p'(\varphi) \dot{\varphi} \Delta x \theta(\dot{\varphi}) + F, \\ p^L \dot{x}^L = -\nabla \cdot J_L - p'(\varphi) \dot{\varphi} \Delta x \theta(-\dot{\varphi}) - F, \end{cases} \quad (3)$$

где  $F$  – диссипативный источник, обеспечивающий обмен примесью на границе фаз,  $\theta(\dot{\varphi})$  – функция Хэвисайда.

Диссипативный источник  $F$  в (3) связан с обменом примесью через границу фаз [2] и выбирается:

$$F = c_i q \cdot \nabla \varphi. \quad (4)$$

Концентрация на границе  $c_i$  выбирается в зависимости от соотношения химических потенциалов фаз

$$c_i = x^L p^L \theta(-\Delta\mu) + x^S p^S \theta(\Delta\mu),$$

где  $\Delta\mu = \mu^S - \mu^L$ .

Условие монотонного убывания полного потенциала Гиббса приводит к уравнениям динамики в виде

$$\tau_\varphi \ddot{\varphi} + \dot{\varphi} = M_\varphi (\sigma \nabla^2 \varphi - W g' - \Omega p'), \quad (5)$$

$$q = -q_0 c_i \Delta\mu \nabla \varphi, \quad (6)$$

$$\tau_\alpha \frac{\partial}{\partial t} J_\alpha + J_\alpha = -M_\alpha \nabla \mu^\alpha \equiv -D_\alpha \nabla x^\alpha, \quad (7)$$

Можно показать, что аргумент функции Хэвисайда вместо скорости изменения фазового поля заменяется на величину движущей силы для движения границы так, что в выражении (5)

$$\Omega = \Omega_{SL} \theta(\Omega_{LS}) - \Omega_{LS} \theta(\Omega_{SL}), \quad (8)$$

$$\Omega_{LS} = G^L(x^L) - G^S(x^S) + \mu^L(x^L)(x^S - x^L), \quad (9)$$

$$\Omega_{SL} = G^S(x^S) - G^L(x^L) - \mu^S(x^S)(x^S - x^L). \quad (10)$$

Соответствующие уравнения динамики примеси переписутся в виде:

$$\begin{cases} p^S \dot{x}^S = -p'(\varphi) \dot{\varphi} \theta(-\Omega) \Delta x - \nabla \cdot J_S + F, \\ p^L \dot{x}^L = -p'(\varphi) \dot{\varphi} \theta(\Omega) \Delta x - \nabla \cdot J_L - F, \end{cases} \quad (11)$$

где источник  $F$ , с учетом (6), определен выражением

$$F = -q_0 c_i^2 \Delta\mu (\nabla \varphi)^2. \quad (12)$$

В условиях равновесия все производные по времени от динамических переменных и диффузионные потоки равны нулю, поэтому из уравнений (9) находим, что во всей области  $\mu_0^L = \mu_0^S = \mu_0 = const$ . Второе условие термодинамического равновесия сводится к равенству гранд-потенциалов фаз

$$[\omega_0]_L^S \equiv \omega_0^S - \omega_0^L = 0. \quad (13)$$

Для качественной проверки предложенной модели проведено численное моделирование процесса направленного затвердевания в системе Si–As для потенциалов Гиббса [7].

Численно моделировалась одномерная задача движения фронта на бесконечном интервале при заданном начальном температурном переохлаждении (по отношению к ликвидусу) системы. При небольших движущих силах модель демонстрирует стремление выровнять химический потенциал фаз за счет перераспределения концентрации примеси между фазами.

С увеличением вытесненной в жидкую фазу примеси химические потенциалы становятся равными, а движущая сила кинетики межфазной границы уменьшается. Соответственно, процесс затвердевания выходит на квазиравновесный режим. На больших временах расчета скорость падает до нуля, а распределение концентраций постепенно приближается к равновесным.

Наиболее интересной является динамика модели при больших движущих силах, когда плотность потенциала Гиббса, соответствующая начальному составу жидкости  $x_0$  оказывается выше значения плотности потенциала Гиббса для твердой фазы того же состава, см. рис. В этом случае происходит безразделительное затвердевание с полным захватом примеси фронтом [8]. Такая динамика модели существенно отличается от динамики предыдущих моделей [9, 10], где из-за суперпозиции потоков и фазовых полей внутри диффузной границы образовывался характерный выступ (spike) на графиках концентраций, который, возможно, является артефактом этих моделей. В представленной модели такой выступ (spike) отсутствует, как и в работе [5], хотя это обусловлено различными причинами. В представленной модели отсутствует источник такого выступа (диффузионные потоки отделены от фазового поля), а в работе [5] отсутствие выступа достигнуто достаточно нетривиальной модификацией модели за счет введения эффективной мобильности для диффузии примеси.

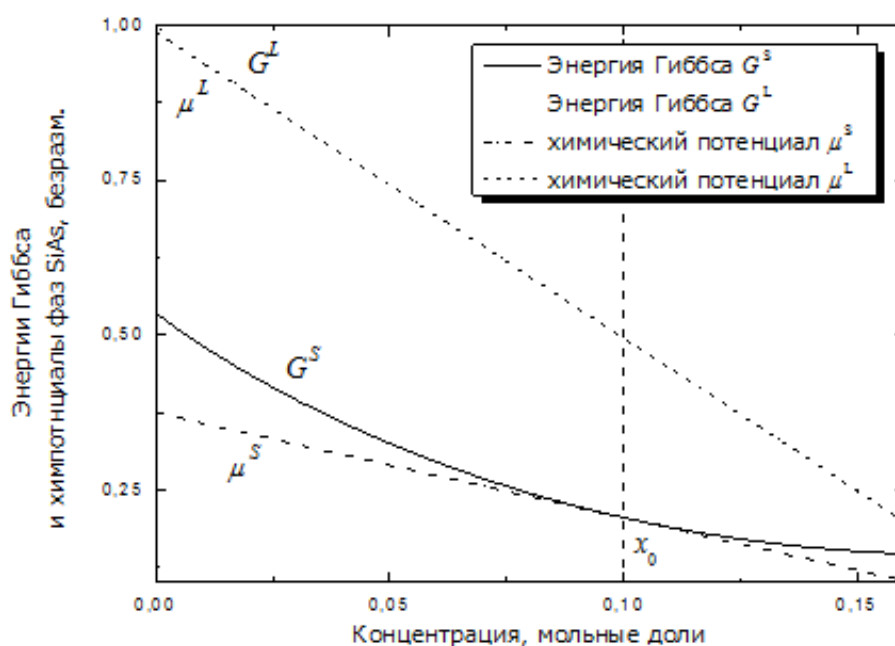


Рис. 4: Потенциалы Гиббса  $G^L$ ,  $G^S$  и химические потенциалы  $\mu^L$ ,  $\mu^S$  в точке  $\varphi = 1/2$  при полном захвате примеси в случае больших движущих сил для раствора Si–As.

- [1] Provatas N., Elder K. Phase-Field Methods in Materials Science and Engineering. Weinheim. Wiley-VCH, 2010.  
 [2] Hillert M., Rettenmayr V. // Acta Mater. 2003. V. 51. 10. P. 2803–2809.

- [3] Hillert M., Odqvist J., Agren J. // Scripta Mater. 2004. V. 50. P. 547–550.
- [4] Steinbach I., Zhang L., Plapp M. // Acta Mater. 2012. V. 60. P. 2689–2701.
- [5] Wang H., Galenko P.K., Zhang X., Kuang W., Liu F., Herlach D.M. // Acta Mater. 2015. V. 90. P. 282–291.
- [6] Кривилев М.Д., Харанжевский Е.В., Лебедев В.Г., Данилов Д.А., Данилова Е.В., Галенко П.К. // ФММ 2013. Т. 114. 10. С. 871–893.
- [7] Wang H., Liu F., Zhai H., Wang K. // Acta Mater. 2012. V. 60, P. 1444.
- [8] Galenko P. // Phys. Rev. E 2007. V. 76. P. 031606.
- [9] Lebedev V.G., Abramova E.V., Danilov D.A., Galenko P.K. // Int. J. Mat. Res. (formely Z. Metallknd.) 2010. V. 101. 4. P. 473–479.
- [10] Galenko P.K., Abramova E.V., Jou D., Danilov D.A., Lebedev V.G., Herlach D.M. // Phys. Rev. E 2011. V. 84. P. 041143.

### Использование представления текстурных компонент в пространстве Родрига для их визуализации и количественного анализа

С. М. Мокрова<sup>1</sup>, Р. П. Петров<sup>1</sup>, В. Н. Милич<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Физико-технический институт УрО РАН, 426000, Россия, г. Ижевск, ул. Кирова, 132.

Для количественного описания текстуры материала, необходимо определить ориентации кристаллитов (зерен) в системе координат, связанной с образцом, а также получить оценки об объеме материала, имеющего то или иное множество ориентировок. При анализе текстур используются различные способы описания ориентаций, но возникает проблема представления текстурных данных для наглядного восприятия и количественной оценки текстурных компонент. В практике текстурного анализа ориентации кристаллитов описываются с помощью индексов Миллера, матриц, углов Эйлера, векторов ось – угол, а в последние два десятилетия – кватернионов и векторов Родрига. Хотя кватернионы находят большее применение при обработке текстурных данных, для визуализации текстуры наиболее удобным представлением является векторное изображение текстуры в трехмерном пространстве Родрига [1].

Действительно, из теоремы Эйлера о конечных поворотах следует, что ориентация может быть записана в виде некоторого единичного вектора  $\vec{n}$ , который определяет положение оси вращения, и угла поворота  $\theta$  вокруг этой оси, совмещающие систему координат образца с системой координат зерна. Тогда вектор Родрига определяется выражением  $\vec{R} = \vec{n} * \tan(\theta / 2)$ , где единичный вектор  $\vec{n}$  определяет направление оси вращения, а длина вектора  $\vec{R}$  равна тангенсу половинного угла вращения  $\theta$ .

В докладе представлены результаты анализа текстурных компонент по прямым полюсным фигурам с использованием ранее разработанной программы [2]. Программа формирует список всех ориентаций и соответствующих им векторов Родрига. При этом каждой ориентации присваивается вес, пропорциональный объему материала для данной ориентации. Таким образом, в пространстве Родрига формируются облака точек, каждая из которых соответствует вершине вектора.

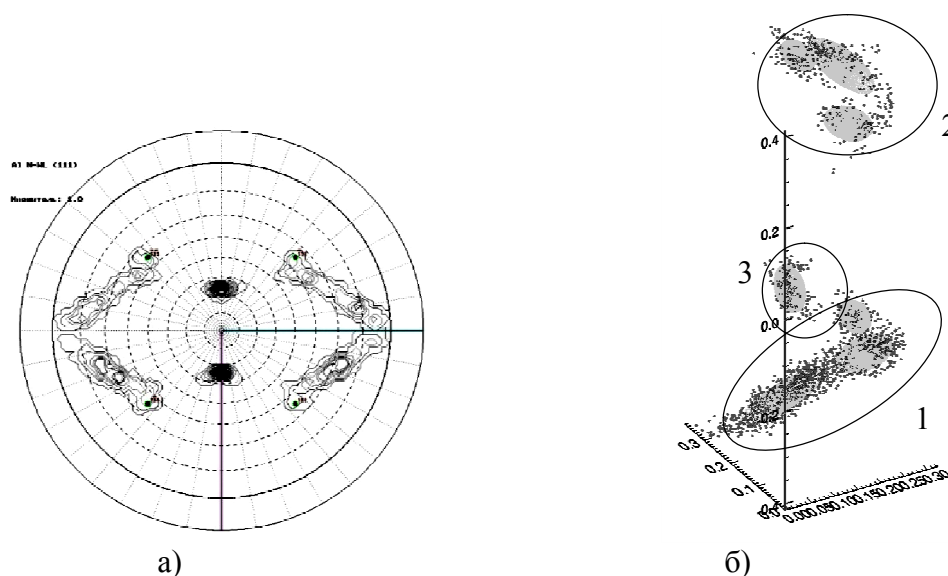


Рис 1. а) прямая полюсная фигура {111}; б) пространство Родрига, разбитое на 7 кластеров, аппроксимированных эллипсоидами рассеяния.

В интерактивном режиме методом визуального анализа изображения векторов в пространстве Родрига определяется первоначальное количество кластеров. С помощью минимаксного алгоритма кластеризации [3] облака разделяются на кластеры – текстурные компоненты. В каждом кластере по приведенным ниже формулам вычисляются координаты среднего вектора:

$$\bar{R}_{cp} = \sum_{i=1}^n \bar{r}_i p(\bar{r}_i), \quad \text{где} \quad p(\bar{r}_i) = \frac{v_i}{\sum_{i=1}^n v_i},$$

где  $\bar{r}_i$  - координаты векторов Родрига в кластере,  $v_i$  - вес вектора Родрига,  $n$  – количество векторов в кластере. Для вычисления максимального угла рассеяния кластера  $\theta_{\max}$  используется формула вычитания конечных поворотов [4]:

$$\theta_{\max} = \max \left[ 2 * \operatorname{atg} \left( \frac{1}{1 + \frac{1}{4} R_i \cdot R_{cp}} \left( R_{cp} - R_i + \frac{1}{2} R_i \times R_{cp} \right) \right) \right],$$

где  $\bar{R}_{cp}$  – это средний вектор Родрига в кластере,  $\bar{R}_i$  – текущий вектор Родрига. Если  $\theta_{\max}$  больше некоторого заданного порога, то с помощью минимаксного алгоритма исходное облако точек разбивается на большее количество кластеров.

Эта процедура повторяется, пока рассеяние текстурных компонент не станет удовлетворительным.

Когда разбиение на кластеры завершено, для каждого кластера рассчитывается матрица ковариации, из которой вычисляются собственные вектора и собственные значения кластера. По этим данным строится эллипсоид, показывающий рассеяние текстурной компоненты относительно осей трехосного эллипсоида.

С помощью данного алгоритма была исследована прямая полюсная фигура алюминиевой фольги (Рис.1а) для плоскостей отражения  $\{111\}$  [5]. В пространстве Родрига облака ориентаций хорошо подразделяются на 3 кластера (Рис.1б), но первый и второй кластеры имеют большое рассеяние -  $27^\circ$  и  $25^\circ$  соответственно. Поэтому предлагается разбить на 7 кластеров, которые будут более точно описывать текстуру.

В докладе приводятся вычисленные параметры для текстурных компонент.

**Выводы.** Для полного описания текстуры материала необходимо представление текстурных данных, совмещающее наглядное восприятие и возможность количественной оценки текстурных компонент. Использование пространства Родрига позволяет удобно визуально представлять текстурные компоненты и формировать кластерное описание текстуры, вычисляя основные параметры текстурных компонент.

- [1] Франк Frank F. C. Orientation Mapping // Proc. of the ICOTOM-8 Conference. The Metallurg. Society. 1988. – P. 3.
- [2] Мокрова С.М., Петров Р.П., Милич В.Н., Титоров Д.Б. Анализ текстурных компонент металлов по прямым полюсным фигурам на основе объектно-векторного представления плоскостей отражения.// Заводская лаборатория. Диагностика материалов. 2014. Т.80. №5. – С.30-34.
- [3] Ту Дж., Гонсалес Р. Принципы распознавания образов – М: Мир, 1978, 412 с.
- [4] Лурье А.И. Аналитическая механика – М: Гос. изд-во Физико-математической литературы, 1961, 824 с.
- [5] Титоров Д.Б., Волков В.А., Лебедев В.П., Минеев Ф.В., Титорова Д.В. Текстуры преобразования при отжиге алюминиевых фольг. 1. Сильные текстурные компоненты //ФММ. 2006. Т.102. №1. С. 1 – 7.



**Кинетические и термодинамические характеристики  
фазовых переходов первого рода  
на основе моделирования молекулярной динамики**

А. В. Мокшин<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Казанский (Приволжский) федеральный университет, Институт физики

Образование зародышей новой фазы и их последующий рост представляет собой общий сценарий протекания фазовых переходов первого рода в случае метастабильных систем вне области спинодали. В соответствии с классической теорией нуклеации ожидается, что с увеличением уровня метастабильности пространственный масштаб, характеризующий размер критического зародыша (критический размер), уменьшается: устойчивый рост зародыша становится возможным в случае, когда число структурных единиц (атомов, молекул, частиц), его образующих, достигает значений  $\geq 10$ . При таких условиях применение традиционных экспериментальных методов для исследования начальных этапов фазовых переходов, соотносимых с процессами зародышеобразования и роста, становится затруднительным. Однако, с другой стороны, именно наличие малых характерных пространственных масштабов открывает широкие возможности для использования методов моделирования молекулярной динамики.

В настоящей работе будут представлены методы и подходы, позволяющие в рамках статистического рассмотрения выполнить на основе данных моделирования молекулярной динамики количественный расчет практически всех характеристик процессов зародышеобразования и роста: скорости стационарной и нестационарной нуклеации (зародышеобразования), скорость роста зародышей, скорость фазового перехода, средние времена ожидания зародышей определенного размера, время индукции, размер критического зародыша, свободную поверхностную энергию, фактор Зельдовича, форм-фактор зародыша, а также оценить наиболее вероятный закон роста [1-5].

Работа частично поддержана РФФИ (грант № 14-02-00335-а), а также Грантом Президента РФ (для молодых докторов наук) (грант № МД-5792.2016.2).

- [1] A.V. Mokshin, B.N. Galimzyanov, J. Chem. Phys. **142**, 104502 (2015).
- [2] A.V. Mokshin, B.N. Galimzyanov, J. Chem. Phys. **140**, 024104 (2014).
- [3] A.V. Mokshin, B.N. Galimzyanov, J.-L. Barrat, Phys. Rev. E. **87**, 062307 (2013).
- [4] A.V. Mokshin, B.N. Galimzyanov, J. Phys. Chem. B **116**, 11959 (2012).
- [5] A.V. Mokshin, J.-L. Barrat, Phys. Rev. E **82**, 021505 (2010).

**Бегущие волны в профиле фазового поля:  
точные аналитические решения гиперболического уравнения Аллена-Кана**

И. Г. Низовцева<sup>1,2</sup>, П. К. Галенко<sup>1</sup>, Д. В. Александров<sup>2</sup>, С. В. Вихерев<sup>2</sup>,  
Е. А. Титова<sup>2</sup>, И. С. Сухачев<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Университет Йены им. Фридриха Шиллера, Физико-астрономический факультет, г. Йена, Лёбдерграбен 32, 07743 Германия

<sup>2</sup> Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, ул. Ленина, 51, 620000 Россия

Уравнение Аллена-Кана в частных производных [1] было предложено для анализа движения антифазных границ и далее нашло применение в широком спектре математических и физических прикладных задач [2]. В рамках моделей фазового поля [3] уравнение Аллена-Кана описывает динамику и статику параметра порядка, создавая основу для математического описания задач со свободной границей в процессах фазовых переходов и превращений.

Уравнения в частных производных могут быть эффективно проанализированы с использованием класса аналитических решений в виде бегущих волн [4]. На сегодняшний день, один из наиболее удобных и полных аналитических методов получения бегущих волн заключается в использовании метода первого интеграла [5]. Особое внимание в классе уравнений с частными производными уделяется гиперболическому уравнению Аллена-Кана ввиду его применимости для описания быстрых фазовых переходов [6]:

$$\tau_R \frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} + \frac{\partial \phi}{\partial t} = D \nabla^2 \phi + M_\phi (\phi - \phi^3), \quad (1)$$

где  $\phi$  – фазовое поле (параметр порядка,  $\tau_R$  - время релаксации скорости фазового поля,  $D$  - константа диффузии фазового поля,  $M_\phi$  - мобильность фазового поля.

Справедливость моделей гиперболического типа в теории быстрых фазовых переходов была подтверждена при молекулярно-динамическом моделировании эффекта неравновесного захвата примеси быстро движущимися фронтами кристаллизации [7] и при грубо-зёрнном осреднении, примененном для получения уравнений фазового поля [8].

Для гиперболического уравнения Аллена-Кана было предложено частное решение в виде бегущей волны профиля фазового поля, описываемой функцией гиперболического тангенса [9]. К настоящему времени, обобщенный набор решений в виде бегущих волн для гиперболического уравнения Аллена-Кана отсутствует. Поэтому основной целью настоящей работы явилось получение множества точных аналитических решений для гиперболического уравнения Аллена-Кана. Для этого в работе использован метод первого интеграла [5] и

получено решение в виде бегущих волн с его проверкой на существование функций гиперболического тангенса.

В результате настоящей работы было получено множество аналитических решений в виде бегущих волн, которые описывают профили фазового поля вдоль направления  $x$  в функции гиперболического тангенса:

$$\phi(x, t) = \frac{j}{2} \left[ 1 \pm \operatorname{tahn} \left( \frac{jx-ct}{\delta} \right) \right], \quad j = -1 \text{ или } 1, \quad (2)$$

где  $\tau$  – безразмерное время релаксации,  $c = \frac{3\sqrt{2}}{2\sqrt{1+9\tau/2}}$  – установившаяся скорость поверхности и  $\delta = \frac{2\sqrt{2}}{\sqrt{1+9\tau/2}}$  – корреляционная длина. Это подтверждает корректность выбора частного решения, использованного в задачах высокоскоростного затвердевания [9]. В предельных случаях показано, что полученные решения для гиперболического уравнения Аллена-Кана включают, как частный случай, найденные ранее решения для параболического уравнения Аллена-Кана [10] на множестве конечного числа функций гиперболического тангенса.

- [1] S.M. Allen, J.W. Cahn, A microscopic theory for antiphase boundary motion and its application to antiphase domain coarsening // *Acta Metall.* 27, 1979. С. 1085–1095.
- [2] Ch.M. Elliott, Zh. Songmu, On the Cahn-Hilliard equation // *Arch. Rat. Mech. Analysis* 96, 1986. С. 339-357.
- [3] N. Provatas and K. Elder, *Phase-Field Methods in Materials Science and Engineering* // Wiley-VCH, Weinheim, 2010.
- [4] R. J. Field and M. Burger (Editors), *Oscillations and Traveling Waves in Chemical Systems* // Wiley, New York, 1985.
- [5] Zh. Feng, The first-integral method to study the Burgers-Korteweg-de Vries equation // *J. Phys. A: Math. Gen.* 35, 2002. С. 343349.
- [6] P. Galenko, D. Jou, Diffuse-interface model for rapid phase transformations in nonequilibrium systems // *Phys. Rev. E.* 71, 2005. С. 046125-1-13.
- [7] Y. Yang, H. Humadi, D. Buta, B. B. Laird, D. Sun, J. J. Hoyt, M. Asta, Atomistic simulations of nonequilibrium crystal-growth kinetics from alloy melts // *Phys. Rev. Lett.* 107, 025505-1-4, 2011.
- [8] D. Jou, P. Galenko, Coarse graining for the phase-field model of fast phase transitions // *Phys. Rev. E.* 88, 2013. С. 042151-1-8.
- [9] P.K. Galenko, E.V. Abramova, D. Jou, D.A. Danilov, V.G. Lebedev, D.M. Herlach, Solute trapping in rapid solidification of a binary dilute system: A phase-field study // *Phys. Rev. E.* 84, 2011. С. 041143-1-17.
- [10] F. Tascan, A. Bekir, Travelling wave solutions of Cahn-Allen equation by using first integral method // *Applied Mathematics and Computation* 207 (1), 2009. С. 279-282.

## Математическое моделирование трехмерного роста дендрита Mg-6%Al в неизотермических условиях

А. А. Обухов<sup>1,2</sup>, В. Г. Лебедев<sup>1,2</sup>, Т. А. Новикова<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Удмуртский государственный университет, 426034 Россия, г. Ижевск

<sup>2</sup>НПО МКМ, 426072 Россия, г. Ижевск, ул. Героя России И. Закирова, 24

Математическое моделирование микроструктур, возникающих в технологических процессах промышленного литья является важным элементом прогнозирования качества изделия. Формирование микроструктур в магниевых сплавах имеющих широкое применение в технике, недавно подробно исследовано в [1].

Несмотря на впечатляющие результаты моделирования методом фазового поля [2] в работе [1], необходимо отметить несколько критических моментов в выполненной работе. Во-первых, модель Эйкен, использованная в работе, как и другие модели MICRESS, является термодинамически несогласованной, используя в качестве движущей силы фазового перехода разность потенциалов Гиббса, как в чистых веществах. Во-вторых, термодинамические данные при расчете вычислялись непосредственно через интерфейс с ThermoCalc, что существенно замедляет вычисления. В-третьих, температура в модели входит только через параметры потенциалов Гиббса, что тоже говорит о несогласованности модели.

В качестве альтернативы мы используем неизотермическую постановку задачи о затвердевании концентрированных растворов [3].

Уравнения модели имеют следующий вид:

- закона сохранения внутренней энергии с учетом  $\gamma$ -фаз, где каждой фазе соответствует свое фазовое поле  $\phi_\gamma = 1$ , равное нулю в остальных фазах

$$C_p \dot{T} = -\nabla J_T - \sum_\lambda \dot{\phi}_\lambda (G_\lambda - T G_{T\lambda}) - \sum_\alpha \dot{x}_\alpha (G_\alpha - T G_{T\alpha}), \quad (1)$$

$C_p$  - теплоемкость,  $J_T$  - тепловой поток,  $G_\gamma$ ,  $G_{T\gamma}$ ,  $G_\alpha$ ,  $G_{T\alpha}$  - частные производные от плотности потенциала Гиббса по соответствующим переменным фазовых полей температуры и концентрациям.

- закон сохранения вещества, следуя [3], запишем отдельно для каждой из фаз в виде, предполагающем, что каждая поверхность относится только к двум фазам:

$$\xi^\alpha \dot{x}^\alpha = -\sum_\beta \xi^{\beta'} (\phi_\beta) \dot{\phi}_\beta x^\beta \theta(-\Omega^{\alpha\beta}) - \nabla \cdot J_\alpha + F_\alpha, \quad (2)$$

где величина движущей силы для движения границы между фазами  $\alpha$ - $\beta$  равна

$$\Omega^{\alpha\beta} = \tilde{\Omega}_{\beta\alpha} \theta(\tilde{\Omega}_{\alpha\beta}) - \tilde{\Omega}_{\alpha\beta} \theta(\tilde{\Omega}_{\beta\alpha}), \quad (3)$$

$$\tilde{\Omega}_{\alpha\beta} = G^\alpha(x^\alpha) - G^\beta(x^\beta) + \mu^\alpha(x^\alpha)(x^\beta - x^\alpha), \quad (4)$$

$$\tilde{\Omega}_{\beta\alpha} = G^\beta(x^\beta) - G^\alpha(x^\alpha) - \mu^\beta(x^\beta)(x^\beta - x^\alpha). \quad (5)$$

Поскольку с диссипативным источником  $F_\alpha$  в (2) связан обмен примесью через границу фаз [3], поэтому его ищем в виде:

$$F_\alpha = -q_0 \sum_{\beta} c_{\alpha\beta}^2 \Delta\mu_{\alpha\beta} (\nabla\varphi_\alpha)^2. \quad (4)$$

Концентрация на границе  $c_i$  выбирается в зависимости от соотношения химических потенциалов фаз

$$c_{\alpha\beta} = x^\alpha \xi^\alpha \theta(-\Delta\mu_{\alpha\beta}) + x^\beta \xi^\beta \theta(\Delta\mu_{\alpha\beta}),$$

где  $\Delta\mu_{\alpha\beta} = \mu^\beta - \mu^\alpha$ .

Уравнениям динамики для фазового поля и потоков:

$$\tau_\varphi \ddot{\varphi}_\alpha + \dot{\varphi}_\alpha = \sum_{\beta} M_{\alpha\beta} \left( \sum_{ij} \nabla_i \sigma_{ij} \nabla_j \varphi_\beta - \frac{1}{T} \left( W_{\alpha\beta} \mathbf{g}'_\beta + \Omega^{\alpha\beta} \xi^{\beta'} \right) \right), \quad (5)$$

$$\tau_\alpha \frac{\partial}{\partial t} J_\alpha + J_\alpha = -M_\alpha \nabla \frac{\mu^\alpha}{T}, \quad (6)$$

$$\tau_T \frac{\partial}{\partial t} J_T + J_T = -M_T \nabla \frac{1}{T}. \quad (7)$$

Уравнения (1), (2), (5)-(7) образуют полную систему уравнений, которая совместно с потенциалами Гиббса для Mg-6%Al [4] численно решалась в трехмерном случае для задачи направленного роста. Параметры анизотропии взяты из работы (4). Для сравнения исследовался рост дендритов при постоянном градиенте температур с учетом и без учета выделения тепла в уравнении (1).

[1] Eiken J. // Int. J. of Mat. Res. 2010. V. 101. № 4. P. 503.

[2] Provatas N., Elder K. Phase-Field Methods in Materials Science and Engineering // Wiley-VCH Weinheim, 2010.

[3] Лебедев В. Г., Галенко П. К. // Расплавы, 2016. № 3, (в печати).

[4] Available at: <http://cpddb.nims.go.jp/cpddb/periodic.htm> (accessed 25.02.2016)

**Эффективность алгоритма решения уравнения PFC с использованием библиотеки PetIGA**

И. О. Стародумов<sup>1</sup>, Е. В. Павлюк<sup>1</sup>, С. М. Абрамов<sup>2</sup>, Л. В. Ключев<sup>3</sup>,  
Д. В. Александров<sup>1</sup>, П. К. Галенко<sup>4</sup>

<sup>1</sup>Уральский федеральный университет, 620000, Екатеринбург, ул. Тургенева 4, к.602

<sup>2</sup>Институт программных систем имени А.К. Айламазяна РАН, 152021, Ярославская область, Переславский район, с. Веськово, ул. Петра I, д.4 «а»

<sup>3</sup>ООО «Иммерс», 119192, Москва, Мичуринский проспект, д.19 корп.3

<sup>4</sup>Friedrich–Schiller–Universität Jena, Physikalisch–Astronomische Fakultät, D-07743 Jena, Germany

Уравнение кристаллического фазового поля (Phase Field Crystal: PFC) в гиперболической постановке, позволяющее описывать фазовые превращения из метастабильного или неустойчивого состояния на масштабе атомной плотности, описывается дифференциальным уравнением шестого порядка [1,2]:

$$\tau \frac{\partial^2 \varphi}{\partial t^2} + \frac{\partial \varphi}{\partial t} = \nabla^2 \mu, \quad (1)$$

где  $\varphi$  – плотность атомной структуры,  $t$  – время,  $\tau$  — время релаксации потока атомной структуры,  $\mu$  — химический потенциал, который задается уравнением (2):

$$\mu(\varphi) = f'(\varphi) + 2\nabla^2 \varphi + \nabla^4 \varphi, \quad \text{где} \quad (2)$$

$$f(\varphi) = \frac{1-\varepsilon}{2} \varphi^2 + \frac{\alpha}{3} \varphi^3 + \frac{1}{4} \varphi^4 \quad (3)$$

определяет гомогенную часть плотности свободной энергии (4):

$$F(\varphi, \nabla \varphi, \nabla^2 \varphi) = \int_{\Omega} [f(\varphi) - |\nabla \varphi|^2 + \frac{1}{2} (\nabla^2 \varphi)^2] d\Omega. \quad (4)$$

Численные алгоритмы для решения уравнения (1) требуют значительных вычислительных ресурсов, а результаты расчетов должны быть представлены в пригодном для последующей обработки виде. Поэтому для решения потребовалась разработка специального алгоритма, использующего методы изогеометрического анализа (IGA) [3]. Для удобства программирования использовалась библиотека PetIGA, в которой алгоритмы IGA реализованы с учетом возможности параллельных вычислений. Такой подход позволил использовать высокопроизводительные многопроцессорные вычислители для проведения расчетов.

Несмотря на то, что серия расчетов с применением этого алгоритма показала соответствие результатам аналитических и численных решений уравнения PFC, остаётся открытым вопрос эффективности его реализации. Понимание этой проблемы становится особенно важным при разработке программно-аппаратных систем для решения конкретных задач. В работе [4] был проведен анализ эффективности исследуемого алгоритма при работе с гомогенными вычислителями. В настоящем сообщении представлены новые результаты по исследованию эффективности при использовании гетерогенных вычислительных систем. Для этого на базе мобильного вычислительного кластера Иммерс была развернута специальная система, включающая в себя однотипные процессоры Intel Xeon, а также однотипные же графические карты типа NVidia Tesla. Возможность работы с этой системой в монопольном режиме обеспечила минимальную погрешность измерений, а также позволила оптимизировать конфигурацию программного обеспечения и настроек оборудования. Результаты вычислительных экспериментов показывают, что программа эффективно распараллеливается как на ядра процессоров типа x86, так и на ядра графических ускорителей типа Nvidia Tesla. Разработанный алгоритм численного решения уравнения PFC продемонстрировал сбалансированную загрузку вычислительных мощностей, а рост затраченных ресурсов соразмерен росту сложности задачи. Полученные в ходе исследований показатели могут быть полезны при формировании конфигурации вычислительных систем, а также при оценке необходимых для расчетов ресурсов.

- [1] Galenko, P.K., Danilov, D.A., Lebedev, V.G.: Phase-field-crystal and Swift-Hohenberg equations with fast dynamics. *Physical Review E* 79(5), 051110 (2009)
- [2] Galenko, P., Gomez, H., Kropotin, N., Elder, K.: Unconditionally stable method and numerical solution of the hyperbolic phase-field crystal equation. *Phys. Rev. E* 88(1), 013310 (2013)
- [3] Bueno, J., Starodumov, I., Gomez, H., Galenko, P., Alexandrov, D.: Three dimensional structures predicted by the modified phase field crystal equation. *Computational Materials Science* 111, 310 – 312 (2016)
- [4] Starodumov, I., Pavlyuk, E., Klyuev, L., Kovalenko, M., Medyankin, A.: Analysis of the Efficiency PETSc and PETIGA Libraries in Solving the Problem of Crystal Growth. *CEUR Workshop Proceedings, Vol-1513*, 109-122 (2015)

**Коллективная динамика атомов в расплаве меди**Р. М. Хуснутдинов<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Казанский (Приволжский) федеральный университет, 420008 Россия, г. Казань, ул. Кремлевская, 18

Исследование коллективных возбуждений в неупорядоченных средах представляет одну из важных задач физики конденсированного состояния вещества. В жидкостях коллективные возбуждения могут проявляться в виде акустических мод продольной (LA) и поперечной (TA) поляризации. Исследования продольных акустических мод осуществляются в экспериментах по рассеянию нейтронов и рентгеновских лучей, а также оптической и ультразвуковой спектроскопии, где экспериментальные данные по флуктуации плотности числа частиц непосредственно связаны со спектральной плотностью временной корреляционной функцией продольного потока. Вследствие слабых сдвиговых сил в жидкостях поперечные акустические моды экспериментально трудноопределимы.

В работе представлены результаты исследования коллективных возбуждений в расплаве меди при температуре  $T=1423$  К, полученные с помощью моделирования атомарной динамики. Рассчитанные структурные и динамические характеристики сравниваются с экспериментальными данными по рассеянию рентгеновских лучей. Описание спектров интенсивности рассеяния рентгеновских лучей  $I(k, \omega)$  выполнено в рамках подхода, учитывающего лишь структурные особенности системы (статический структурный фактор и частотные релаксационные параметры). С целью исследования механизмов формирования атомарных коллективных возбуждений в расплаве меди были рассчитаны спектральные плотности временных корреляционных функций продольного  $\tilde{C}_L(k, \omega)$  и поперечного  $\tilde{C}_T(k, \omega)$  потоков для широкой области значений волновых чисел. Установлено, что коллективные возбуждения для равновесного расплава меди характеризуются двумя дисперсионными акустико-подобными ветвями продольной и поперечной поляризации.

*Крупномасштабные молекулярно-динамические расчеты выполнены на вычислительном кластере Казанского федерального университета и суперкомпьютере Межведомственного Суперкомпьютерного Центра Российской Академии Наук. Работа частично поддержана грантом РФФИ (№ 14-02-00335-а).*





## **Секция V**

### **Высокоскоростное затвердевание и аддитивные технологии**

## Метод высокоскоростного лазерного синтеза защитных покрытий на поверхности циркониевого сплава на основе циркония Э110

И. О. Башкова<sup>1</sup>, Е. В. Харанжевский<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Удмуртский государственный университет, 426034 Россия, г. Ижевск, ул. Университетская, 1, к. 4

Цирконий является металлом, который активно используется в атомной энергетике. Низкое сечение захвата тепловых нейтронов и повышенная коррозионная стойкость исходного металла позволяют использовать цирконий в качестве конструкционного материала оболочек ТВЭЛов, труб охлаждения и т.п. Коррозионная стойкость сплава циркония в воде при высоких значениях температуры и давления недостаточна, поэтому изучение и получение способов повышения антикоррозионных свойств актуально и на сегодняшний день. В настоящее время для создания защитных слоев используется метод высокоскоростного лазерного синтеза (ВЛС). В данной работе была поставлена задача исследовать эксплуатационные показатели циркониевых изделий, обработанных методом ВЛС.

Исходными образцами являлись пластинки сплава циркония Э110 размерами 10\*10\*2 мм. С помощью иттербиевого оптоволоконного лазера и метода ВЛС была произведена обработка поверхности в атмосфере аргона или на воздухе с одинаковыми характеристиками лазерного излучения.

Основное внимание было уделено исследованию влияния структурно-фазового состава поверхности сплава, сформированной методом ВЛС, на антикоррозионные свойства поверхностного слоя. Исследование структуры проводилось методами рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии, просвечивающей и растровой электронной микроскопии, рентгеноструктурного анализа. Для анализа коррозионной стойкости были проведены электрохимические испытания в двух разных средах. В качестве электролита в нейтральной среде использовался боратный буферный раствор с рН 7,4, а в агрессивной – NaCl 3%.

В ходе исследований было выявлено, что при обработке сплава циркония Э110 в атмосфере аргона происходит модификация поверхности (лазерный локальный переплав), при этом толщина оксидного слоя практически не изменяется. Растворение оксидов в тонких слоях приводит к улучшению защитных свойств поверхности. Однако, с точки зрения электрохимической коррозии, наиболее высокий показатель коррозионной стойкости достигается при обработке образцов на воздухе. В таких условиях реализуется ВЛС оксида из металлического циркония и кислорода в зоне обработки, что приводит к уплотнению слоя и образованию композиционного материала, состоящего из включений диоксидов циркония в металлической матрице. Это приводит к

повышению антикоррозионных свойств поверхности, обработанной методом ВЛС.

### **Формирование состава поверхностных слоев прокатанных титановых фольг, с напыленным слоем алюминия, методом ионно-лучевого перемешивания**

П. В. Быков<sup>1</sup>, А. Н. Тарасенков<sup>2</sup>, В. Л. Воробьев<sup>1</sup>, В. Я. Баянкин<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Россия, г. Ижевск, ФТИ УрО РАН, E-mail:less@ftiudm.ru

<sup>2</sup>Россия, г. Зеленоград, НПКТЦ МИЭТ, E-mail:A.Tarasenkov@tcen.ru

Методы ионно-лучевой и ионно-плазменной обработки, имея ряд принципиальных преимуществ по сравнению с традиционными методами химико-термической обработки, получили активное развитие в области модификации поверхностных слоев металлов и сплавов с целью повышения их прочностных свойств. В дополнение к классическим преимуществам ионной обработки (возможность превышения предела растворимости, контроль глубины распределения примеси, возможности селективной обработки участков деталей и т.д.) в последнее десятилетие удалось добавить и совершенно новые методики воздействия на приповерхностные слои материалов. В частности, с помощью формирования на поверхности мишени, одного или нескольких слоев других материалов нанометрового диапазона толщин, и их последующей ионной обработкой высокоэнергетичными частицами, удалось сформировать новые соединения и фазы в поверхностных слоях. Полученные таким образом приповерхностные слои могут приобретать отличные от «материнских» предел прочности, текучести, ударную вязкость, трещиностойкость, коррозионную стойкость, износостойкость. Дополнительно, совмещение процесса нанесения покрытий с ионной обработкой позволяет варьировать толщину модифицированного слоя, что впоследствии позволяет изменять его физико-механические и эксплуатационные свойства в некотором диапазоне значений.

Целью данной работы являлось исследование влияния облучения ионами аргона на формирование состава и структуры поверхностных слоев, промышленного титана VT1-0 с напыленным слоем Al.

Исследование методом РФЭС показало, что перемешивание сопровождается формированием соединения титана с алюминием Ti-Al. Выявлено образование связей Ti-C, как после напыления пленки алюминия, так и после ионно-лучевого перемешивания. Выявлена очередность образования связей от Al-O к Ti-O по мере увеличения глубины приповерхностного слоя, как после напыления пленки алюминия, так и после ионно-лучевого перемешивания.

*Работа выполнена при поддержке программы фундаментальных исследований УрО РАН, проект №15-17-2-50*

**Сравнение закономерностей фазообразования в сплавах на основе систем Fe-B и Fe-C в процессах закалки расплава и механосплавления.**

В. А. Волков<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Физико-технический институт УрО РАН, 426000, Россия, г. Ижевск, ул. Кирова, 132.

Проведено сравнение процессов формирования структуры и фазового состава сплавов на основе систем Fe-B и Fe-C при закалке расплавов и при механосплавлении.

При анализе микроструктур быстрозакаленных лент обращают на себя внимание резкие переходы между структурами при их последовательном образовании. Причиной таких переходов является смена механизмов затвердевания. При малых переохлаждениях реализуются механизмы, обеспечивающее образование состояний близких к равновесным, при больших - обладающих большим запасом энергии. Порошковые сплавы, полученные механосплавлением, на промежуточных стадиях процесса также характеризуются микроструктурой в которой выделяются составляющие резко различающиеся по своему строению. Эти структурные составляющие формируются вследствие включения, по мере развития механосплавления, различных механизмов упруго-деформационного поведения порошков. Общим для обоих процессов сплавообразования является то, что действующие механизмы формирования структуры являются способами релаксации избыточной энергии, аккумулированной в переохлажденном расплаве или сплаве, подвергнутом интенсивной пластической деформации. Структурные переходы обусловлены тем, что в данных условиях выигрывает тот механизм, который обеспечивает наибольшую скорость релаксации избыточной энергии. Этот процесс имеет ступенчатый характер вследствие того, что для запуска следующего механизма необходимо преодоление некоторого потенциального барьера.

Общие закономерности процессов закалки расплавов и механосплавления проявляются не только в схожести морфологии структур, но также и в составе образующихся фаз. Последнее показано на примере сплавов на основе системы Fe-C. Аморфизация при закалке этих расплавов возможна только в диапазоне составов близких к стехиометрии карбидов, характеризующихся тригонально-призматическим окружением атомов углерода ( $Fe_3C$ ,  $Fe_5C_2$ ,  $Fe_7C_3$ ). Аморфизация происходит потому, что для зарождения этих фаз требуется достаточно большое время. Фазы с плотной упаковкой атомов железа  $\alpha$ -Fe<sub>3</sub>C, аустенит  $\gamma$ -Fe(C) и  $\epsilon$ -карбид в силу простой структуры имеют малый критический зародыш, поэтому при закалке расплавов, содержащих менее 19-20 ат. % C, образуются с высокой скоростью, что препятствует аморфизации структуры.

Эти закономерности в какой-то мере сохраняются и при образовании фаз в процессе механосплавления. Накопленная деформированным сплавом энергия на определенном этапе релаксирует. Основными путями релаксации избыточной энергии являются возврат, рекристаллизация и фазовые превращения. При этом, в отношении фазовых превращений можно сказать, что при механосплавлении, так же как и при закалке расплава, образование аморфной и кристаллических фаз выступают в качестве альтернативы друг другу. При относительно небольших концентрациях углерода более быстрым путем релаксации избыточной энергии оказывается формирование фаз с низкой величиной работы зарождения ( $\alpha$ -Fe(C),  $\gamma$ -Fe(C) и  $\epsilon$ -карбиды). Более трудным является зарождение карбидов со сложной структурой. Как следствие, в сплавах с высоким содержанием углерода происходит аморфизация. Карбиды образуются уже как вторичный продукт в результате кристаллизации А. Однако при повышении температуры процесса и в этих сплавах возможно прямое образование карбидов, поскольку скорость их зарождения будет выше скорости формирования А.

*Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ 14-03-00044.*

### **Неравновесные эффекты при высокоскоростном затвердевании металлов и сплавов**

П. К. Галенко<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>German Aerospace Center, Institute of Materials Physics in Space, Köln, Germany

<sup>2</sup>Friedrich Schiller University of Jena, Faculty of Physics and Astronomy, D-07743 Jena, Germany.

В настоящем сообщении дана систематизация неравновесных эффектов, возникающих при высокоскоростном затвердевании металлов и сплавов. Обсуждаются явления, сопровождающие высокоскоростное затвердевание. Приводится оценка современных теоретических моделей для качественных и количественных расчетов кристаллической и аморфной структуры металлических и сплавных образцов.

**Численная модель процесса селективного лазерного плавления порошков металлов и сплавов**

Г. А. Гордеев<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Удмуртский государственный университет, 426034 Россия, г. Ижевск, ул. Университетская, 1, к.4

Вместе с развитием аддитивных технологий и технологии селективного лазерного спекания (СЛП) металлических порошков все актуальнее становится компьютерное моделирование таких процессов. Моделирование СЛП-процессов не только позволит снизить трудозатраты на подбор режимов для удовлетворительного по качеству и времени спекания порошков, но также позволит исследовать процессы теплопереноса и усадки порошка, проходящие внутри порошкового слоя  $\Omega_P$  (Рис.1).

Для описания теплофизических процессов [1,2,3], происходящих при СЛП, используются уравнение теплопроводности с фазовыми переходами с двумя переменными: температурой  $T$  и удельной энтальпией  $H$  металлической составляющей двухфазной среды, помимо этого решается уравнение (3) для нахождения локальной пористости порошкового слоя  $\varepsilon_V$ :

$$(1) \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial T}{\partial H} \frac{\partial H}{\partial t}$$

$$(2) \frac{\partial H}{\partial t} (1 - \varepsilon_V) = k(\varepsilon_V) \nabla^2 T$$

$$(3) \left. \frac{\partial \varepsilon_V}{\partial t} \right|_{\Omega_P} = \Lambda_1(\varepsilon_V, T)$$

$$(4) dZ \Big|_{\partial\Omega_{Top}} = \Lambda_2(\varepsilon_V)$$

$$(5) \vec{n} \cdot \vec{q}_H \Big|_{\partial\Omega_{Top}} = F + h(T_{amb} - T) + \sigma\sigma_{SB}(T_{amb}^4 - T^4)$$

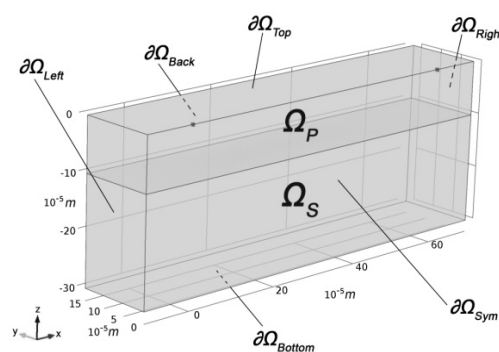


Рис. 1. Схема расчетной области.

Уравнение (3) является уравнением динамики изменения пористости порошковых сред [4]. Коэффициент  $k(\varepsilon_V)$  вычислялся на масштабном уровне отдельных частиц и их конгломератов [3]. С помощью зависимости теплофизических характеристик от пористости осуществляется связь между пространственными масштабами, позволяющая рассчитывать структурно-сложные металлические порошки и учитывать взаимное отношение теплопроводностей газа и металла. Уравнение (4) используется для определения усадки порошка через положения верхней границы  $\partial\Omega_{Top}$ . На верхней границе также задается граничный источник  $F$ , соответствующий воздействию лазерного луча, и охлаждение за счет конвекции и излучения, уравнение (5). В параметр  $\partial T/\partial H$  в уравнении (1) была внесена зависимость температуры  $T$  от энтальпии  $H$

с учетом температурной зависимости  $C_p(T)$  и фазового перехода из твердой в жидкую фазу [5,6].

Физико-математическая модель в частных производных сводилась к системе линейных уравнений методом конечных элементов [7]. Для этого вначале континуальная модель разбивалась на конечные элементы:

$$T(l) = N_i \Phi 1_i + N_j \Phi 1_j + N_k \Phi 1_k + N_p \Phi 1_p$$

$$H(l) = N_i \Phi 2_i + N_j \Phi 2_j + N_k \Phi 2_k + N_p \Phi 2_p$$

$$\varepsilon_v(l) = N_i \Phi 3_i + N_j \Phi 3_j + N_k \Phi 3_k + N_p \Phi 3_p$$

где  $[N]$  — линейные базисные полиномы, а  $\Phi$  — значения соответствующих зависимых переменных ( $T$ ,  $H$  или  $\varepsilon_v$ ) в узлах  $(i, j, k, p)$  трехмерного конечного элемента  $l$ . Далее с помощью метода Галеркина система в частных производных сводилась к системе линейных уравнений:

$$\left\{ \begin{array}{l} \int_{A_l} [N^T] \left( \frac{\partial T}{\partial H} \frac{\partial [N] \{ \Phi 2 \}}{dt} - \frac{\partial [N] \{ \Phi 1 \}}{dt} \right) dA_l = 0 \\ \int_{A_l} [N^T] \left( k(\varepsilon_v) \nabla^2 [N] \{ \Phi 1 \} + F - \frac{\partial [N] \{ \Phi 2 \}}{dt} (1 - \varepsilon_v) \right) dA_l = 0 \\ \int_{A_l} [N^T] \left( \Lambda_1 ([N] \{ \Phi 3 \}, T) - \frac{\partial [N] \{ \Phi 3 \}}{dt} \right) dA_l = 0 \end{array} \right.$$

где для каждого элемента  $l$  будут выполняться вышеуказанные равенства, и каждый интеграл рассчитывается на пространстве конечного элемента  $A_l$ . Численная модель спекания порошка карбонильного железа была запрограммирована в вычислительном пакете COMSOL Multiphysics в виде приведенных интегральных уравнений. Численные расчеты СЛП-процессов показали хорошее соответствие с натурными экспериментами. С помощью численного моделирования были проанализированы усадка порошкового слоя, нестационарные поля температуры и локальной пористости, а также было изучено влияние управляющих параметров лазерного излучения на процесс компактирования порошка.

- [1] Кривилев М.Д., Харанжевский Е.В., Гордеев Г.А., Анкудинов В.Е. Управление лазерным спеканием металлических порошковых смесей / Управление большими системами. Выпуск 31. М.: ИПУ РАН, 2010. С.299-322.
- [2] Gordeev G.A., Ankudinov V.E., Krivilyov M.D. and Kharanzhevskiy E.V. Optimization of processing parameters in laser sintering of metallic powders // IOP Conference Series: Materials Science and Engineering, 2012, Vol. 27, 012079, 7 p. doi:10.1088/1757-899X/27/1/012079.
- [3] Гордеев Г. А., Кривилев М. Д., Анкудинов В. Е. Численное моделирование лазерной обработки металлических порошковых материалов методом конечных элементов // Вестник Удмуртского университета. Физика. Химия. — вып. 3 — Ижевск: Изд-во УдГУ, 2014. — С. 15-22.



- [4] Dong L., Makradi A., Ahzi S. Three-dimensional transient finite element analysis of the selective laser sintering process // Journal of Materials Processing Technology (209). –2009. – P.700 –706.
- [5] Desai P.D. Thermodynamic Properties of Iron and Silicon // J.Phys. Chem. Ref. Data, Vol. 15, № 3. –1986.– P.967 –983.
- [6] Борисов В.Т. Теория двухфазной зоны металлического слитка. — М.: Metallurgia, 1987. — 224 с.
- [7] Сегерлинд Л. Применение метода конечных элементов, – М.: Мир, 1979. — 392 с.

### Влияние скорости охлаждения на микроструктуру эвтектического сплава Al-Si

О. В. Гусакова<sup>1,2</sup>, П. К. Галенко<sup>3</sup>, В. Г. Шепелевич<sup>2</sup>, Д. В. Александров<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Уральский федеральный университет им. Первого Президента России Б.Н. Ельцина, 620002, Екатеринбург, ул. Мира, 19

<sup>2</sup> Белорусский государственный университет, 220030, пр. Независимости, 4, г. Минск, Республика Беларусь

<sup>3</sup> Friedrich–Schiller–Universität Jena, Physikalisch-Astronomische Fakultät, D-07743 Jena, Germany

Эвтектические сплавы систем Al–Si и широко используются в качестве припоев. Основными недостатками свойств таких припоев, изготовленных традиционными методами, являются низкая пластичность и слабая сопротивляемость коррозии. Кроме того, эвтектические сплавы, получаемые традиционными методами, отличаются крупнодисперсностью частиц фаз, составляющих эвтектику.

Следует также заметить, что эвтектические сплавы системы Al – Si, относятся к аномальным эвтектикам. Аномальные эвтектики характеризуются отсутствием эвтектических колоний, в них смесь зерен алюминия и второй фазы располагается по границам крупных зерен твердого раствора на основе алюминия. Такая неоднородность структуры приводит к неудовлетворительным механическим, термическим и коррозионным свойствам.

Наиболее известными способами измельчения структурных составляющих эвтектики на основе алюминия является модифицирование их натрием, стронцием, ультрадисперсными тугоплавкими соединениями типа оксидов, карбидов, нитридов и другими добавками [1]. Однако эти способы полностью не решают задачу получения однородной структуры при максимальном измельчении всех её составляющих. В последнее время для направленного модифицирования структуры и свойств используются сильно неравновесные

условия кристаллизации, к которым относится сверхбыстрая закалка из расплава (СБЗР).

В настоящей работе для решения задачи получения эвтектических сплавов Al–Si и с дисперсной однородной микроструктурой использован способ сверхбыстрой закалки из расплава. Фольги сплава Al – 12,2 ат.% Si и толщиной 75-80 мкм получались при затвердевании расплава на внутренней поверхности медного барабана, вращающегося с линейной скоростью 15 м/с. При этом скорость охлаждения расплава, оцененная по толщине фольги составляет  $10^5$  К/с. Также были исследованы массивные образцы полученные при отливке в графитовую изложницу. Скорость охлаждения при этом составляла  $10^2$  К/с.

На рисунке 1 представлены микрофотографии массивного образца (а) и поперечного сечения фольги (б) полученные с помощью растрового электронного микроскопа LEO 1455 VP, а также результаты исследования распределения кремния (в, г), полученные методом рентгеноспектрального микроанализа с помощью энергодисперсионного безазотного спектрометра Aztec Energy Advanced X-Max 80.

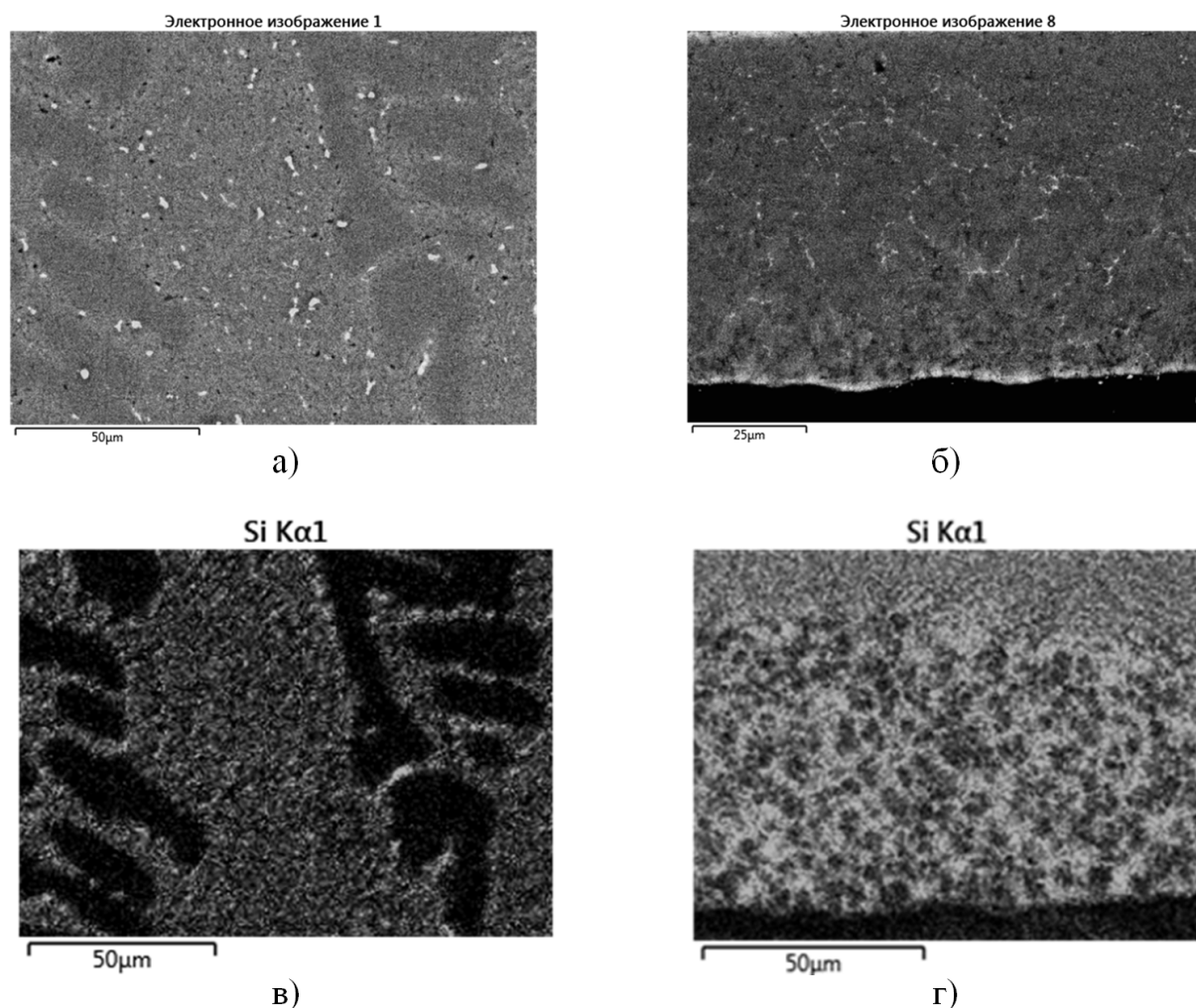


Рис. 1. Микрофотографии массивного образца (а) и поперечного сечения фольги (б) и их карты распределения кремния (в,г)

В связи с тем, что алюминий и кремний имеют близкий атомный номер, выявление взаимного расположения фаз в их сплавах с помощью растрового электронного микроскопа является не тривиальной задачей. Для выявления распределения компонент был использован метод рентгеноспектрального микроанализа и построены карты распределения элементов. Как видно из рисунка 1 (в) микроструктура массивного образца характеризуется наличием зерен алюминия окруженных двухфазной смесью алюминия и кремния. На изображении, полученном в отраженных электронах, эти фазы не различимы. В двухфазных областях наблюдаются редкие светлые включения размером до нескольких микрон. Поскольку эвтектический сплав Al – 12,2 ат.% Si был получен из алюминия, содержащего 0,5 ат. % Fe, светлые включения представляют фазу, содержащую железо. Такая структура возможна, если кристаллизация сплава происходит при образовании зародышей алюминия, оттеснении кремния в межзеренное пространство при росте зародышей и затвердевании двухфазной смеси на последнем этапе. Такая структура является типичной для аномальной эвтектики Al – 12,2 ат.% Si.

Быстрозатвердевшие фольги характеризуются гораздо более однородной структурой. Анализ карт распределения элементов показал, что, в отличие от массивных образцов, в фольгах отсутствуют однофазные участки алюминия, однако наблюдается некоторая неоднородность микроструктуры фольг по толщине.

Установлено, что в слое у стороны фольги, прилегающей к кристаллизатору распределение кремния однородно. Толщина этого слоя 20 – 30 мкм. В слоях фольги, удаленных от кристаллизатора, из-за выделения скрытой теплоты кристаллизации начальное переохлаждение расплава уменьшается. Затвердевание протекает с разделением на участки различного состава. Максимальное содержание кремния в отдельных участках не превышает 18 мас. %, а минимальное - не ниже 5,5 мас. %. Размер таких участков составляет несколько микрон. Установлено, что в участках с высокой концентрацией кремния он присутствует в виде наноразмерных глобулярных частиц.

Таким образом, метод сверхбыстрой закалки из расплава позволяет получить эвтектические сплавы Al – Si с однородным распределением компонент. Полная гомогенность микроструктуры фольги может быть получена в более тонких фольгах, синтезируемых при больших скоростях вращения кристаллизатора.

- [1] И. В. Рафальский, А. В. Арабей и Б. М. Немененок Физико-химические основы синтеза силуминов с использованием кварцсодержащих материалов. Минск: БНТУ, 2015, 138 с.

## Формирование микроструктуры быстрозатвердевших сплавов системы Sn – Bi

О. В. Гусакова<sup>1,2</sup>, П. К. Галенко<sup>3</sup>, В. Г. Шепелевич<sup>2</sup>, Д. В. Александров<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Уральский федеральный университет им. Первого Президента России Б.Н. Ельцина, 620002, Екатеринбург, ул. Мира, 19

<sup>2</sup> Белорусский государственный университет, 220030, пр. Независимости, 4, г. Минск, Республика Беларусь

<sup>3</sup> Friedrich–Schiller–Universität Jena, Physikalisch-Astronomische Fakultät, D-07743 Jena, Germany

Эвтектический сплав Sn – Bi применяется для изготовления припоев. Припой в виде фольг целесообразно использовать для пайки тонких изделий и при малых зазорах а также позволяет экономить дорогостоящий висмут. Изготовление фольг методом сверхбыстрой закалки из расплава осуществляется при скорости его охлаждения  $10^5 \sim 10^6$  К/с. Затвердевание начинается при глубоком переохлаждении расплава, что приводит к микроструктуре фольг, отличной от микроструктуры материала, получаемого традиционными методами. Поэтому актуальным является установление механизмов формирования микроструктуры быстрозатвердевших сплавов системы Sn – Bi.

В работе приведены результаты исследований структурно-фазового состояния быстрозатвердевших фольг сплавов Sn – 6, 12, 26, 43 ат. % Bi, полученных методом выплескивания капли расплава на внутреннюю поверхность медного кристаллизатора, вращающегося с линейной скоростью 15 м/с. Средняя толщина синтезированных фольг с увеличением концентрации висмута уменьшается от 70 до 30 мкм. Исследования микроструктуры проводили с помощью растровой электронной микроскопии (РЭМ), зеренная структура изучалась с помощью дифракции обратно отраженных электронов (ДОЭ) на дифракционной приставке фазового анализа к РЭМ, фазовый состав фольг определялся рентгеноструктурным методом.

Установлено, что для всех исследованных сплавов затвердевание начинается с безразделительной кристаллизации. Ранее было показано, что в тонких (до 40 мкм) быстрозатвердевших фольгах сплавов Sn – Bi, содержащих до 11 ат. % Bi, затвердевание протекает с образованием пересыщенного твердого раствора на основе олова. При комнатной температуре наблюдается его распад по непрерывному и прерывистому механизмам. При непрерывном распаде образуются наноразмерные пластинки висмута когерентные матрице олова. Скорость движения границы прерывистого распада составляет  $(2...4) \cdot 10^{-9}$  м/с и растет увеличением содержания висмута.

При концентрации Bi близкой и выше предельной равновесной растворимости Bi в олове, равной 13,1 ат. % при температуре 136 °С, в фольгах наблюдается многостадийный прерывистый распад. На рисунке 1 приведены

микроструктуры поверхности фольги (а и в) и поперечного сечения (б и г) фольги сплава Sn – 26 ат. % Вi и эвтектического сплава Sn – 43 ат. % Вi, соответственно. Сразу после на первой стадии распад выделения висмута образуют тонкие пластины (ламелей) параллельны между собой в пределах одного зерна. Расстояние между пластинами с ростом концентрации Вi уменьшается, а их толщина составляет 20-30 нм и не зависит от концентрации висмута. После первой стадии распада, как показали рентгеноструктурные исследования матрица олова содержит избыточный висмут и наблюдается вторая стадия распада от границ зерен. В результате после завершения распада в поперечном сечении фольги наблюдаются участки двух типов: с мелкими пластинчатыми включениям и более крупными равновесными включениями.

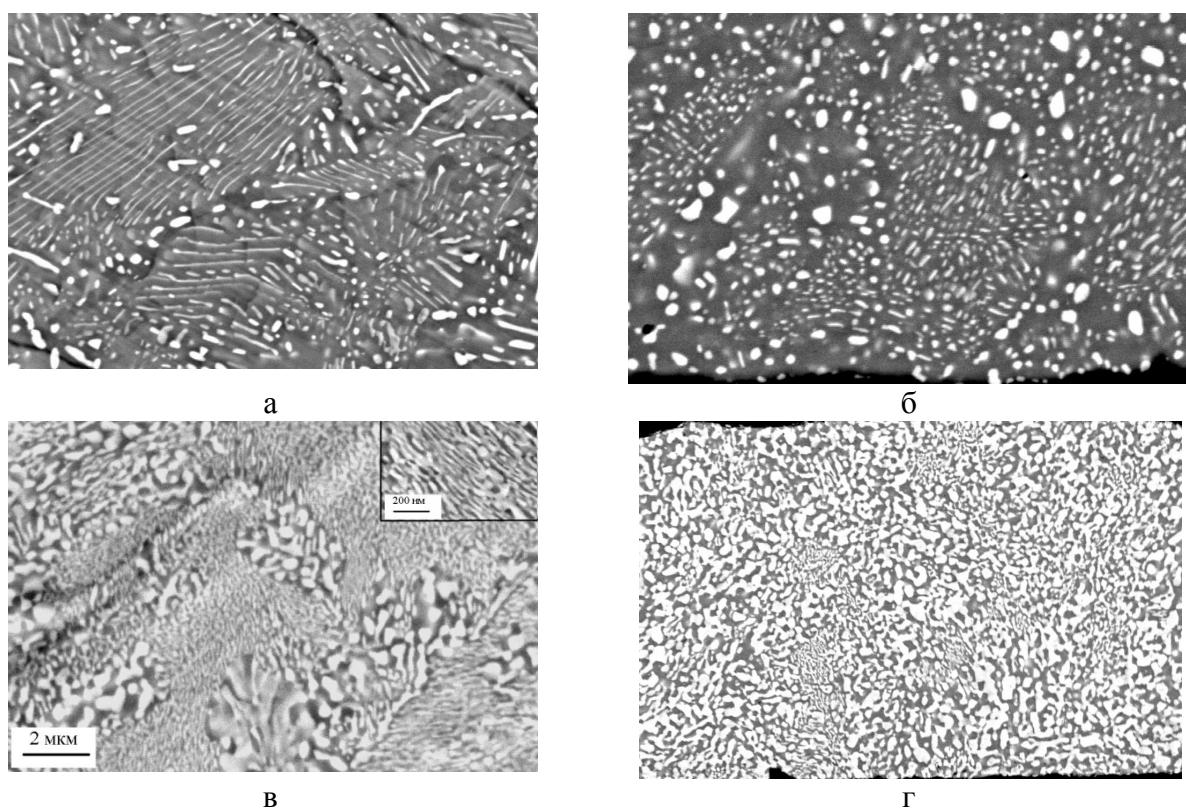


Рис. 1 Микроструктура поверхности фольги, прилегающей к кристаллизатору (а,в) и поперечного сечения (б,г) сплавов Sn–26 ат. % Вi и Sn–43 ат. % Вi, соответственно.

Анализ корреляции фаз показал, что при первой стадии распада ламели висмута когерентны матрице зерна олова, движение границы которого определяет распад. Сопряжение решеток висмута и олова осуществляется по плоскостям  $(100)\text{Sn} \parallel (10\bar{1}2)\text{Bi}$ . В участках фольги, сформированных в результате последующих стадий распада доля когерентных границ фаз висмута и олова уменьшается. Однако после старения в течение 300 часов для эвтектического сплава Sn – Вi удельная плотность когерентных межфазных границ составляет 70 % от общей удельной плотности межфазных границ.

**Влияние скорости охлаждения расплава на микроструктуру сплавов систем Sn – Zn – Bi и Sn – Zn – In**

О. В. Гусакова<sup>1</sup>, В. Г. Шепелевич<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Международный государственный экологический институт им. А.Д.Сахарова Белорусского государственного университета, 220070, г. Минск, ул. Долгобродская, 23, Беларусь

<sup>2</sup> Белорусский государственный университет, 220030, пр. Независимости, 4, г. Минск, Республика Беларусь

Эвтектический сплав Sn – Zn имеет температуру плавления близкую к температуре плавления эвтектики Sn – Pb, потому эвтектика олово-цинк могла бы быть перспективной при переходе на бессвинцовую пайку. Однако большое содержание цинка приводит к низкой коррозионной стойкости и невысокой пластичности материала. Повышение пластичности, коррозионной стойкости и увеличение срока хранения припоя может быть достигнуто добавлением висмута и индия в различных концентрациях. Для определения базового состава припоя, исследованы влияние висмута и индия на микроструктуру и распределение компонент сплавов Sn – Zn – Bi, Sn – Zn – In.

В работе представлены результаты исследования микроструктуры сплавов изготовленных различными способами. Массивные образцы сплавов Sn – 9 мас. % Zn – 3 мас. % Bi, и Sn – 9 мас. % Zn – 9 мас. % In получались при затвердевании сплава в графитовой изложнице при скорости охлаждения расплава  $10^2$  K/c. Фольги изготавливались из массивов методом выплескивания капли расплава на вращающуюся поверхность медного кристаллизатора при этом скорость охлаждения расплава составляет  $10^5$  K/c. Состав массивных образцов и фольг и распределение компонент контролировался рентгеноспектральным микроанализом. С помощью растровой электронной микроскопии изучалась микроструктура в поперечном сечении фольги и массивного образца. Результаты исследований микроструктуры сплава Sn – 9 мас. % Zn – 3 мас. % Bi приведены на рисунке 1.

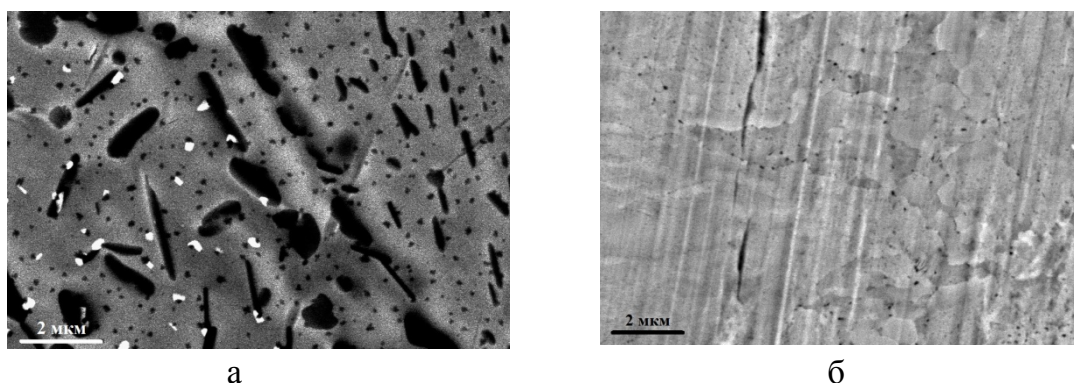


Рис. 1 Микроструктура сплава Sn – 9 мас. % Zn – 3 мас. % Bi, полученного при скорости охлаждения расплава  $10^2$  K/c (а) и быстрозатвердевших фольг (б)

При скорости охлаждения расплава  $10^2$  К/с Sn – Zn – Вi затвердевает с образованием участков двух типов. Начинается затвердевание с участков эвтектического состава с включениями цинка в виде разорванных пластин (правая часть рисунка). Избыточный по сравнению с растворимостью висмут оттесняется в расплав и выпадает в виде отдельных включений. В быстрозатвердевших фольгах протекает безразделительная кристаллизация с образованием пересыщенного твердого раствора на основе олова.

Очень мелкие, порядка 40 -50 нм включения цинка выделяются по всему объему зерна и на его границах в результате непрерывного распада пересыщенного твердого раствора. Включений висмута в свежеприготовленных фольгах не наблюдается. Избыточный по сравнению с растворимостью при комнатной температуре Вi может выделяться в виде нанометровых слоев на поверхности включений цинка.

Микроструктура сплава Sn – Zn – In приведена на рисунке 2. При затвердевании массивных образцов цинк затвердевает в виде крупных пластин, в фольгах формируются глобулярные дисперсные включения Zn. Средний размер включений составляет 120 нм.

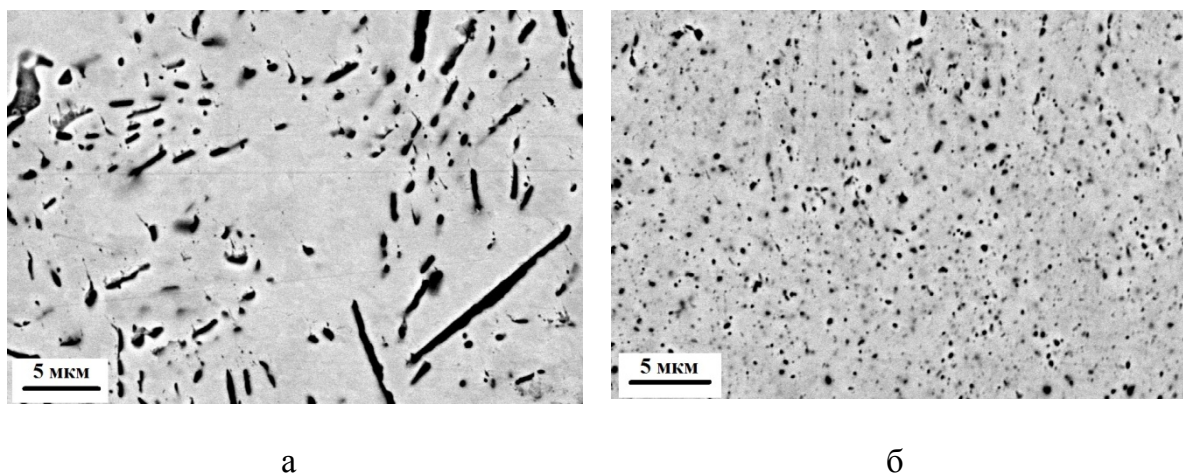


Рис. 2 Микроструктура сплава Sn – 9 мас. % Zn – 10 мас. % In, полученного при скорости охлаждения расплава  $10^2$  К/с (а), и быстрозатвердевших фольг (б)

Поскольку олово и индий имеют близкое значение атомных плотностей, то коэффициент отражения электронов In и Sn слабо отличается. Поэтому метод исследования микроструктуры с использованием детектора отраженных электронов в РЭМ не позволяет выявить фазу In в олове. Для установления распределения индия использован рентгеноспектральный микроанализ, результаты которого приведены на рисунках 3 и 4.

Установлено, что при скорости охлаждения расплава  $10^2$  К/с в массивном образце сплава Sn – 9 мас. % Zn – 10 мас. % In распределение индия неравномерно. Выявляются области обедненные индием до 5-6 мас. %, а также

области, в которых содержание индия увеличивается 20 мас. %. Размеры таких областей достигают десяти микрон.

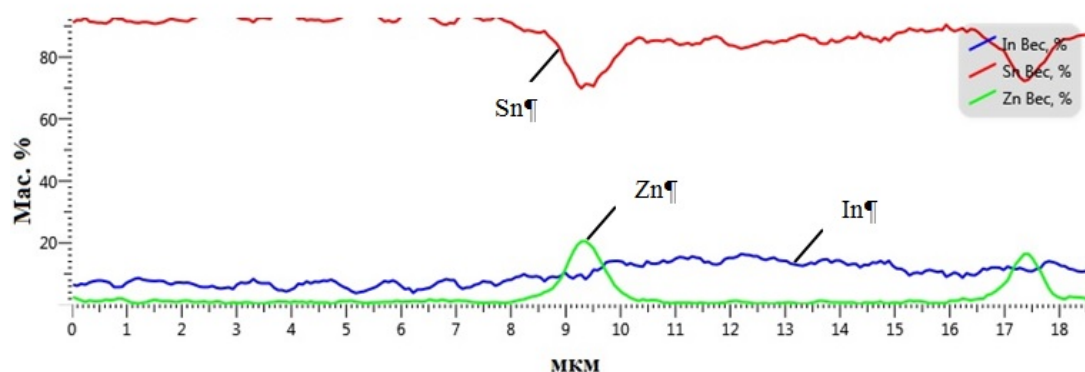


Рис. 3 Распределение элементов вдоль линии сканирования в сечении массивного образца Sn – 9 мас. % Zn – 10 мас. % In

В быстрозатвердевших фольгах распределение индия более равномерно. На рисунке 4 приведено распределение элементов в сечении фольги.

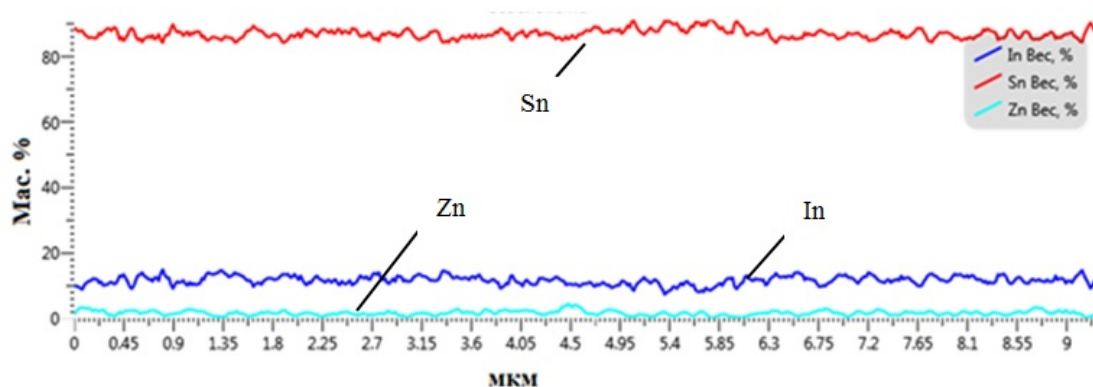


Рис. 4 Распределение элементов вдоль линии сканирования в сечении быстрозатвердевшей фольги образца Sn – 9 мас. % Zn – 10 мас. % In

Таким образом, при сверхбыстрой закалке из расплава протекает безразделительная кристаллизация сплавов Sn – 9 мас. % Zn – 3 мас. % Bi и Sn – 9 мас. % Zn – 10 мас. % In, последующий распад пересыщенного твердого раствора обеспечивает равномерное распределение компонент.

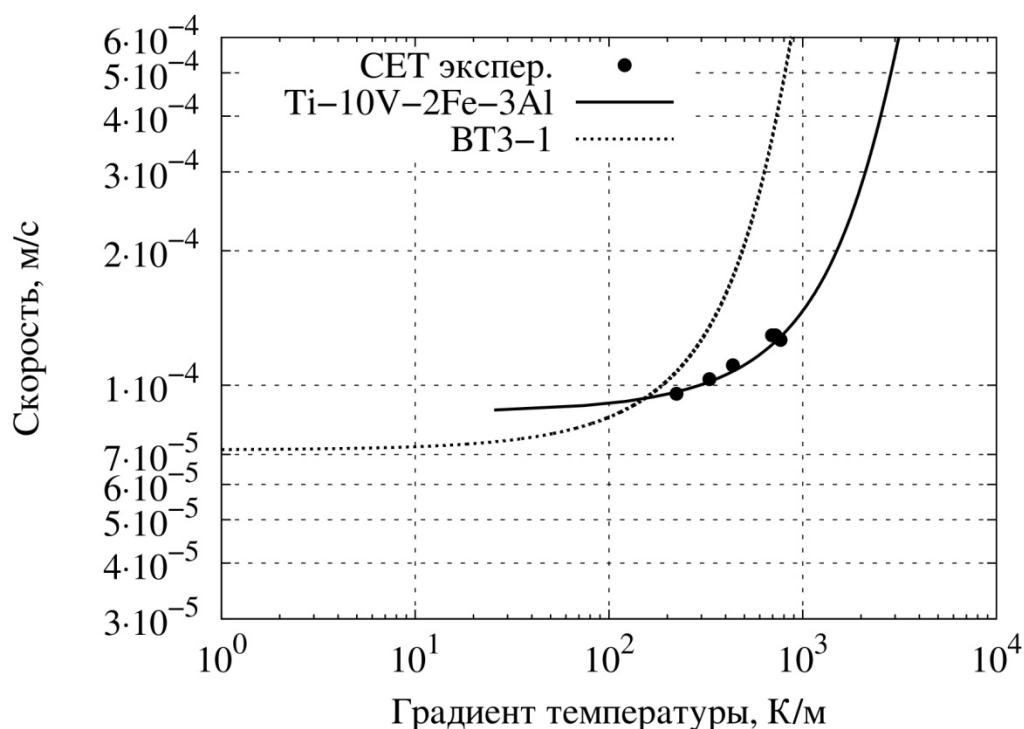


### Переход от столбчатого затвердевания к равноосному в титановых сплавах VT3-1 и Ti-10V-2Fe-3Al

Е. Н. Кондрашов<sup>1</sup>, М. О. Ледер<sup>1</sup>, М. А. Корнилова<sup>1</sup>, А. В. Горина<sup>1</sup>

<sup>1</sup>ПАО «Корпорация ВСМПО-АВИСМА», 624760 Россия, Свердловская обл., г. Верхняя Салда, ул. Парковая, 1

Рассмотрен переход от столбчатой структуры затвердевания к равноосной в титановых сплавах VT3-1 [1] и Ti-10V-2Fe-3Al [2] при вакуумном дуговом переплаве. Для построения GV-кривой используется линейная модель многокомпонентного сплава вместе с модифицированными моделями Ханта (для определения зависимости градиента температуры  $G$  от переохлаждения  $\Delta T$ ) и Иванцова (для определения концентраций на вершине дендрита в зависимости от скорости продвижения изотермы ликвидуса  $V$ ). Градиент температуры на изотерме ликвидуса и скорость ее продвижения вычислены с помощью математического моделирования процесса ВДП [3]. Неизвестные параметры модели определяются сравнением результатов модельных расчетов с экспериментальными данными, также полученными авторами [4].



- [1] Kondrashov E.N., Tarenkova N.Yu., Maksimov A.Yu., and Kornilova M.A. Study of the Crystallization Morphology of VT3-1 Alloy during VAR// Journal of Engineering Thermophysics. 2009. Vol. 18. No.1, P.80-84.

- [2] Ледер М.О., Кондрашов Е.Н. Переход от столбчатого затвердевания к равноосному в сплаве Ti-10V-2Fe-3Al// *Электротехнология*, 2016. *Принята к публикации*.
- [3] Kondrashov E.N., Musatov M.I., Maksimov A.Yu., Goncharov A.E., and Kononov L.V. Calculation of the Molten Pool Depth in Vacuum Arc remelting of Alloy VT3-1// *Journal of Engineering Thermophysics*, 2007. Vol. 16. No. 1. P. 19-25.
- [4] Ледер М.О., Горина А.В., Корнилова М.А., Таренкова Н.Ю., Кондрашов Е.Н. К определению теплофизических свойств титановых сплавов по профилям жидкой ванны // *Электротехнология*, 2015. №10. С. 20-27.

### Определение параметров модели ВДП для титановых сплавов Ti-3Fe, Ti-5Cr, VT3-1, Ti-6Al-4V и Ti-10V-2Fe-3Al

Е. Н. Кондрашов<sup>1</sup>, М. О. Ледер<sup>1</sup>, А. В. Горина<sup>1</sup>, М. А. Корнилова<sup>1</sup>

<sup>1</sup>ПАО «Корпорация ВСМПО-АВИСМА», 624760 Россия, Свердловская обл., г. Верхняя Салда, ул. Парковая, 1

В работе рассматривается методика определения некоторых теплофизических свойств титановых сплавов и параметров граничных условий при вакуумном дуговом переплаве (ВДП), необходимых для проведения математического моделирования по модели, разработанной на ВСМПО [1]. Методика базируется на моделировании процесса затвердевания и сравнения результатов расчета с экспериментально измеренными профилями жидкой ванны в слитке [2,3]. Если имеется набор *измеренных* аксиальных координат изотермы ликвидуса  $z_i^{изм} = z^{изм}(r_i)$  для заданных радиальных координат  $r_i$ , где  $i=1...N$  ( $N$  – число точек замера), то используя эти величины, набор из  $M$  неизвестных параметров  $\mathbf{b} = \{b_1...b_M\}$  определяется минимизацией функции [3]

$$R(\mathbf{b}) = \frac{1}{\sigma_z^2} \sum_{i=1}^N (z_i^{изм} - z_i^{расч}(\mathbf{b}))^2 + \sum_{m=1}^M \frac{(b_m - b_m^0)^2}{\sigma_m^2}, \quad (1)$$

где  $z_i^{расч}(b) = z^{расч}(r_i; b)$  – *рассчитанные* аксиальные координаты изотермы ликвидуса в положениях  $r_i$  с некоторым набором параметров  $b$ . Стандартное отклонение  $\sigma_z$  описывает типичную ошибку при измерениях координат. Изначально она не известна и связана как с ошибкой измерения расстояния, так и с ошибкой самого положения требуемой изотермы, так как точно не известно, какая именно изотерма фиксируется травлением на продольном сечении слитка. При высоких градиентах температуры и малой ширине двухфазной зоны эта ошибка невелика и в грубом приближении можно принять  $\sigma_z = 1 \div 3 \text{ мм}$ . Стандартные отклонения  $\sigma_m$  неизвестных параметров  $b_m$  принимаются равными их типичным интервалам изменения с центральным значением  $b_m^0$ . Для

определения набора параметров  $\mathbf{b}$ , минимизирующих  $R(\mathbf{b})$ , используется MAP (Maximum A Posteriori) алгоритм [3].

Проведено определение некоторых параметров модели ВДП для нескольких титановых сплавов, измерение которых затруднительно. Показано, что с помощью предложенной методики можно с достаточной точностью определять необходимые для дальнейшего математического моделирования величины [1,2,3].

- [1] Kondrashov E.N., Musatov M.I., Maksimov A.Yu., Goncharov A.E., and Kononov L.V. Calculation of the Molten Pool Depth in Vacuum Arc remelting of Alloy VT3-1// Journal of Engineering Thermophysics, 2007. Vol. 16. No. 1. P. 19-25.
- [2] Кондрашов Е.Н., Таренкова Н.Ю., Максимов А.Ю., Федоров Н.С., Коновалов Л.В. Корректировка значений теплофизических свойств титановых сплавов из анализа профилей жидкой ванны // Цветные металлы, 2008. №12. С. 68-71.
- [3] Ледер М.О., Горина А.В., Корнилова М.А., Таренкова Н.Ю., Кондрашов Е.Н. К определению теплофизических свойств титановых сплавов по профилям жидкой ванны // Электротехнология, 2015. №10. С. 20-27.

**Метод двухмасштабного моделирования селективного лазерного  
сплавления композитных металлических порошков  
при импульсной обработке**

М. Д. Кривилев<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Удмуртский государственный университет, 426034 Россия, г. Ижевск, ул. Университетская, 1

Методы вычислительного моделирования позволяют проводить быструю проверку теоретических предсказаний или обработку сложных экспериментальных данных при относительно низких затратах. Однако множество проблем материаловедения относятся к анализу коллективных явлений, происходящих в диапазоне временных и пространственных масштабов, которые сложно проанализировать в рамках решения единой сопряженной системы уравнений в одном расчете. В последнее десятилетие появились эффективные методы анализа, учитывающие широкий диапазон пространственно-временных масштабов и относящиеся к методу многомасштабного моделирования [1]. Описание формирования микроструктуры методом многомасштабного анализа состоит в разложении комплексной задачи на набор разномасштабных задач, описывающих основные физические явления на соответствующих пространственно-временных

масштабах. В результате многомасштабный метод позволяет качественно описывать и количественно оценивать детали микроструктуры и свойства материалов как на атомарном, так и на мезоскопическом или даже на макроскопическом масштабе [2, 3].

Для получения адекватного теоретического описания лазерной обработки применен метод двухмасштабного моделирования, разработанный ранее [4] для процессов безконтейнерной кристаллизации расплавов. Показано [5], что применение двухмасштабного численного моделирования процессов тепло- и массопереноса, сопряженных с фазовыми превращениями, в пористой порошковой среде при действии лазерного излучения позволяет прогнозировать характеристики материалов, полученных аддитивными технологиями. Обсуждены вопросы выбора представительного объема, критерия разбиения задачи на уровни, постановки краевой задачи и взаимосвязи моделей на различных уровнях. Приведены примеры расчета тепловых полей, эффективных теплофизических характеристик, динамики коагуляции частиц, характерных времен затвердевания зоны оплавления с использованием предложенного метода для порошка карбонильного железа.

Показано, что эффективные значения теплофизических параметров при низкой насыпной относительной плотности отклоняются от линейного закона Лыкова для типичных порошков, используемых в аддитивных технологиях. Коагуляция частиц при импульсной обработке происходит за  $10^1$ - $10^2$  мкс во время действия импульса. Окончательное компактирование протекает на стадии остывании зоны оплавления. Полученные данные о динамике коагуляции используются в качестве входных параметров в кинетическом уравнении для расчета распределения пористости, рассчитываемом на макроскопическом масштабе. Проведенное сравнение с экспериментальными данными свидетельствует о хорошем количественном согласии моделей с натурными испытаниями.

- [1] De Pable J.J., Curtin W.A. Multiscale modeling in advanced materials research: challenges, novel methods, and emerging applications // Mater. Res. Soc. Bull. 2007. Vol. 32. N 11. P. 905-911.
- [2] Трусов П.В., Волегов П.С., Янц А.Ю. Двухуровневые модели поликристаллов: о независимости образа процесса нагружения представительского макрообъема // Физическая мезомеханика. Т. 16. № 6. 2013. С. 33-41.
- [3] Кривилев М.Д., Афлятунова Д.Д., Анкудинов В.Е., Гордеев Г.А. Многомасштабное теоретическое описание структурообразования в ультрадисперсных системах // Материаловедение. 2012. №1. С. 2-6.
- [4] Krivilyov M., Volkman T., Gao J., Fransaer J. Multiscale analysis of the effect of competitive nucleation on phase selection in rapid solidification of rare-earth ternary magnetic materials // Acta Materialia. 2012. V. 60. P. 112-122.

- [5] Кривилев М.Д., Харанжевский Е.В., Лебедев В.Г., Данилов Д.А., Данилова Е.В., Галенко П.К. Синтез композитных покрытий при высокоскоростном лазерном спекании металлических порошковых смесей // Физика металлов и металловедение. 2013. Т. 114. № 10. С. 871-893.

### Особенности мартенситных превращений и кристаллизации в аморфизирующихся сплавах $\text{Cu}_{50}\text{Zr}_{50}$ и $\text{Cu}_{46}\text{Zr}_{46}\text{Al}_8$

Т. В. Куликова<sup>1</sup>, А. А. Рыльцева<sup>1</sup>, В. А. Быков<sup>1</sup>, С. Х. Эстемирова<sup>1</sup>,  
Д. А. Ягодин<sup>1</sup>, К. Ю. Шуняев<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Институт металлургии УрО РАН, 620016 Россия, г. Екатеринбург, Амундсена, 101

Система Cu-Zr обладает уникальной стеклообразующей способностью и поэтому является основой для создания объемноаморфных металлических сплавов [1-2]. Бинарный сплав  $\text{Cu}_{50}\text{Zr}_{50}$  демонстрирует также эффекты памяти формы за счет формирования метастабильных мартенситных фаз [3]. Известно, что малые добавки алюминия в систему Cu-Zr не только повышают стеклообразующую способность, но и улучшают механические свойства сплава [4-6]. В связи с этим является интересным исследовать влияние алюминия на указанные выше свойства сплава  $\text{Cu}_{50}\text{Zr}_{50}$ . Ранее было показано, что сплав  $\text{Cu}_{46}\text{Zr}_{46}\text{Al}_8$  обладает наибольшей аморфизирующей способностью среди систем  $\text{Cu}_{50-x}\text{Zr}_{50-x}\text{Al}_{2x}$  [6]. Цель данной работы - сравнить особенности протекания мартенситных превращений, аморфизирующую способность, кинетику кристаллизации бинарного сплава  $\text{Cu}_{50}\text{Zr}_{50}$  и тройной системы  $\text{Cu}_{46}\text{Zr}_{46}\text{Al}_8$ .

Образцы были получены двумя способами: путем дуговой плавки (скорость охлаждения около 200 град/сек) и путем вакуумного литья (скорость охлаждения около 1000 град/сек).

Известно, что при быстром охлаждении сплава  $\text{Cu}_{50}\text{Zr}_{50}$  кубическая «аустенитная» фаза CuZr B2 при  $T_{A \rightarrow M} = 473$  К переходит в смесь двух мартенситных моноклинных фаз B19' ( $P2_1/m$ ) и *Sm*. В результате ДСК исследований и дилатометрических измерений, а также рентгенофазового анализа, было обнаружено, что добавление алюминия в бинарный сплав  $\text{Cu}_{50}\text{Zr}_{50}$  существенно понижает температуру мартенситного перехода. В тройном сплаве  $\text{Cu}_{46}\text{Zr}_{46}\text{Al}_8$  эта температура равна 275 К, что приводит к возможности протекания изотермического мартенситного превращения при комнатной температуре. Также было обнаружено, что добавление алюминия подавляет образование второй мартенситной фазы *Sm*. Отметим, что сам факт наличия мартенситного перехода при комнатной температуре является интересным и потенциально важным для практического применения исследуемого сплава.

Показано, что высокая стеклообразующая способность тройной системы

$\text{Cu}_{46}\text{Zr}_{46}\text{Al}_8$  позволяет получать объемноаморфные образцы при скорости охлаждения порядка 200 К/с, достигаемой при сплавлении в дуговой печи. Структура и термическая стабильность образцов, полученных при скоростях охлаждения в 200 и 1000 К/с, близки. Обнаружено, что кристаллизация объемноаморфного сплава  $\text{Cu}_{46}\text{Zr}_{46}\text{Al}_8$  протекает в две стадии, протекающие как последовательные реакции вида:  $A \rightarrow B \rightarrow C$ . Первая стадия соответствует образованию метастабильного тройного соединения, которое затем распадается с образованием стабильной фазы  $\text{Cu}_{10}\text{Zr}_7$ .

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского Научного Фонда (№ проекта 14-13-00676).

- [1] A. Inoue, Acta Mater, 2000, V. 48, p. 279 - 306.
- [2] Inoue, W. Zhang, Mater Trans, 2004, V. 45, p. 584 - 587.
- [3] Y. N. Koval, G.S. Firstov, A.V. Kotko, Scripta Metall. Mater., 1992, V. 27, 1611.
- [4] F. Lu, L. T. Kong, Z. Jiang, et al., J. Mater. Sci., 2014, V. 49, p. 496 - 503.
- [5] Wang, H. Tan, Y. Li, Acta Mater., 2005, V. 53, p. 2969 - 2979.
- [6] Q. Zhang, W. Zhang, G. Xie, A. Inoue, Mater. Trans., 2007, V. 48, No. 7, 1626.

### **Получение и аттестация керамических покрытий на основе WC и $\text{ZrO}_2$ методом высокоскоростного лазерного плавления.**

И. С. Маркова<sup>1</sup>, Е. В. Харанжевский<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Удмуртский государственный университет, 426034 Россия, г. Ижевск, ул. Университетская, 1, к. 4

Керамические покрытия обладает рядом полезных свойств: обладают высокой температурой плавления, твердостью, износостойкостью, хорошей стойкостью к коррозии. Нанесение таких покрытий на мягкие подложки, такие как конструкционные и инструментальные стали не дает желаемого результата: хрупкость покрытия и сравнительно невысокая прочность сцепления покрытия с подложкой.

В связи с этим был применен метод высокоскоростного лазерного плавления для улучшения адгезионной прочности нанесением градиентных покрытий, где свойства постепенно меняются по сечению: более мягкие внутренние слои могут обеспечить лучшую адгезию покрытия к подложке, тогда как более твердые наружные слои сообщают высокую износостойкость, коррозионную стойкость.[1]. Порошки для покрытия смешивались в процентном соотношении: 1- 95% (WC) и 5% ( $\text{ZrO}_2$ ) по масс.; 2- 90% (WC) и 10 % ( $\text{ZrO}_2$ ) по масс. Полученные покрытия на основе карбида вольфрама и оксида циркония имеют гладкий вид с зеркальным блеском.

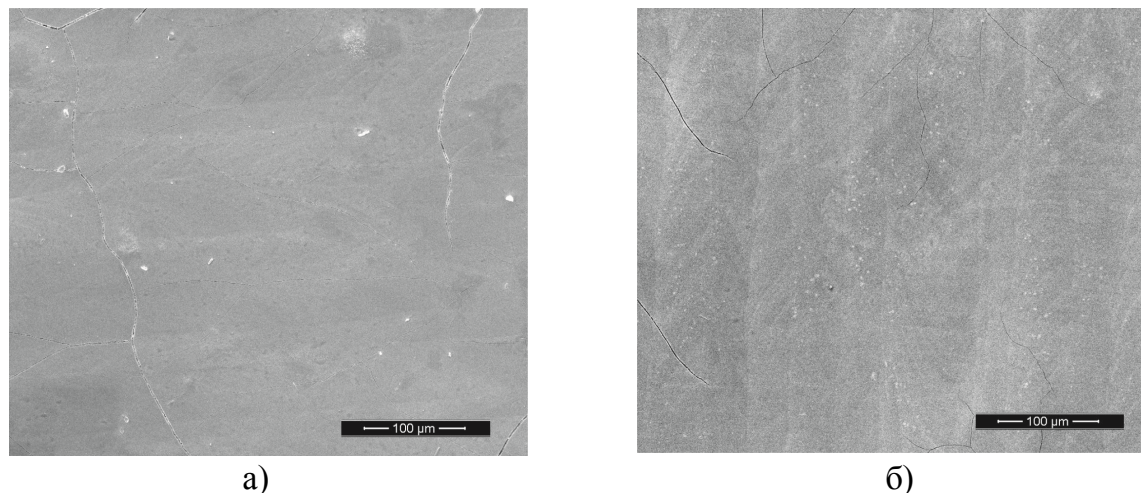


Рис.1. Фотографии образцов на основе WC и ZrO<sub>2</sub> полученных методом высокоскоростного лазерного плавления при увеличении 500 раз: а) 95% (WC) и 5% (ZrO<sub>2</sub>) по масс.; б) 90% (WC) и 10 % (ZrO<sub>2</sub>) по масс.

Измерена толщина керамических покрытий, которая составляет 12 мкм. Проверялась микротвердость образцов при нагрузке 100 г. по методу Виккерса. Твердость покрытия с составом 95% (WC) и 5% (ZrO<sub>2</sub>) получилась 0.76 ГПа. У образца с покрытием 90% (WC) и 10 % (ZrO<sub>2</sub>) твердость меньше чем у первого, она составляет 0.35 ГПа.

Таким образом, были получены керамические покрытия на нержавеющей стали методом высокоскоростного лазерного плавления с хорошей адгезионной прочностью. Твердость таких покрытий превышает твердость подложки.

- [1] Харанжевский Е.В., Кривилев М.Д., Решетников С.М., Николаева И.С., Борисова Е.М., Коррозионно-электрохимические свойства карбидовольфрамовых покрытий, полученных короткоимпульсным лазерным облучением. Ч.І. получение и аттестация покрытий //Коррозия: материалы, защита, 2015. №8. С 42-47.

### Анализ эвтектического роста из переохлажденных бинарных расплавов Cu-Zr

А. Н. Медянкин<sup>1</sup>, П. К. Галенко<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Уральский федеральный университет, 620000 Россия, г. Екатеринбург, ул. Ленина, 51

<sup>2</sup>Институт физики материалов в космосе, Германский аэрокосмический центр, Германия, г. Кёльн

Исследование процессов затвердевания эвтектических сплавов представляет большой научно-практический интерес [1,2,3]. Для моделирования структуры и

предсказания основных параметров эвтектических структур разработаны специальные методы теоретического моделирования [4]. Для описания высокоскоростных процессов эвтектических структур была предложена модель [5], в которой учтены условия локальной неравновесности как на границе эвтектика-расплав, так и в объеме расплава.

Особенностью данной модели высокоскоростного эвтектического двухфазного роста является описание экспериментально наблюдаемого перехода от диффузионно-лимитируемого режима к бездиффузионному режиму кристаллизации с формированием однородной и однофазной структуры кристаллов.

Развитие модели [5], выполненное в настоящей работе, позволяет определять скорость и межпластинчатое расстояние эвтектической колонии на квазистационарной стадии роста. Для оценки применимости развитой модели дано сравнение ее теоретических предсказаний и данных эксперимента по кристаллизации капель из эвтектических сплавов Cu-Zr в электростатическом левитаторе.

- [6] Курц У., Зам П.Р. *Направленная кристаллизация эвтектических материалов.* - М.: Металлургия, 1980. – 272 с.
- [7] Херлах Д., Галенко П., Холланд-Мориц Д., *Метастабильные материалы из переохлажденных расплавов.* - М. – Ижевск: Институт компьютерных исследований, 2010. – 481 с.
- [8] Курц У., Фишер Д. *Фундаментальные основы затвердевания.* - М. – Ижевск: Институт компьютерных исследований, 2013. – 300 с.
- [9] Akamatsu S., Plapp M. *Eutectic and peritectic solidification patterns* / S. Akamatsu, M. Plapp // *Current opinion in solid state & materials science* – 2005. – Vol. 19 – P. 265-314.
- [10] Galenko P.K., Herlach D.M. *Diffusionless crystal growth in rapidly solidifying eutectic systems* / P.K. Galenko, D.M. Herlach // *Physical Review Letters.* – 2006. – Vol. 96 – P. 150602-1-4.

### **Формирование состава поверхностных слоев фольги Ni-Cu методом ионной имплантации**

А. А. Новоселов<sup>1</sup>, В. Я. Баянкин<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Физико-технический институт УрО РАН, Ижевск (less@ftiudm.ru)

Методами рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии, рентгеноструктурного анализа и измерения микротвердости исследовалось влияние имплантации ионов бора и аргона при различных плотностях ионного тока на химический состав и дефектную структуру медно-никелевых фольг.



В качестве объекта исследований использовалась прокатанная фольга состава  $Ni_{20}Cu_{80}$  толщиной 40 мкм.

Анализ химического состава облученных образцов методом рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии показал, что в облученных образцах формируется немонотонная осциллирующая зависимость состава сплава и концентрации имплантированных ионов по глубине. Имплантация химически активного элемента – бора – приводит к более высокому содержанию меди в приповерхностном слое толщиной 20 нм. Анализ рентгеноэлектронных спектров выявил наличие боридов металлов. Исследования микротвердости имплантированных фольг, как структурозависимого параметра материала, выявили упрочнение как облученной, так и необлученной стороны фольги.

По нашему мнению, полученные результаты свидетельствуют о том, что исследуемая система является неравновесной и при ее рассмотрении нельзя ограничиваться рамками классической термодинамики.

Предлагается объяснение наблюдаемого композиционного расслоения вследствие радиационно-индуцированной сегрегации и преимущественного связывания атомов определенного сорта с потоками дефектов. Кроме того, дефектная структура прокатанных фольг является исходно сильно неравновесной, напряженной и обладающей высокой плотностью дислокаций. Ионная имплантация приводит к трансформации дефектной структуры, что вызывает локальные градиенты механических напряжений. Их наличие является еще одной причиной возникновения потоков дефектов и, соответственно, атомов вещества.

Выявленное формирование осциллирующей немонотонной зависимости отношения концентраций Ni/Cu и концентрации бора в поверхностных слоях можно объяснить изменением дефектной структуры фольг при облучении, вызывающей локальные градиенты механических напряжений, что, в свою очередь, обуславливает диффузионное перераспределение компонентов системы. Формирование осциллирующего распределения компонентов системы в поверхностных слоях с необлучаемой стороны может быть связано с протяженным изменением дефектной структуры фольги вследствие влияния ударных волн, формирующихся при ионной бомбардировке.

## Лазерный синтез полиимидных пленок для создания углеродных наноструктурных материалов электродов электрохимических конденсаторов

Т. А. Писарева<sup>1</sup>, Е. В. Харанжевский<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Удмуртский государственный университет, 426034 Россия, г. Ижевск, ул. Университетская, 1

В последние годы внимание учёных направлено на создание новых источников хранения энергии. Среди различных систем хранения энергии особое место заняли электрохимические конденсаторы.

Электрохимические конденсаторы (ЭК) – это класс электрохимических устройств хранения энергии, который идеально подходит для процессов, связанных с быстрым накоплением или высвобождением энергии [1].

Большое количество обзорных статей [2-8] посвящено научным и технологическим аспектам создания новых материалов электродов ЭК. Усилия направлены не только на увеличение удельной площади поверхности материалов, но и на создание заданной пористости активного материала при приемлемой себестоимости производства.

В данной работе использовали метод лазерного синтеза для создания наноструктурных углеродных материалов электродов электрохимических конденсаторов. Высокоэффективные электроды ЭК получали методом короткоимпульсной обработки полиимидной пленки марки ПМ-1 в среде аргона при помощи оптоволоконного иттербиевого лазера. В ходе обработки благодаря высокой удельной плотности мощности происходил оптический пробой полиимидной пленки и деструкция материала с образованием углеродных наноструктур.

Для исследования свойств полученных материалов, формировали электроды ЭК толщиной 100 мкм на основе синтезируемых наноструктурных форм углерода с добавлением высокодисперсного порошка фторопласта в размере 5 мас.%. Полученный материал и электроды ЭК наноструктурных материалов исследовали методом БЭТ и Рамановской спектроскопии. Изображения электродов ЭК были получены с помощью сканирующей электронной микроскопии, по результатам которой были сделаны выводы о его составе.

Из результатов измерений функциональных характеристик ЭК, можно сделать вывод о высокой перспективности использования синтезируемых углеродных материалов. Полученные наноструктурные формы углерода могут быть использованы в составе с другими материалами, например с активированными углями, для улучшения свойств электрохимических конденсаторов.

- [1] Conway B.E. Electrochemical supercapacitors: scientific fundamentals and technological applications. – New York: Springer. 1999. – 698 p.
- [2] Kotz R., Carlen M. Principles and applications of electrochemical capacitors // *Electrochimica Acta*. 2000. V. 45. № 15-16. P. 2483-2498.
- [3] Sarangapani S., Tilak B.V., Chen C.P. Materials for Electrochemical Capacitors // *Journal of the electrochemical society*. 1996. V. 143. № 11. P. 3791-3799.
- [4] Zhang Y., Feng H., Wu X. и др. Progress of electrochemical capacitor electrode materials: A review // *International Journal of Hydrogen Energy*. 2009. V. 34. №11. P. 4889-4899.
- [5] Burke A. Ultracapacitors: why, how, and where is the technology // *Journal of Power Sources*. 2000. V. 91. P. 37-50.
- [6] Gogotsi Y., Simon P. True performance metrics in electrochemical energy storage // *Materials Science*. 2011. V. 334. P. 917-918.
- [7] Simon P., Gogotsi Y. Materials for electrochemical capacitors // *Nature materials*. 2008. V. 7. №11. P. 845-854.
- [8] Wang G., Zhang L., Zhang J. A review of electrode materials for electrochemical supercapacitors // *Chemical Society Reviews*. 2012. V. 41. P. 797-828.

**Исследование влияния параметров изготовления на структуру и свойства образцов из никелевого сплава, полученных методом селективного лазерного плавления**

А. А. Попович<sup>1</sup>, В. Ш. Суфияров<sup>1</sup>, Е. В. Борисов<sup>1</sup>, И. А. Полозов<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, 195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая, 29.

E-mail: Evgenii.borisov@icloud.com

Проведено исследование микроструктуры и свойств образцов, полученных по технологии селективного лазерного плавления из жаропрочного никелевого сплава Inconel 718. В работе исследовано влияние толщины слоя построения, мощности лазерного излучения, скорости сканирования лазерным лучом, а также расстояния между проходами на микроструктуру, пористость и фазовый состав компактных образцов.

Варьирование основных технологических параметров позволило определить значения, обеспечивающие наибольшую относительную плотность компактного материала. Были использованы два метода оценки плотности заготовок, а именно гидростатическое взвешивание и металлографический метод, которые вместе дают более полную картину пористости в изделиях.

Исследование микроструктуры полученных образцов позволило оценить конфигурацию застывших ванн расплава, их взаимное расположение. Высота этих ванн больше толщины слоя, что говорит о значительном повторном

переплаве предыдущего слоя при лазерной обработке вне зависимости от применяемой толщины слоя построения.

Микроструктура образцов представляет собой направленные столбчатые дендритные ячейки, которые растут, как правило, в направлении движения источника тепла (лазера). Наблюдаемый размер ячеек при толщине слоя построения 50 мкм на 20–30 % больше по сравнению с размерами ячеек образца, изготовленного при толщине слоя построения 30 мкм, что свидетельствует о более высокой скорости охлаждения при кристаллизации в случае более тонкого слоя.

Проведенное исследование показало различия фазового состава исходного порошкового материала и компактных образцов. Эти различия обуславливаются разницей скоростей охлаждения металла при газовой атомизации порошка и лазерной обработке сплава в процессе селективного лазерного плавления. Также показаны различия фазового состава при различной толщине слоя, свидетельствующие о неодинаковых условиях кристаллизации сплава.

Были определены механические свойства образцов, изготовленных по выбранному режиму. В результате исследования установлено влияние толщины слоя при построении образцов на их прочностные и пластические свойства. При использовании более тонкого слоя прочностные свойства лучше, а пластические хуже, чем при использовании более толстого слоя. Также выявлено влияние положения образцов при их изготовлении на прочностные и пластические свойства: горизонтально выращенные образцы показывают более высокую прочность и низкую пластичность, чем вертикальные образцы. Поверхность изломов для сплава Inconel 718 характеризуется наличием неглубоких ямок малых размеров, как правило, характерных для вязкого разрушения материала. В то же время в изломе также обнаруживаются области, похожие на трещины, которые также могут являться следствием неполного проплавления порошкового слоя и имеющие гладкую поверхность, обычно связываемую с хрупким изломом.

### **Оценка температурно-временной зависимости скорости зарождения, контролирующей формирование нанокompозитной структуры в аморфных сплавах на основе алюминия**

С. Г. Рассолов<sup>1</sup>, В. В. Максимов<sup>1</sup>, Т. Н. Моисеева<sup>1</sup>, А. И. Лимановский<sup>1</sup>,  
Т. А. Хачатурова<sup>1</sup>, В. И. Ткач<sup>1</sup>

<sup>1</sup> ГУ «Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина», ул. Р. Люксембург, 72, 283114, Донецк

Значительное повышение уровня магнитно-мягких или прочностных свойств ряда металлических стекол (МС) на основе Fe и Al соответственно,

обусловленное формированием в аморфной структуре наномасштабных кристаллов базового элемента, стимулировало интерес исследователей к изучению закономерностей этого процесса, который получил название нанокристаллизация. Образующиеся в процессе нанокристаллизации аморфно-кристаллические структуры (нанофазные композиты) характеризуются исключительно высокими значениями объемной плотности нанокристаллов ( $10^{21}$ – $10^{24}$  м<sup>-3</sup>), средние размеры которых лежат в диапазоне 10–30 нм. Проведенные за последние два десятилетия исследования механизма формирования нанокомпозитных структур показали, что отличительной особенностью этого процесса является рост кристаллов, состав которых отличается от состава аморфной матрицы.

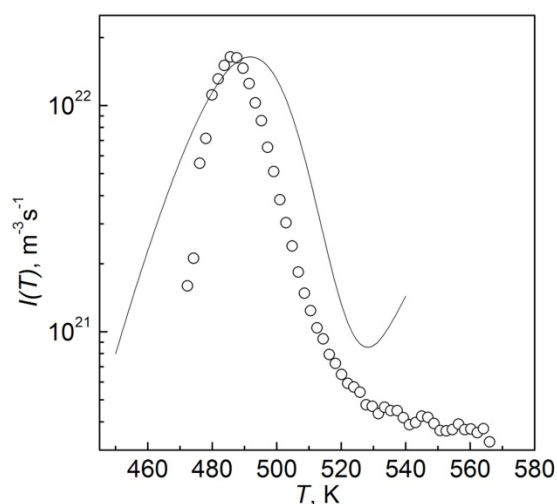


Рис. 1. Изменения скорости зарождения нанокристаллов Al в образцах МС  $Al_{87}Ni_8Y_5$  в процессе нагрева со скоростью 5 К/мин, оцененные по экспериментальным данным (○) и рассчитанные по предложенной модели – линия.

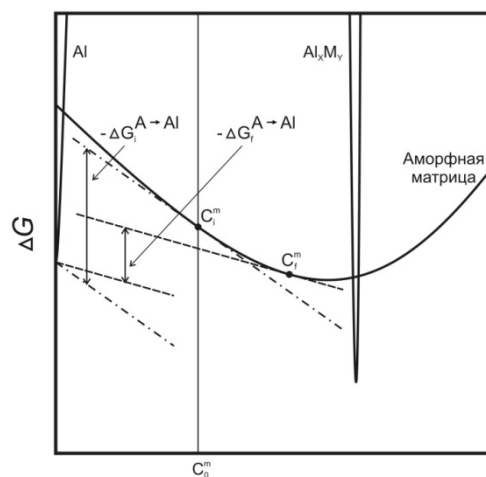


Рис. 2. Схема изменения термодинамической движущей силы формирования зародышей Al при увеличении концентрации легирующих элементов в остаточной аморфной матрице [2].

Методами рентгенографического анализа, измерения электросопротивления и микротвердости исследованы изменения размеров нанокристаллов Al  $L(t, T)$ , прочностных характеристик и кинетика формирования нанокомпозитной структуры  $X(t, T)$  на первой стадии кристаллизации МС  $Al_{87}Ni_8Y_5$  в процессе изотермических отжигов и при нагреве со скоростью 5 К/мин. Исследования проводились на ленточных образцах толщиной  $50 \pm 2$  мкм, полученных методом спиннингования расплава. Экспериментально измеренные зависимости  $L(t, T)$  описаны аналитической моделью [1], учитывающей столкновение

диффузионных полей, и определены значения эффективного коэффициента диффузии, контролирующего процесс роста.

Используя полученные зависимости  $L(t, T)$  и  $dX(t, T)/dt$ , оценены скорости зарождения нанокристаллов Al и установлено, что в процессе нанокристаллизации при температурах 460, 501 и 536 К они существенно снижаются от  $3,36 \times 10^{20}$ ,  $1,15 \times 10^{21}$  и  $1,67 \times 10^{21} \text{ м}^{-3} \text{ с}^{-1}$  до  $1,0 \times 10^{18}$ ,  $1,2 \times 10^{18}$  и  $1,4 \times 10^{18} \text{ м}^{-3} \text{ с}^{-1}$  соответственно.

Установлено, что в условиях непрерывного повышения температуры скорость зарождения нанокристаллов Al в МС  $\text{Al}_{87}\text{Ni}_8\text{Y}_5$  возрастает до максимального значения  $1,6 \times 10^{22} \text{ м}^{-3} \text{ с}^{-1}$  (в диапазоне температур 485–489 К), а к завершению процесса нанокристаллизации (570 К) снижается примерно на два порядка величины (рис. 1).

Проведенный анализ показал, что наблюдаемое снижение скорости зарождения может быть количественно интерпретировано подстановкой в классическое уравнение скорости гомогенного зарождения зависящей от концентрации легирующих элементов в аморфной матрице термодинамической движущей силы, рассчитанной в модели регулярных растворов [3] (рис. 2).

Установлено, что предварительный нагрев образцов до температур, соответствующих максимуму скорости зарождения, приводит к снижению температуры начала кристаллизации при повторном нагреве на 9 К и увеличению микротвердости нанокompозитной структуры от 5210 до 5700 МПа, что обусловлено повышением объемной плотности нанокристаллов Al от  $1,87 \times 10^{23}$  до  $3,4 \times 10^{23} \text{ м}^{-3}$ .

- [1] Tkatch V.I., Rassolov S.G., Moiseeva T.N., Popov V.V. Analytical description of isothermal primary crystallization of glasses:  $\text{Fe}_{85}\text{B}_{15}$  amorphous alloy // J. Non-Cryst. Sol., 2005. Vol. 351. P. 1658–1664.
- [2] Perepezko J.H., Hebert R.J., Tong W.S. Amorphization and nanostructure synthesis in Al alloys // Intermetallics. 2002. Vol. 10. P. 1079–1088.
- [3] Thompson C.V., Spaepen F. Homogeneous crystal nucleation in binary metallic melts // Acta Metall. – 1983. Vol. 31. No. 12. P. 2021–2027.

### **О влиянии расплава на локальное упорядочение аморфного сплава $\text{Fe}_{82}\text{B}_{18}$**

А. А. Суслов<sup>1</sup>, В. И. Ладьянов<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Физико-Технический Институт Уральского Отделения Российской Академии Наук, 426000 Россия, г. Ижевск, ул. Кирова, 132

Ранее показано, что кинетика и механизм кристаллизации быстрозакаленных аморфных лент  $\text{Fe}_{82}\text{B}_{18}$  полученных от разных температур расплава, отличаются и связаны со структурным состоянием исходного расплава [1, 2]. Учитывая

структурную наследственность при сверхбыстрой закалке, представляет интерес исследование ближнего порядка исходных аморфных лент. В работе сравнивались структурные модели аморфных состояний сплава  $Fe_{82}B_{18}$ , полученных от разных температур закалки из расплава.

Из сплава состава Fe - 18 ат. % B были получены аморфные ленты методом спиноингования от разных температур расплава. Полученные экспериментальные дифракционные кривые обрабатывались с помощью программы RAD [3]. Для получения структурной модели аморфного состояния выполнялось моделирование методом обратного Монте-Карло для 5000 атомов (4100 атомов Fe и 900 атомов B). Моделирование было выполнено с использованием программы RMC\_POT [4]. Локальный ближний порядок модельных структур был проанализирован с помощью полиэдров Вороного.

Использование данных методик позволило выявить отличия между локальной структурой аморфных лент, полученных от различных температур расплава. Так, ближний порядок на основе атомов Fe характеризуется кластерами близкими к ОЦК структуре с присутствием упорядочения близкого к икосаэдрическому типу. С изменением температуры расплава доля кластеров этих типов увеличивается.

- [1] V.I. Lad'yanov, A.A. Suslov, A.L. Bel'tyukov, A.I. Shishmarin, M.A. Eremina and V.A. Volkov About features on viscosity politerms of hypereutectic Fe-B melts and their development in crystallization kinetics of rapid quenching ribbons // Journal of Physics: Conference Series, 98, 052014 (2008)
- [2] Alexey A. Suslov and Vladimir I. Lad'yanov Effect of quenching temperature on orthorhombic boride formation at crystallization of amorphous ribbons  $Fe_{82}B_{18}$  // AIP Conference Proceedings 1673, 020021 (2015)
- [3] V. Petkov RAD, a program for analysis of X-ray diffraction data from amorphous materials for personal computers // J. Appl. Crystallogr. 22 (1989) 387-89
- [4] Gereben O., Jóvári P., Temleitner L., Pusztai L. A new version of the RMC++ Reverse Monte Carlo programme, aimed at investigating the structure of covalent glasses // Journal of Optoelectronics and Advanced Materials, (2007, 10), 9, 3021-3027.

### **Связь термической устойчивости металлических стекол с эффективными коэффициентами диффузии, контролирующими процесс кристаллизации**

В. И. Ткач<sup>1</sup>, С. Г. Рассолов<sup>1</sup>, С. В. Васильев<sup>1</sup>, О. В. Коваленко<sup>1</sup>, Е. А. Свиридова<sup>1</sup>

<sup>1</sup>ГУ «Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина», ул. Р. Люксембург, 72, 283114, Донецк

Термическая устойчивость (ТУ) аморфной фазы является одной из наиболее важных характеристик металлических стекол (МС), поскольку процесс

кристаллизации приводит к резким изменениям всех структурно-чувствительных физических свойств. С физической точки зрения наиболее корректной количественной характеристикой ТУ при нагреве с постоянной скоростью является температура начала кристаллизации,  $T_{\text{ons}}$ , которая определяется по данным термографического анализа или по изменениям физических свойств.

С другой стороны, процесс кристаллизации является диффузионно-контролируемым и недавно проведенные исследования [1] показали, что ТУ стеклов, склонных к нанокристаллизации, определяется эффективными коэффициентами диффузии  $D_{\text{eff}}(T)$ , которые контролируют рост нанокристаллов. Об этом, в частности, свидетельствует тот факт, что для МС на основе Fe и Al с существенно различными  $T_{\text{ons}}$  пороговые значения  $D_{\text{eff}}(T_{\text{ons}})$  оказались лежащими в узком диапазоне значений  $(2-4) \times 10^{-20}$  м<sup>2</sup>/с. Однако позднее было установлено [2], что для кристаллизующегося по аналогичному механизму МС Fe<sub>80</sub>B<sub>14</sub>Si<sub>6</sub> пороговое значение  $D_{\text{eff}}(T_{\text{ons}})$  оказалось примерно на 2 порядка выше.

В настоящей работе были поставлены следующие задачи: определить структурные параметры при  $T_{\text{ons}}$  серии МС на основе Fe и Al, полученных закалкой из жидкого состояния и исследованных в работах [1] и [2], и установить связь между значениями  $D_{\text{eff}}(T_{\text{ons}})$  с одной стороны и структурой и механизмом начальных стадий нанокристаллизации – с другой. Значения  $T_{\text{ons}}$  в работах [1,2] определялись по стандартной процедуре для термограмм дифференциальной сканирующей калориметрии (ДСК), как точки пересечения касательных в точке перегиба профиля максимума скорости тепловыделения (пропорциональной скорости кристаллизации) с фоном (рис. 1).

Из сравнения изменений  $dX/dT$  и кривой  $X(T)$ , полученной интегрированием, было установлено, что объемные доли кристаллической фазы  $X_{\text{ons}}$  при  $T_{\text{ons}}$  составляют  $0,006 \pm 0,0015$  (рис. 1). Используя соотношения  $N_{\text{ons}} = 6X_{\text{ons}} / (\pi L_{\text{ons}}^3)$  и  $L(T) = 2\lambda_z [D_{\text{eff}}(T)t_{\text{eff}}(T)]^{1/2}$  [3] и приведенные в работах [1,2] зависимости  $D_{\text{eff}}(T)$ , для группы МС на основе Fe и Al были рассчитаны значения плотности нанокристаллов  $N_s$ , сформированных в аморфной матрице в процессе нагрева со скоростью  $q = 0,167$  К/с до температур начала кристаллизации. (Здесь:  $L_{\text{ons}}$  – диаметр нанокристалла при  $T_{\text{ons}}$ ,  $\lambda_z (= [2(C_I - C_M)/(C_I - C_P)]^{1/2})$  – безразмерный параметр, зависящий от концентрации легирующих элементов в нанокристалле  $C_P$  и в матрице на границе раздела  $C_I$  и вдали от нее  $C_M$ , а  $t_{\text{eff}} (= T^2/qQ)$  – эффективное время неизотермического диффузионного процесса с энергией активации  $Q$ ). Сопоставлением рассчитанных значений  $N_s$  и пороговых коэффициентов диффузии  $D_{\text{eff}}(T_{\text{ons}})$  впервые установлено, что между этими параметрами существует четкая корреляция (рис. 2), а сравнительный анализ структурных параметров нанофазных композитов на начальных и конечных [1,2] стадиях кристаллизации показал, что ТУ МС 1 и 2 лимитируется процессом зарождения, а остальных – диффузионно-контролируемого роста.



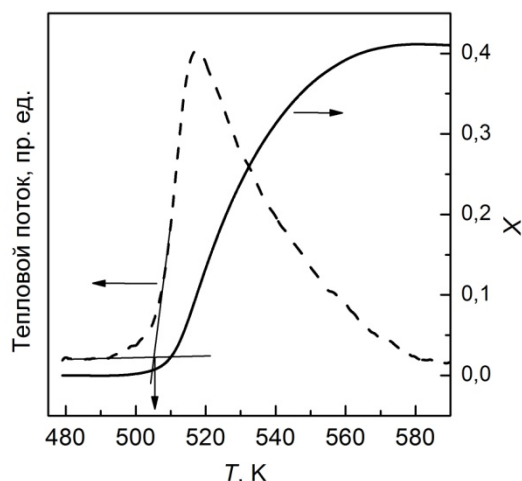


Рис. 1. Схема определения температуры начала кристаллизации по термограмме ДСК при нагреве со скоростью 0,167 К/с на примере МС  $\text{Al}_{87}\text{Ni}_4\text{Fe}_4\text{Gd}_5$  ( $T_{\text{ons}} = 505$  К,  $X_{\text{ons}} = 0.007$ ).

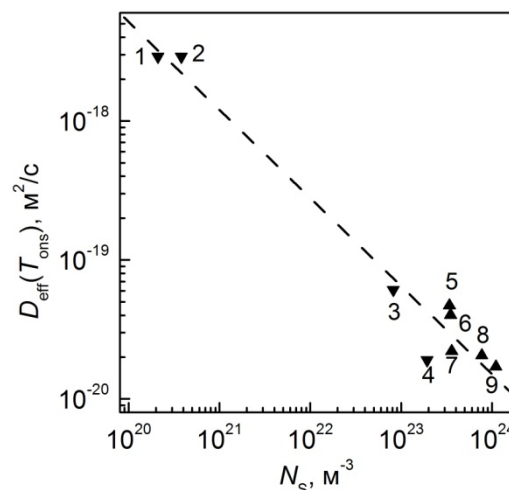


Рис. 2. Связь между пороговыми значениями эффективными коэффициентами диффузии и объемной плотностью нанокристаллов при  $T_{\text{ons}}$  в МС на основе Fe ( $\blacktriangledown$ ) и Al ( $\blacktriangle$ ), составы которых приведены ниже.

1 –  $\text{Fe}_{85}\text{B}_{15}$ , 2 –  $\text{Fe}_{80}\text{B}_{14}\text{Si}_6$ , 3 –  $\text{Fe}_{45}\text{Ni}_{19.4}\text{Co}_{8.5}\text{Cr}_{5.7}\text{Mo}_{1.9}\text{B}_{14}\text{Si}_{5.5}$ , 4 –  $\text{Fe}_{73.5}\text{Si}_{13.5}\text{B}_9\text{Cu}_1\text{Nb}_3$ , 5 –  $\text{Al}_{87}\text{Ni}_8\text{Gd}_5$ , 6 –  $\text{Al}_{87}\text{Ni}_8\text{Y}_5$ , 7 –  $\text{Al}_{87}\text{Ni}_4\text{Fe}_4\text{Gd}_5$ , 8 –  $\text{Al}_{86}\text{Ni}_6\text{Co}_2\text{Gd}_6$ , 9 –  $\text{Al}_{86}\text{Ni}_6\text{Co}_2\text{Gd}_3\text{Y}_2\text{Tb}_1$ .

Установленные в работе связи между величинами  $D_{\text{eff}}(T_{\text{ons}})$ ,  $N_{\text{ons}}$  и механизмом кристаллизации открывают новые возможности для количественного анализа процессов нанокристаллизации МС и разработки новых материалов с метастабильными структурами с повышенной термической устойчивостью и/или с заданной микроструктурой.

- [1] Tkatch V.I., Rassolov S.G., Nosenko V.K., et al. Estimation of diffusivity governing primary nanocrystallization and its relation to thermal stability of amorphous phases // *J. Non-Cryst. Sol.* 2012. V. 358. – P. 2727–2733.
- [2] Tkatch V.I., Nosenko V.K., Moiseeva T.N., et al. Nanocrystallization and thermal stability of the  $\text{Fe}_{45}\text{Ni}_{19.4}\text{Co}_{8.5}\text{Cr}_{5.7}\text{Mo}_{1.9}\text{B}_{14}\text{Si}_{5.5}$  amorphous alloy // *J. Non-Cryst. Sol.* 2015. V. 430. P. 108–114.
- [3] Rassolov S.G., Tkatch V.I., Selyakova N.I. Diffusion-limited growth in metallic glasses under continuous heating // *J. Appl. Phys.*, 2002. V. 92, No. 10. P. 6340 – 6342.

## Анализ кристаллизации металлических стекол в неизотермических условиях

В. И. Ткач, С. Г. Рассолов

ГУ «Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина»,  
ул. Р. Люксембург, 72, 283114, Донецк

Стеклообразное состояние вещества формируется в процессе непрерывного охлаждения расплава и, следовательно, в структурном отношении стекла представляют собой конфигурационно замороженные расплавы. В процессе нагрева стекла переходят в термодинамически неравновесное состояние переохлажденного расплава (стеклообразный переход), в котором протекают процессы зарождения и роста кристаллических фаз. Ввиду того, что склонностью к аморфизации обладают лишь расплавы, отвечающие ряду специфических требований, в металлических стеклах (МС) реализуются всего три типа реакций кристаллизации – полиморфный, эвтектический и первичный.

Интерес к исследованиям кристаллизации МС обусловлен причинами как фундаментального (закономерности процессов зарождения и роста кристаллов в условиях, далеких от равновесия), так и практического характера. К последним относится установление температурно-временных границ существования аморфных состояний (и, следовательно, сохранения комплекса физических свойств) и контроль параметров аморфно-нанокристаллических структур, формирующихся в ряде МС.

В качестве «инструмента» для анализа закономерностей перехода МС в кристаллическое состояние в большинстве исследований используются уравнения классической теории кристаллизации, разработанные для процессов, протекающих при малых отклонениях от равновесия. К ним относятся соотношения, описывающие температурные зависимости скоростей зарождения (гомогенного и гетерогенного) и роста (контролируемого диффузией на межфазной границе и в объеме) кристаллов, а также уравнение кинетики изотермической кристаллизации, полученное в работах Колмогорова, Джонсона-Мэла и Авраами (модель КДМА). Существенным ограничением для применения классических моделей является невозможность априорной оценки значений основных модельных параметров: удельной свободной энергии границы раздела зародыша и матрицы и эффективного коэффициента диффузии, контролирующего переход атомов через межфазную границу.

В докладе представлен обзор результатов теоретического анализа и экспериментальных исследований кристаллизации МС, выполненных в Донецком физико-техническом институте им. А.А. Галкина. Учитывая преимущества неизотермических методов анализа и характер изменения скоростей зарождения и роста кристаллов в температурных диапазонах кристаллизации МС ( $0,5-0,6T_m$ ) были получены приближенные аналитические

соотношения, описывающие кинетику кристаллизации стекол по механизмам зарождения и роста и роста закалочных зародышей при нагреве с постоянной скоростью,  $q$ . Полученные соотношения формально аналогичны уравнениям КДМА, в которых вместо текущего времени  $t$  используется параметр  $T^2/qQ$  ( $Q$  – энергия активации диффузии), имеющий физический смысл эффективного времени термически активируемого процесса в условиях непрерывного нагрева. С использованием полученных уравнений, значений температур кристаллизации и структурных параметров образцов, закристаллизованных при различных скоростях нагрева, разработана методика количественной оценки кинетических и термодинамических параметров, определяющих скорости зарождения и роста кристаллов. Корректность разработанной методики продемонстрирована на модельных с точки зрения кристаллизации МС  $\text{Fe}_{40}\text{Ni}_{40}\text{P}_{14}\text{B}_6$  и  $\text{Fe}_{80}\text{B}_{20}$  и апробирована на других стеклах.

Установлено, что соотношения, описывающие скорости зарождения и роста кристаллов в МС при нагреве, могут быть использованы для описания кристаллизации расплавов при быстром охлаждении (для оценки критических скоростей охлаждения, необходимых для аморфизации). Проведенный анализ показал, что аморфизация расплава  $\text{Fe}_{80}\text{B}_{20}$  определяется существенным подавлением гомогенного зарождения, в то время как в процессе кристаллизации расплава  $\text{Fe}_{40}\text{Ni}_{40}\text{P}_{14}\text{B}_6$  доминирующую роль играет гетерогенное зарождение. Параметры последнего процесса (плотность потенциальных мест зарождения и угол смачивания) для расплава  $\text{Fe}_{40}\text{Ni}_{40}\text{P}_{14}\text{B}_6$  были определены путем сопоставления расчетных кривых охлаждения с экспериментально измеренными изменениями температуры кристаллизующейся ленты на закалочном валке. На примере сплава  $\text{Fe}_{80}\text{B}_{20}$  экспериментально показано, что аморфная фаза может быть переведена в жидкое состояние, минуя процесс кристаллизации, при этом установлено, что критическая скорость нагрева, необходимая для подавления кристаллизации аморфной фазы ( $\geq 10^6$  К/с), существенно выше критической скорости охлаждения ( $6,5 \times 10^5$  К/с).

Открытие на рубеже 90-х годов явления существенного повышения физических свойств МС, обусловленного формированием нанокompозитных структур (нанокристаллов с размерами 10–30 нм и плотностью  $10^{21}$ – $10^{24}$  м<sup>-3</sup>, диспергированных в остаточной аморфной матрице), стимулировало исследования этого процесса, получившего в литературе название «нанокристаллизация». Одним из необходимых условий формирования нанофазных композитов является низкая скорость диффузионно-контролируемого роста кристаллов. Для аналитического описания процесса торможения роста в рамках задачи Хэма, рассматривающей столкновение диффузионных полей массива растущих кристаллитов, было получено приближенное соотношение, основным параметром которого является эффективный коэффициент диффузии. Анализ экспериментальных данных для ряда склонных к нанокристаллизации МС на основе Al и Fe в рамках разработанной модели позволил определить температурные зависимости

эффективных коэффициентов диффузии и установить наличие их пороговых значений, которые определяют термическую устойчивость аморфных фаз, кристаллизующихся по различным механизмам. Показано, что в условиях непрерывного нагрева диффузионно-контролируемый рост как одиночного кристалла, так и массива нанокристаллов удовлетворительно описывается аналитически с использованием эффективного времени ( $T^2/qQ$ ).

Установлено, что зарождение в МС носит, как правило, нестационарный характер, при этом в стеклах, кристаллизующихся по эвтектическому механизму, скорость зарождения возрастает вследствие формирования равновесного распределения гетерогенных флуктуаций, а в МС, склонных к нанокристаллизации, снижается, что обусловлено уменьшением термодинамической движущей силы, вызванного обогащением остаточной матрицы легирующими элементами.

Для анализа термической устойчивости нанофазных композитов предложена аналитическая модель двухстадийной кристаллизации в рамках модели КДМА, основанная на суммировании реальных превращенных объемов. Установлено, что наибольшей термической устойчивостью обладают нанокompозитные структуры, распад которых происходит по механизму зарождения и роста кристаллов интерметаллических соединений.

Корректное описание основных аспектов процессов формирования кристаллических фаз в МС (кинетики кристаллизации и динамики изменения структурных параметров) в рамках разработанных аналитических подходов свидетельствует о возможности применения модифицированных уравнений классической теории кристаллизации в области температур, далеких от равновесия.

Практическая ценность результатов фундаментальных исследований процессов кристаллизации МС подтверждена результатами экспериментов по получению высокопрочных (с твердостью 5,5 ГПа) объемных образцов с нанокompозитной структурой из аморфных лент сплавов на основе Al, консолидация которых в процессе интенсивной пластической деформации методом винтовой экструзии происходит одновременно с формированием нанокристаллов Al. По результатам анализа температурной зависимости скорости зарождения нанокристаллов Al в МС  $Al_{87}Ni_8Y_5$  был предложен режим предварительной термической обработки, реализация которого позволила примерно в два раза увеличить объемную плотность нанокристаллов, что привело к повышению твердости образцов с нанокompозитной структурой на 15%. Обсужден ряд дополнительных путей повышения термической устойчивости и физических свойств металлических сплавов с аморфной и нанокompозитной структурой путем контролируемых изменений скоростей зарождения и роста кристаллов.

### Новая аддитивная технология газофазного осаждения тугоплавких металлов

С. Ю. Трещёв<sup>1</sup>, О. Ю. Гончаров<sup>1</sup>, Р. Р. Файзуллин<sup>1</sup>, А. А. Шаков<sup>1</sup>,  
В. И. Ладьянов<sup>1</sup>, В. Н. Гуськов<sup>2</sup>, Л. Х. Балдаев<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Физико-технический институт УрО Российской Академии Наук, 426000 Россия, Удмуртская Республика, Ижевск, ул. Кирова 132

<sup>2</sup>Институт общей и неорганической химии Российской Академии Наук, 119991 Россия, Москва, Ленинский проспект 31

<sup>3</sup>ООО «Технологические системы защитных покрытий», 142172 Россия, Московская область, г. Щербинка, Симферопольское шоссе 19

Физическое газофазное осаждение и химическое газофазное осаждение (ХГО) являются базовыми современными методами, применяемыми при разработке аддитивных технологий. Указанные методы позволяют создавать на поверхности деталей не требующие дальнейшей обработки многослойные покрытия заданных составов и толщин.

Для нанесения покрытий, содержащих тугоплавкие металлы Та, Мо, Nb и их соединений нами разработана новая методика ХГО, которая имеет ряд преимуществ перед другими методами [1]. В качестве особенностей методики следует отметить относительно низкие температуры осаждения покрытий, а также исключение водорода, кислорода и других «паразитных» примесей из процесса осаждения.

В рамках проекта RFMEFI 58214X0005 при финансовой поддержке Минобрнауки (Федеральная целевая программа) нами также разработаны и созданы три установки для нанесения покрытий из тугоплавких металлов и их соединений методом ХГО на плоские образцы, образцы сложной формы и трубчатые образцы. Эти установки позволяют проводить натурные эксперименты и решать, как научные, так и технологические задачи для использования в промышленности.

На сегодняшний день проведены работы по нанесению танталовых покрытий на плоские образцы железа, меди и стали. Уже получены образцы танталовых покрытий, ведутся дальнейшие исследования по подбору параметров: температур, давлений, скоростей потока газов для получения наиболее качественных покрытий.

[1] Гончаров О.Ю., Файзуллин Р.Р., Гуськов В.Н., Балдаев Л.Х. Термодинамический анализ химического газофазного осаждения Та восстановлением галогенидов тантала кадмием и цинком // Неорганические материалы, 2015, **51**, № 6, 655.

## Формирование метастабильных фаз в системах на основе железа методом высокоскоростного лазерного плавления

Е. В. Харанжевский<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Удмуртский государственный университет, 426034 Россия, г. Ижевск, ул. Университетская, 1

Метод высокоскоростного лазерного плавления (ВЛП) высокодисперсных металлических порошков, основан на сверхбыстром лазерном нагреве локального участка порошкового слоя и последующем скоростном отводе тепла вглубь образца, при этом время одного цикла «нагрев–охлаждение» составляет порядка  $10^{-5}$  с [1, 2]. На стадии охлаждения после действия лазерного импульса происходит неравновесное высокоскоростное затвердевание расплавленной части порошка с формированием метастабильного структурного состояния [3]. В докладе обобщены результаты исследований структурно-фазового состояния компактов и покрытий систем Fe-Cu, Fe-WC, Fe-C, Fe-Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub>.

Исследована структура компактов, полученных ВЛП высокодисперсных порошков Fe-50 мас. % Cu. Исходный порошок получали механическим размолотом порошков железа и меди в планетарной мельнице. Установлено, что в результате ВЛП структура компактов содержит признаки начальных этапов расслоения переохлажденной жидкости. Методами рентгеноструктурного анализа, сканирующей и просвечивающей электронной микроскопии показано, что в результирующей структуре присутствует пересыщенный твердый раствор (Fe;Cu), образовавшийся в результате высокоскоростного движения фронта затвердевания и неравновесного захвата меди движущимся фронтом.

Методом ВЛП ультрадисперсного порошка карбида вольфрама, размещенного на поверхности стали 20, образованы карбидовольфрамовые покрытия, имеющие высокий уровень адгезии к подложке за счет формирования градиентного слоя «Fe - Fe<sub>3</sub>W<sub>2</sub>C - W<sub>2</sub>C - WC». С помощью специально подобранных режимов лазерной обработки были получены практически беспористые покрытия, имеющие зеркальный блеск. Высокие температуры и химическое взаимодействие с подложкой в зоне лазерной обработки короткими импульсами объясняют формирование градиентного состава и высокую адгезионную прочность покрытия. Метод позволяет формировать покрытия с высокой плотностью и твердостью до 21 ГПа. Указанные покрытия имеют перспективу применения в качестве катодных материалов, защитных и антикоррозионных слоев [4].

Описаны изменения структуры, химического и фазового состава поверхности низкоуглеродистой стали, подвергнутой насыщению графитом за счет высокоскоростной лазерной обработки короткими импульсами. Методами ПЭМ, СЭМ, РФЭС и рентгеновской дифракции показано, что особенности микроструктуры поверхности, сформированной в условиях высокоскоростной

кристаллизации и воздействием на расплав лазерно-индуцированной плазмы графита, связаны с высоким содержанием углерода (до 20 мас. %). Получено объяснение уменьшения контактного электрического сопротивления обработанных поверхностей, а также коэффициента трения при динамических нагрузках [5].

С помощью лазерной короткоимпульсной обработки ультрадисперсного порошка оксида хрома (+3), нанесенного на поверхность стали 20, получены наноразмерные поверхностные слои, содержащие диспергированные в альфа- и гамма- железе оксиды хрома и железа, а также смешанные оксиды со структурой шпинели  $\text{FeO}\cdot\text{Cr}_2\text{O}_3$ . Обнаруживается и восстановленный металлический хром. Методом снятия анодных потенциодинамических кривых в нейтральных и слабощелочных боратных буферных растворах показано, что сформированные поверхностные слои способствуют повышению коррозионной стойкости стали вследствие перехода поверхности в пассивное состояние [6].

- [1] Харанжевский Е.В., Кривилев М.Д. Лазерное спекание нанокompозитов Fe–Ni // ФММ. 2011. Т. 111. № 1. С. 54–63.
- [2] М. Д. Кривилев, Е. В. Харанжевский, В. Г. Лебедев, Д. А. Данилов, Е. В. Данилова, П. К. Галенко Синтез композитных покрытий при высокоскоростном лазерном спекании металлических порошковых смесей // Физика металлов и металловедение, 2013, том 114, № 10, с. 871–893.
- [3] Херлах Д., Галенко П., Холланд-Мориц Д. Метастабильные материалы из переохлажденных расплавов. М., Ижевск: РХД, 2010. 481 с. (Перевод с англ.: Herlach D., Galenko P., Holland%Moritz D. Metastable solids from undercooled melts. Amsterdam: Elsevier, 2007. 432 p.)
- [4] E. Kharanzhevskiy and A. Ipatov and I. Nikolaeva and R. Zakirova. Short-Pulse Laser Sintering of Multilayer Hard Metal Coatings: Structure and Wear Behavior. *Lasers in Manufacturing and Materials Processing*. 2015. Vol. 2. P. 91-102
- [5] Харанжевский Е.В., Решетников С.М., Гильмутдинов Ф.З., Писарева Т.А. «Коррозионно-электрохимическое поведение наноразмерных графитных слоев, нанесенных на поверхность нелегированной стали импульсным лазерным облучением» // Физикохимия поверхности и защита материалов. 2015. том 51, № 5, с. 495–502
- [6] Evgeny Kharanzhevskiy, Sergey Reshetnikov. Chromium oxide dissolution in steels via short pulse laser processing // *Appl. Phys. A*. (2014) Vol. 115. P. 1469–1477.

## Оглавление

От редакции.....	3
Виталий Анатольевич Журавлев: преподаватель, ученый, ректор .....	4
<b>Секция I: Теория двухфазной зоны, компьютерное моделирование процессов затвердевания .....</b>	<b>9</b>
Александров Д. В., Галенко П. К. Аналитическое решение задачи об обтекании параболического дендрита наклонным потоком вязкой жидкости в приближении Осена .....	10
Александров Д. В., Малыгин А. П., Сухачев И. С., Александрова И. В. Нуклеация и рост новой фазы на промежуточной стадии фазовых переходов в метастабильных растворах и расплавах.....	11
Бухбиндер Г. Л., Галенко П. К. Граничные условия и тепловое сопротивление на межфазной поверхности затвердевающей жидкости .....	13
Голод В. М., Емельянов К. И. Дендритная структура: эмпирика, эволюция, системный анализ .....	14
Данилов Д. А., Галенко П. К. Моделирование роста дендритных и эвтектических структур при кристаллизации переохлажденных расплавов .....	17
Казак О. В., Галенко П. К., Александров Д. В. Численное моделирование процесса дендритного роста с учетом конвекции .....	18
Недопёкин Ф. В., Петренко В. И., Дмитрук М. Ю. Применение метода БТА для расчёта температурного интервала тепловой обработки материалов .....	19
Рыльцев Р. Е., Щелкачев Н. М., Клумов Б. А. Конкуренция атомных масштабов как механизм стеклования и квазикристаллизации .....	22
Рыльцев Р. Е., Клумов Б. А., Щелкачев Н. М., Шуняев К. Ю. Зависимость структуры объемноаморфного сплава $Cu_{64}Zr_{36}$ от скорости охлаждения: молекулярно-динамическое моделирование .....	23
Титова Е. А., Александров Д. В., Галенко П. К. О времени нестационарности роста первичных дендритов .....	24
Шутов И. В., Склямина А. В., Мосин А. И., Кривилев М. Д. Кристаллизация дендритов металлов из пересыщенных растворов их солей путем электролиза .....	25
<b>Секция II: Системы автоматического проектирования технологий литья .....</b>	<b>27</b>
Галлямов С. Р., Трефилов С. А., Петров А. С. Разработка измерителя теплофизических свойств материалов литейных форм на основе метода периодического нагрева .....	28



Кропотин В. В., Прокошев А. С. LVMFlowCV – профессиональная система компьютерного моделирования литейных технологий .....	29
Романов Л. И. Вычисление термодинамических параметров для расчета микроструктуры сплавов в пакете LVMFlow .....	30
Фролов М. М. Применение CAD/CAM/CAE технологий в производстве.....	31
<b>Секция III: Металлургические и литейные технологии.....</b>	<b>33</b>
Белоусов В. В., Бодряга В. В., Бондаренко В. И., Недопекин Ф. В., Павлов Я. В. Математическое моделирование процессов обработки стали порошковой проволокой с силикокальцием на агрегате ковш-печь (АКП) .....	34
Боровых М. А., Чикова О. А., Цепелев В. С., Вьюхин В. В. О влиянии режима термообработки на удельное электросопротивление стали 35ХГФ при 1300-1720°С.....	36
Виноградов В. В., Шакуров А. Г., Есенбеков В. С. Компьютерное моделирование работы установки по переработке шлака в товарную продукцию.....	39
Воробьев В. Л., Гильмутдинов Ф. З., Быков П. В., Баянкин В. Я. Формирование состава наноразмерных поверхностных слоёв медно-никелевого сплава имплантацией ионов $O^+$ и $Ag^+$ .....	41
Дементьев В. Б., Овчаренко П. Г. Формирование поверхностных легированных слоев самораспространяющимся высокотемпературным синтезом на отливках из железоуглеродистых сплавов.....	43
Зинченко С. А. Разработка комплексного базового регламента оценки качества макроструктуры непрерывно-литой заготовки (НЛЗ) производства ОАО «Ижсталь» .....	44
Зинченко С. А. Особенности кристаллизации аустенитно-ферритной стали Св-08Х20Н9Г7Т после лазерного оплавления .....	47
Казак О. В. Моделирование электровихревых течений в дуговой печи постоянного тока с охлаждаемым подовым электродом .....	49
Камаева Л. В., Стерхова И. В., Ладьянов В. И. Влияние температуры расплава на процессы кристаллизации в перитектических системах .....	51
Коновалов М. С., Сапожников Г. В. Исследование микроструктуры образцов литейного сплава на основе $Ni_3Al$ , кристаллизованных различными методами .....	52
Ладьянов В. И., Камаева Л. В., Бельтюков А. Л., Стерхова И. В. О влиянии жидкой фазы на процессы затвердевания металлических расплавов .....	54
Ладьянов В. И., Дорофеев Г. А., Кузьминых Е. В., Лубнин А. Н. Аллюминобаротермический синтез высокоазотистой стали .....	55

Недопекин Ф. В., Толстых В. К., Володин Н. А., Бодряга В. Е. Применение методов оптимизации для решения задач затвердевания слитков при непрерывной разливке металла.....	56
Овчаренко П. Г., Чекмышев К. Э. Влияние тепловых потоков на формирование контактной зоны между установочными элементами и заливаемым расплавом при изготовлении композиционных отливок.....	58
Олянина Н. В., Бельтюков А. Л., Ладьянов В. И. Вязкость расплавов аморфизирующей системы Co-V.....	59
Олянина Н. В., Бельтюков А. Л., Ладьянов В. И. Температурные зависимости вязкости расплавов Co-Si.....	61
Панов А. Г., Гуртовой Д. А., Закиров Э. С, Шамбазов Р. Г. Опыт нейтрализации структурной наследственности чугунных отливок обработкой расплавов барий-стронциевыми карбонатами.....	63
Печина Е. А., Данилова Е. С., Иванов С. М., Кузьминых Е. В., Дорофеев Г. А., Ладьянов В. И. Эволюция структуры и свойств полученных литьем сплавов Cu-Zn в процессе интенсивной пластической деформации.....	65
Сапегина И. В., Мокрушина М. И., Пушкарев Б. Е., Карев В. А., Терешкина С. А., Дорофеев Г. А. Структура высокоазотистого сплава, полученного алюминотермическим методом.....	67
Стерхова И. В., Камаева Л. В., Ладьянов В. И. Концентрационные зависимости кинематической вязкости расплавов $Fe_{75-x}Cr_{15}C_x$ ( $x=10-15$ ). .....	68
Черепанов А. Н., Манолов В. К. Наномодифицирование в литейном производстве.....	70
<b>Секция IV: Метод фазового поля и расчет микроструктур.....</b>	<b>73</b>
Анкудинов В. Е., Галенко П. К., Кропотин Н. В. Трёхмерная структурная диаграмма железа в модели кристаллического фазового поля.....	74
Васин М. Г., Меньшикова С. Г., Ившин М. Д. Теоретическое описание немонотонных релаксационных процессов в расплавах Al-Y.....	75
Вахрушев А. В., Федотов А. Ю., Северюхин А. В., Валеев Р. Г. Моделирование процессов эпитаксиального зарождения подложек из пористого оксида алюминия.....	77
Галимзянов Б. Н., Мокшин А. В. Динамические характеристики конденсированных систем вблизи температуры стеклования.....	80
Голод В. М., Емельянов К. И. Дендритная структура: эмпирика, эволюция, системный анализ.....	81
Дроздов А. Ю., Созонова Н. М., Баянкин В. Я. Моделирование интенсивного ударного воздействия на аморфный сплав $Fe_{80}P_{20}$ . .....	84

**Всероссийская конференция с международным участием**

Кондратьев Н. С., Трусков П. В., Останина Т. В. Модель формирования мелкозернистой структуры в процессе непрерывной динамической рекристаллизации .....	85
Лебедев В. Г., Новокрещенова А. А., Галенко П. К. Предел резкой границы для фазово-полевой модели затвердевания концентрированных растворов .....	86
Лебедев В. Г., Лебедева А. А., Новокрещенова А. А. Об описании процесса направленного затвердевания в рамках неизотермической модели фазового поля.....	88
Лебедев В. Г., Галенко П. К. Фазово-полевая модель перераспределения примеси на границе фаз.....	90
Мокрова С. М., Петров Р. П., Милич В. Н. Использование представления текстурных компонент в пространстве Родрига для их визуализации и количественного анализа.....	93
Мокшин А. В. Кинетические и термодинамические характеристики фазовых переходов первого рода на основе моделирования молекулярной динамики .....	96
Низовцева И. Г., Галенко П. К., Александров Д. В., Вихерев С. В., Титова Е. А., Сухачев И. С. Бегущие волны в профиле фазового поля: точные аналитические решения гиперболического уравнения Аллена-Кана .....	97
Обухов А. А., Лебедев В. Г., Новикова Т. А. Математическое моделирование трехмерного роста дендрита Mg-6%Al в неизотермических условиях .....	99
Стародумов И. О., Павлюк Е. В., Абрамов С. М., Ключев Л. В., Александров Д. В., Галенко П. К. Эффективность алгоритма решения уравнения PFC с использованием библиотеки PetIGA.....	101
Хуснутдинов Р. М. Коллективная динамика атомов в расплаве меди.....	103
<b>Секция V: Высокоскоростное затвердевание и аддитивные технологии....</b>	<b>105</b>
Башкова И. О., Харанжевский Е. В. Метод высокоскоростного лазерного синтеза защитных покрытий на поверхности циркониевого сплава на основе циркония Э110 .....	106
Быков П. В., Тарасенков А. Н., Воробьев В. Л., Баянкин В. Я. Формирование состава поверхностных слоев прокатанных титановых фольг, с напыленным слоем алюминия, методом ионно-лучевого перемешивания .....	107
Волков В. А. Сравнение закономерностей фазообразования в сплавах на основе систем Fe-V и Fe-C в процессах закалки расплава и механосплавления.....	108

**Всероссийская конференция с международным участием**

Галенко П. К. Неравновесные эффекты при высокоскоростном затвердевании металлов и сплавов .....	109
Гордеев Г. А. Численная модель процесса селективного лазерного плавления порошков металлов и сплавов.....	110
Гусакова О. В., Галенко П. К., Шепелевич В. Г., Александров Д. В. Влияние скорости охлаждения на микроструктуру эвтектического сплава Al-Si.....	112
Гусакова О. В., Галенко П. К., Шепелевич В. Г., Александров Д. В. Формирование микроструктуры быстрозатвердевших сплавов системы Sn – Bi.....	115
Гусакова О. В., Шепелевич В. Г. Влияние скорости охлаждения расплава на микроструктуру сплавов систем Sn – Zn – Bi и Sn – Zn – In .....	117
Кондрашов Е. Н., Ледер М. О., Корнилова М. А., Горина А. В. Переход от столбчатого затвердевания к равноосному в титановых сплавах VT3-1 и Ti-10V-2Fe-3Al.....	120
Кондрашов Е. Н., Ледер М. О., Горина А. В., Корнилова М. А. Определение параметров модели ВДП для титановых сплавов Ti-3Fe, Ti-5Cr, VT3-1, Ti-6Al-4V и Ti-10V-2Fe-3Al .....	121
Кривилев М. Д. Метод двухмасштабного моделирования селективного лазерного сплавления композитных металлических порошков при импульсной обработке.....	122
Куликова Т. В., Рыльцева А. А., Быков В. А., Эстемирова С. Х., Ягодин Д. А., Шуняев К. Ю. Особенности мартенситных превращений и кристаллизации в аморфизирующихся сплавах Cu <sub>50</sub> Zr <sub>50</sub> и Cu <sub>46</sub> Zr <sub>46</sub> Al <sub>8</sub> .....	124
Маркова И. С., Харанжевский Е. В. Получение и аттестация керамических покрытий на основе WC и ZrO <sub>2</sub> методом высокоскоростного лазерного плавления. ....	125
Медянкин А. Н., Галенко П. К. Анализ эвтектического роста из переохлажденных бинарных расплавов Cu-Zr .....	126
Новоселов А. А., Баянкин В. Я. Формирование состава поверхностных слоев фольги Ni-Cu методом ионной имплантации.....	127
Писарева Т. А., Харанжевский Е. В. Лазерный синтез полиимидных пленок для создания углеродных наноструктурных материалов электродов электрохимических конденсаторов.....	129
Попович А. А., Суфияров В. Ш., Борисов Е. В., Полозов И. А. Исследование влияния параметров изготовления на структуру и свойства образцов из никелевого сплава, полученных методом селективного лазерного плавления ..	130
Рассолов С. Г., Максимов В. В., Моисеева Т. Н., Лимановский А. И., Хачатурова Т. А., Ткач В. И. Оценка температурно-временной зависимости	

скорости зарождения, контролирующей формирование нанокompозитной структуры в аморфных сплавах на основе алюминия .....	131
Суслов А. А., Ладьянов В. И. О влиянии расплава на локальное упорядочение аморфного сплава $Fe_{82}V_{18}$ .....	133
Ткач В. И., Рассолов С. Г., Васильев С. В., Коваленко О. В., Свиридова Е. А. Связь термической устойчивости металлических стекол с эффективными коэффициентами диффузии, контролирующими процесс кристаллизации .....	134
Ткач В. И., Рассолов С. Г. Анализ кристаллизации металлических стекол в неизотермических условиях .....	137
Трещёв С. Ю., Гончаров О. Ю., Файзуллин Р. Р., Шаков А. А., Ладьянов В. И., Гуськов В. Н., Балдаев Л. Х. Новая аддитивная технология газофазного осаждения тугоплавких металлов .....	140
Харанжевский Е. В. Формирование метастабильных фаз в системах на основе железа методом высокоскоростного лазерного плавления .....	141
Оглавление .....	143



Научное издание

**Кристаллизация:  
компьютерные модели, эксперимент,  
технологии**

Тезисы

VII Всероссийской конференции с международным участием  
6–9 апреля 2016 года, г. Ижевск

*Авторская редакция*

Издательский центр «Удмуртский университет»  
426034, г. Ижевск, ул. Университетская, 1, корп. 4, каб. 207  
Тел. факс: +7 (3412) 50-02-95, E-mail: [editorial@udsu.ru](mailto:editorial@udsu.ru)