

МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУРЫ МЕТАЛЛОВ, ЗАКАЛЕННЫХ ИЗ ЖИДКОГО СОСТОЯНИЯ

В работе представлена усовершенствованная математическая модель неизотермического сверхбыстрого затвердевания металлов. Модель позволяет получать распределение кристаллов по размерам, и таким образом прогнозировать структуру быстро охлажденного металлического образца в зависимости от его размеров и скорости охлаждения.

В роботі представлена вдосконалена математична модель неизотермічного надшвидкого затвердіння металів. Модель дозволяє одержувати розподіл кристалів за розмірами, і таким чином прогнозувати структуру швидко охолодженого металевого зразка залежно від його розмірів і швидкості охолодження.

In work the improved mathematical model of unisothermal rapid solidification of metals is presented. A model allows to get distributing of crystals on sizes, and thus forecast the structure of the quickly chilled metallic specimen depending on his sizes and rate of cooling.

Структура металлов и сплавов во многом определяет их механические свойства (прочность, пластичность и т.д.) и антикоррозионные свойства. Различные методы закалки из жидкого состояния позволяют получать сплавы в некристаллическом (аморфном) состоянии или сплавы с мелкокристаллической структурой. Сплавы с такой структурой обладают повышенными механическими и антикоррозионными свойствами. Моделирование процесса ЗЖС позволяет рассчитывать критические скорости охлаждения расплава, при которых возможно некристаллическое затвердевание. К настоящему времени разработано достаточно много методов математического моделирования, решающих эту задачу [1 - 3]. Однако, в данных работах не учитывается возможность частичной либо полной кристаллизации расплава. В этом случае необходимо учитывать процессы столкновения и частичной блокировки растущих кристаллов. Эта задача была решена в работе [4]. Представленный в работе [4] алгоритм моделирования позволил в частности рассчитать критическую скорость охлаждения чистого никеля – 10^{10} К/с, хорошо согласующуюся с известными экспериментальными данными [5]. Тем не менее, вопрос о модельном прогнозировании структуры быстро охлажденных сплавов в случае их полной кристаллизации остается нерешенным.

В данной работе была поставлена задача: разработать алгоритм прогнозирования структуры закаленных из жидкого состояния металлов, используя модель процесса сверхбыстрого затвердевания, основанную на неизотермическом уравнении кристаллизации. Провести модельные исследования влияния режима охлаждения на структуру образца в случае его полной или частичной кристаллизации. Определить режимы охлаждения, обеспечивающие получение металлов с наиболее однородной мелкокристаллической структурой.

В развитие ранее разработанной модели [4] в данной статье предлагается алгоритм прогнозирования структуры сплавов в случае их полной или частичной кристаллизации при охлаждении со скоростями ниже критической. Этот алгоритм позволяет получить распределение кристаллических зерен по размерам, что дает

возможность рассчитать средний и наиболее вероятный размер кристаллов, а также размер кристаллов, на которые приходится наибольшая доля объема закристаллизованного расплава.

Моделирование процесса сверхбыстрого затвердевания расплава в раннее представленной работе [4] осуществлялось при помощи кинетического уравнения

$$x(t) = \frac{4}{3} \pi \int_0^t I(t')(1-x(t')) \left[R_K(t') + \int_{t'}^t u(\tau)(1-x(\tau))d\tau \right]^3 dt'. \quad (1)$$

Оно преобразовывалось в систему дифференциальных уравнений

$$dx(t) = (1-x(t)) \left(S_{y\partial}(t)u(t) + I(t) \frac{4}{3} \pi R_K^3(t) \right) dt \quad (2)$$

$$dS_{y\partial}(t) = I(t)(1-x(t))4\pi R_K^2(t)dt + 8\pi u(t)(1-x(t))A(t)dt \quad (3)$$

$$dA(t) = I(t)(1-x(t))R_K(t)dt + u(t)B(t)(1-x(t))dt \quad (4)$$

$$dB(t) = I(t)(1-x(t))dt. \quad (5)$$

Здесь $x(t)$ – доля закристаллизовавшегося объема в момент времени t . $S_{y\partial}$, A , B – суммы соответственно площадей поверхности, радиусов и числа растущих кристаллов, приходящиеся на единицу объема, $R_K(t')$ – радиус гомогенно образовавшегося в расплаве критического зародыша, $I(t')$ – скорость гомогенного зарождения, u – скорость роста кристаллов. dx , $dS_{y\partial}$, dA , dB – это приращения этих параметров за малый промежуток времени dt (на одном временном шаге моделирования процесса затвердевания)

Распределение кристаллов по размерам в данной работе получали следующим методом. Вначале все возможные размеры будущих кристаллов разбиваются на группы. Интервал размеров кристаллов в каждой группе задается с помощью параметра d_R , который вычисляется по формуле

$$d_R = mnog \cdot \sqrt[3]{V}. \quad (6)$$

V – это объем пленки расплава, $mnog$ – это некоторый множитель порядка $10^{-6} - 10^{-4}$, с помощью которого корректируется значение d_R . Наилучшее значение $mnog$ для каждой толщины пленки подбирается экспериментально. На каждом временном шаге образуются новые зародыши. Все образовавшиеся на данном временном шаге зародыши критического размера попадают в одну размерную группу, номер которой определяется как отношение радиуса критического зародыша R_K к интервалу разбиения по размерам d_R . Кроме того, на каждом временном шаге производится расчет увеличения с накоплением размеров всех уже имеющихся кристаллов на величину $u(t)(1-x(t))dt$. Если на каком то очередном шаге по времени накопившееся увеличение размеров кристаллов становится больше d_R , значит возможен переход кристаллов каждой размерной группы в

соседнюю, соответствующую большим размерам кристаллов. Возможно, что при интенсивном росте на одном временном шаге увеличение размеров кристаллов будет больше либо равно $2 d_R$ или $3 d_R$ или $5 d_R$ и т.д. Тогда происходит переход числа кристаллов из каждой группы не в соседнюю группу, а через несколько номеров групп.

На рисунке 1, в качестве примера, представлены результаты расчета для охлажденной из жидкого состояния со скоростью $8 \cdot 10^9$ градусов в секунду пленки никеля толщиной 0,1 мкм и площадью 1 см^2 . Дано распределение числа образовавшихся кристаллов по размерам. Максимум распределения соответствует 11 нм. Средний радиус кристаллов при этой скорости охлаждения равен 14 нм. На рисунке 2 дано распределение объема закристаллизовавшейся пленки по размерам кристаллов. Наибольший объем приходится на кристаллы близкие по размерам к 20 нм. На рисунке 3 даны результаты расчетов (наиболее вероятный размер, средний размер и размер кристаллов занимающих большую часть объема) в более широком интервале скоростей охлаждения для быстроохлажденной пленки никеля того же размера. По мере увеличения скорости охлаждения средний радиус кристаллов практически линейно уменьшается. Наиболее вероятный размер кристаллов и размер кристаллов на которые приходится большая часть закристаллизовавшегося объема также уменьшаются по мере роста скорости охлаждения с примерно такой же скоростью. При скоростях охлаждения близких к критической средний и наиболее вероятный размеры кристаллов принадлежат нанодиапазону.

Изменение характера этих зависимостей наблюдается при скоростях охлаждения больших $9 \cdot 10^9$ град/сек, что вызвано изменением характера процесса затвердевания. На рисунке 4 дана зависимость доли закристаллизованного объема от скорости охлаждения. При скоростях охлаждения больших $9 \cdot 10^9$ град/сек не весь объем расплава кристаллизуется, т.е. наблюдается переход от кристаллического к аморфному затвердеванию. Соответственно, меняется и температурный режим затвердевания.

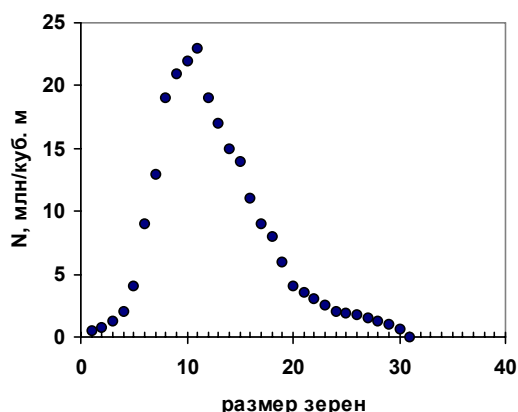


Рис. 1. Зависимость числа кристаллов в единице объема образца от размера кристаллов
Цена деления -1,15 нм

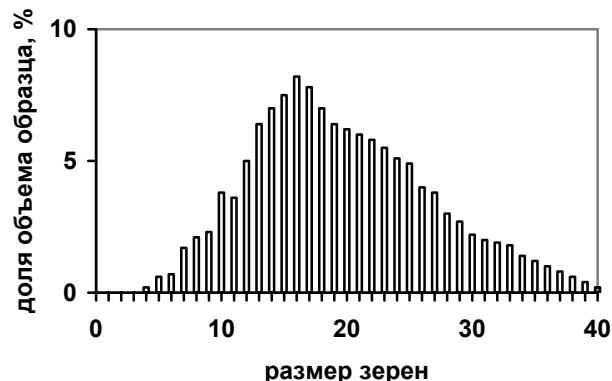


Рис. 2. Зависимость доли закристаллизованного объема от размера кристаллов
Цена деления -1,15 нм

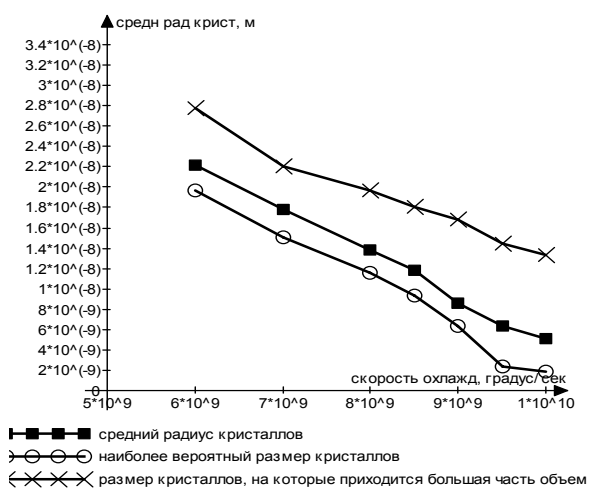


Рис. 3. Зависимость среднего, наиболее вероятного размеров кристаллов и размера кристаллов, занимающих наибольший объем образца от скорости охлаждения.

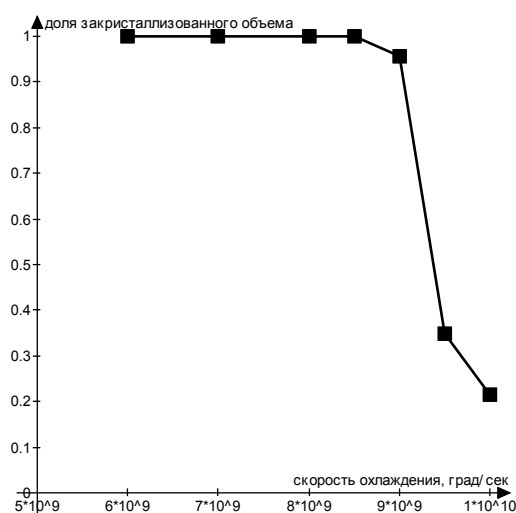


Рис. 4. Зависимость доли закристаллизованного объема образца от скорости охлаждения.

При скоростях охлаждения меньших $8 \cdot 10^9$ град/сек на расчетных кривых охлаждения есть участки глубокого переохлаждения ниже равновесной температуры кристаллизации и участки рекалесценции – подъёма температуры почти до равновесной при начале интенсивной кристаллизации (рис. 5). При скорости охлаждения выше критической ($> 9 \cdot 10^9$ град/сек) процесс затвердевания сопровождается постоянным уменьшением температуры. В узком интервале скоростей охлаждения $8,5 - 9 \cdot 10^9$ град/сек расплав затвердевает практически изотермически при переохлаждении ниже температуры плавления около 800 градусов.

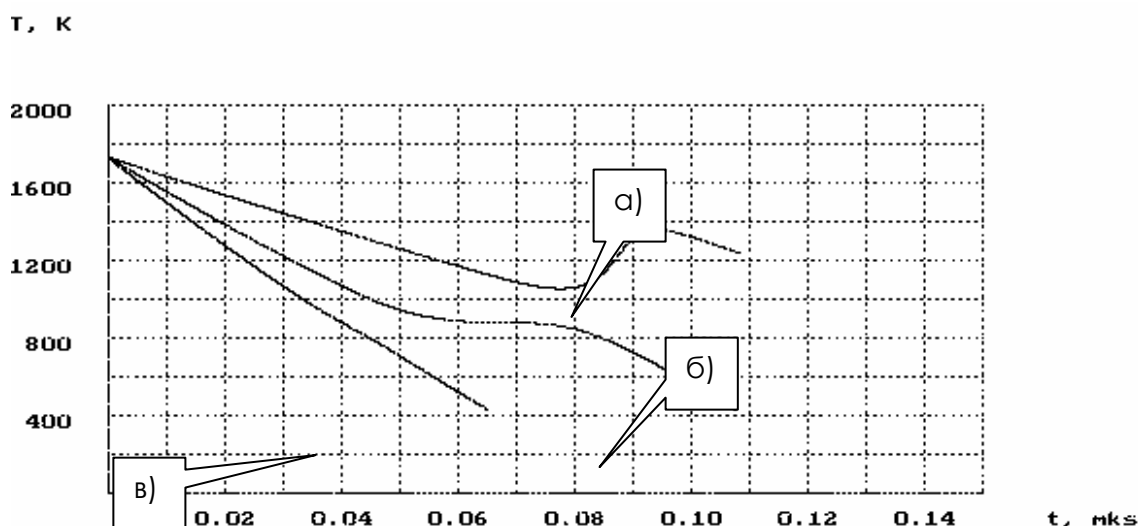


Рис. 5. Зависимость температуры металла от времени для трех скоростей охлаждения: а) $5 \cdot 10^9$ град/с; б) $9 \cdot 10^9$ град/с; в) $12 \cdot 10^9$ град/с.

Дисперсия размеров кристаллов при увеличении скорости охлаждения также уменьшается. (рис. 6). Таким образом, при скорости охлаждения близкой к критической $8 - 9 \cdot 10^9$ град/сек можно получить полностью закристаллизовавшийся материал достаточно однородный по размерам зерен. Средний размер зерен при этом будет соответствовать нанодиапазону.

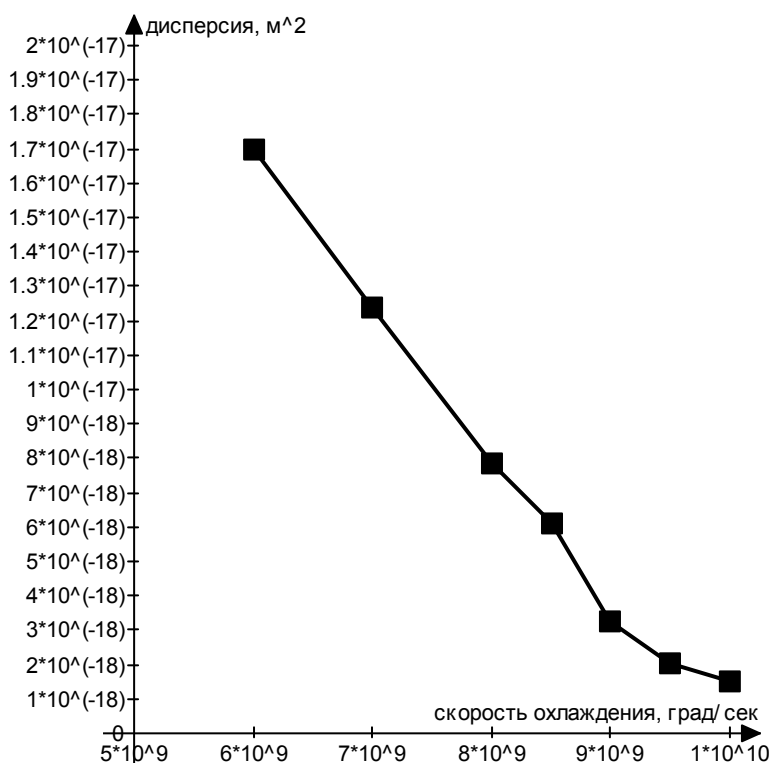


Рис. 6. Зависимость дисперсии размеров кристаллов от скорости охлаждения образца

В работе был разработан новый алгоритм моделирования процесса сверхбыстрого охлаждения металлов, включающий в себя расчет распределения кристаллов в образце по размерам. Проведенные модельные исследования позволили определить влияние режима охлаждения при закалке из жидкого состояния на распределение кристаллов по размерам в случае, если процесс аморфизации металла не реализуется. Анализ полученных распределений позволил определить такие важные структурные характеристики металла как средний и наиболее вероятный размер кристаллов, а также размер кристаллов, на которые приходится наибольший объем металла. Показано, что при сверхбыстром затвердевании металлов можно подобрать такую скорость охлаждения близкую к критической, при которой структура образца получается наиболее однородной по размерам кристаллов, а средний размер кристаллов составляет около десяти нанометров. Разработанный алгоритм целесообразно адаптировать для многокомпонентных систем для прогнозирования структуры сплавов, закаленных из жидкого состояния.

Список литературы

1. Набережных В.П., Селяков Б.И., Ткач В.И. Кинетика кристаллизации в тонких слоях жидких и аморфных металлов. – Донецк: 1988. – 34 с. (Препр. /АН Украины. ДонФТИ; 88-24).
2. Lisov V.I., Tsaregradskaya T.L., Turkov O.V., Kharkov V.E. The crystallisation kinetics of amorphous alloys of Fe-B system//Metallofiz. Noveishie Teknol.- 1999.- V.21, № 12.- P. 34-37.
3. Betz G. Computer modeling of initial stages of thin film formation// Proc. “Evolution of Surface Morphology and Thin-Film Microstructure”.- 1997.-P.134.
4. Лысенко А.Б., Якунин Е.А. Вывод неизотермического кинетического уравнения кристаллизации //Сборник научных трудов национального горного университета. – 2004. -№20. – С. 143 – 147.
5. Davies H.A., Hull J.B. The formation, structure and crystallization of non-crystalline nickel produced by splat-quenching //Journal of Materials science.-1976.-№11.-P. 215-223.

*Рекомендовано до публікації Ширінім Л.Н.
Надійшла до редакції 20.06.11*

УДК 622.625.28

© С.Е. Блохин

ПУТИ ПОВЫШЕНИЯ ТОРМОЗНЫХ ВОЗМОЖНОСТЕЙ ШАХТНЫХ ЛОКОМОТИВОВ

Определено, что наиболее перспективным типом шахтных локомотивов для угольных шахт Украины есть тяжелые шарнирно-сочлененные. Такие локомотивы должны иметь многократное резервирование тормозных устройств, создающих тормозную силу как в контакте колеса и рельса, так и рельсовыми тормозами. Актуальными становятся автоматические системы, отслеживающие максимально возможный коэффициент сцепления колеса и рельса в данных условиях движения и предотвращающие появление юза.

Визначено, що найперспективнішим типом шахтних локомотивів для вугільних шахт України є важкі шарнірно-зчленовані. Такі локомотиви повинні мати багаторазове резервування гальмівних пристроїв, що створюють гальмівну силу як в контакті колеса і рейки, так і рейковими гальмами. Актуальними стають автоматичні системи, що відстежують максимально можливий коефіцієнт зчеплення колеса і рейки в даних умовах руху, і запобігають появі юза.

It is certain, that the heavy joint-joined are the most perspective type of mine locomotives for the coal mines of Ukraine. Such locomotives must have frequent reservation of brake devices, creating brake force both in the contact of wheel and rail, and by rail brakes. The automatic systems watching a maximally possible coefficient of rolling friction wheel and rail in the given terms of motion and preventing appearance of braking skidding is actual.

Вступление. Рельсовый локомотивный транспорт является основным средством транспортирования горной массы, оборудования, людей и материалов по горизонтальным выработкам горных предприятий. Но надежность тормозных систем шахтных локомотивов не позволяет увеличивать его производительность при безопасной эксплуатации, особенно при подземной добыче угля, главного энергоносителя Украины.

Повышение производительности внутришахтного рельсового транспорта возможно при увеличении массы и скорости движения поездов и зависит от применяемых на локомотиве тормозных устройств. Поскольку на шахтных вагонетках тормоза отсутствуют, то реализуемая локомотивом тормозная сила при торможе-