

ТЕОРЕТИЧЕН МОДЕЛ НА СТРУКТУРООБРАЗУВАНЕ ПРИ ЛЕЕНЕ

THEORETICAL MODEL OF STRUCTUREFORMATION IN DIE CASTING

ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ФОРМИРОВАНИЯ СТРУКТУРЫ В ЛИТЬЕ

доц. д-р инж. Бушев С.

Институт по металознание съоръжения и технологии "Акад. А. Балевски"
с център по хидро- и аеродинамика - БАН, София, България

E-mail: stbushev@abv.bg

Abstract: Classical description of the processes of structure formation in phase transition of first order at die casting are Stefan-Shvarts problem and the based kinetic phase formation equation of Kashchiev is developed by Stefan's problem for "small volumes". Nano-tasks solidification for as to use like "bridge methods" to applied with computational methods from other sciences fields. For example compare parameters of solidification and measurement of structures with electron microscopy.

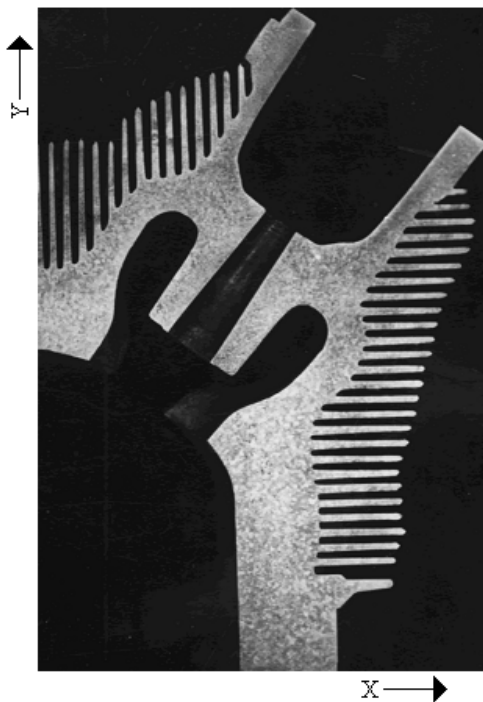
Keywords: STEFAN'S NANO-TASKS, STRUCTUREFORMATION IN DIE CASTING

1. Въведение

Известно е, че микро-структурата на всяко метална отливка е носител на нейните работни свойства [1, 2, 3]. Математичната теория на леярския процес е задачата на Стефан – Шварц. Тази задача е основна и за представеният тук теоретичен модел на структурообразуване при леене т.е. представяне на фазов преход от първи род адресиран към процеса на леене.

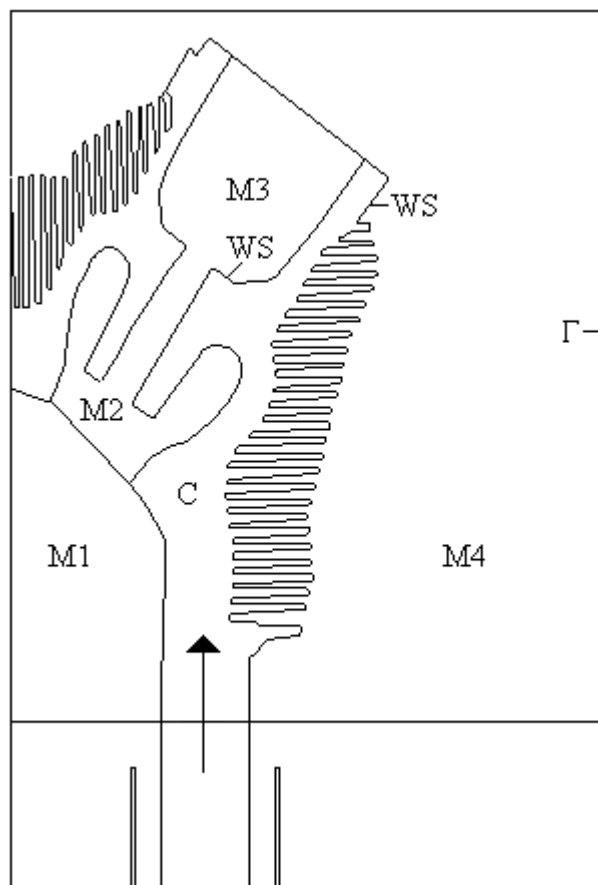
2. Основни процеси и уравнения на структурообразуване класически подход [4]

На фиг. 1 е представено напречното сечение на отливка със сложна геометрия – моторна глава на самолетен двигател [3].



Фиг.1. Моторна глава на самолетен двигател макро-шлиф – на напречното сечение на отливка от алуминиева сплав със сложна геометрия. Ясно се вижда поликристалната структура на крайното изделие без дефект.

На Фиг. 2 се представя геометричната схема на избрана област от изделието:



Фиг.2 Геометрична схема отливка – форма:

С – отливка; ↑ – запълване със стопилка; М – форма със сърца М1, М2, М3 и външна част М4; WS и Г – работна и външна повърхност на формата

Нестационарно температурно поле на затвърдяване – задача на Стефан - Шварц

-уравнение на топлопроводност

$$c\rho\dot{T} = \lambda\Delta T + SF \text{ в } V = V_C \cup V_M, \quad (1, 1)$$

-условия при гранични повърхности

-междуфазова повърхност класически подход

$$S_{FRONT}: \lambda_S \nabla T_S - \lambda_L \nabla T_L = \rho_L HR, \quad (1, 2)$$

-работна повърхност WS

$$WS: \lambda_C \nabla T_C = \alpha_{WS} (T_C^{WS} - T_M^{WS}) = \lambda_M \nabla T_M, \quad (1, 3)$$

-външна повърхност на форма M_{EX}=Γ

$$\Gamma: \lambda_M \nabla T_M = \alpha_{\Gamma} (T_M^{\Gamma} - T_{Ar.M.}) \quad (1, 4)$$

Процеси на кристализация

-термодинамика

$$\Delta\mu = H \ln \frac{T_m}{T}, \quad (2, 1)$$

$$W(n) = -n\Delta\mu + F(n)\sigma, \quad (2, 2)$$

$$W(n) = -\frac{n}{\eta} \Delta\mu + F\left(\frac{n}{\eta}\right)\sigma, \quad (2, 3)$$

-кристализация –основно кинетично уравнение на фазообразуване за променливо във времето преохлаждане Δμ(t) на Кашчиев

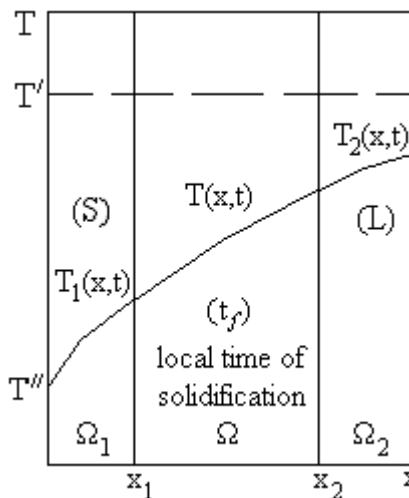
$$\dot{Z}_n(\tau) = \sum_m^M [f_{nm}(\tau)Z_m(\tau) - f_{mn}(\tau)Z_n(\tau)] +, \quad (2, 4)$$

$$K_n(\tau) - L_n(\tau) \quad for \quad \tau \in [0, t_f]$$

където λ, с, ρ – топлофизични параметри на течна L и твърда S фази; S_{FRONT}– междуфазова повърхност (фронт); V_C и V_M – обеми на отливка и форма; WS и Γ работна и външна повърхности на формата; T_(L,S,L,S,C,M)– температура на течна, твърда фаза и междуфазова повърхност, на отливка, на форма, на околна среда (Ar.M.); SF, H и R – функция на топлинен източник, топлина на фазово превръщане и скорост на движение на междуфазовата повърхност (фронта); T_m – температура на фазово превръщане и преохлаждане T; термодинамична движеща сила на фазов преход от първи род Δμ=μ_L-μ_S разлика между термодинамичните потенциали на течна и твърда фази; ΔS – изменение на ентропията от H; η – коефициент на плътност на опаковка; W – работа на зародишообразуване; F – повърхност на зародиш; Z_n, f_{nm}, f_{mn}, K_n, L_n и t_f – броят на комплексите на новата фаза, изградени от n атома, честоти на присъединяване/отделяне на частица (атом) за зародиша, преходни честоти от неагрегативни процеси постъпване и напускане на системата от готови комплекси, локално време на затвърдяване. Основни резултати с ур.(1 и 2) са показани на Фиг. 3 температурно поле и кристализация

Фиг. 3 Основни резултати с задачи ур.(1 и 2) – температурно поле и кристализация на примера на вода

Микро-задача на Стефан за определяне преохлаждането на течната фаза



Фиг. 4 Задача на Стефан с зона на преохлаждане [10, 11, 12]

-уравнения на топлопроводност за отделните зони

$$\dot{T}_1 = a_1 \partial^2 T_1 / \partial x^2 \quad in \quad \Omega_1, \quad (3, 1)$$

$$\dot{T} = a \partial^2 T / \partial x^2 \quad in \quad \Omega, \quad (3, 2)$$

$$\dot{T}_2 = a_2 \partial^2 T_2 / \partial x^2 \quad in \quad \Omega_2, \quad (3, 3)$$

-начални и гранични условия

$$T(0, x) = T', \quad (3, 4)$$

$$T(t, x_i)_{|x=0} = T(t, x_i)_{|x=0} = T_i, \quad i = 1, 2; \quad (3, 5)$$

$$T(t, 0) = T''; \quad T(t, \infty) = T'$$

-гранични условия на Стефан за движещата се зона на затвърдяване

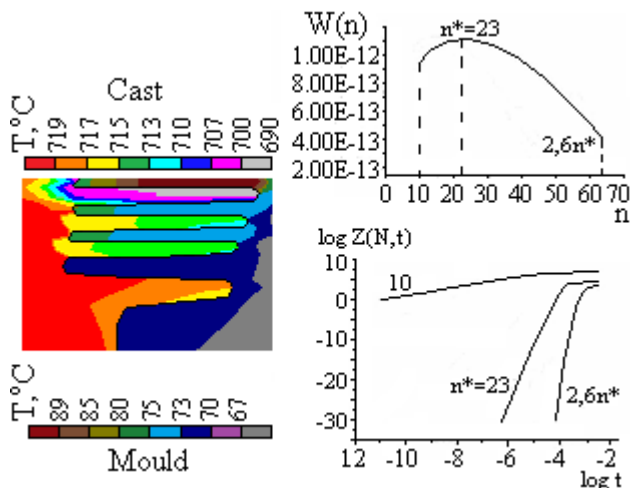
$$\begin{aligned} \dot{x}_1 &= L_1 [\lambda_1 \partial T / \partial x_{|x=0} - \lambda_2 \partial T / \partial x_{|x=0}] \\ \dot{x}_2 &= L_2 [\lambda_1 \partial T / \partial x_{|x=0} - \lambda_2 \partial T / \partial x_{|x=0}] \end{aligned} \quad (3, 6)$$

където R(t, x) – функция на разсейване на скрита топлина на топене в Ω; L_i=ρ_iQ_L; коефициенти на плътност, топлопроводност, топлинен капацитет (топлосъдържание), число на температуропроводност на твърда (i = 1) и течна фази (i = 2) – ρ_i, λ_i, c_i и a_i=(λ/ρc)_i.

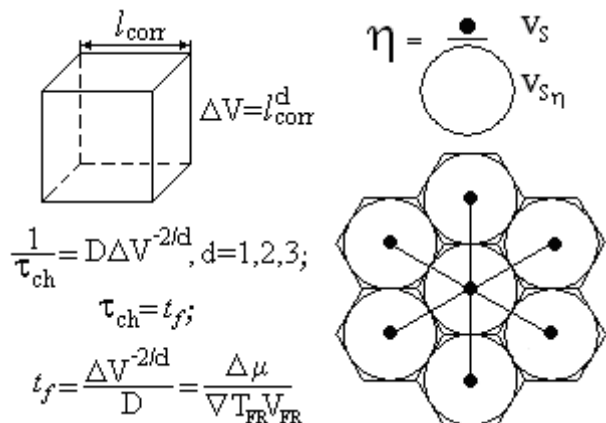
Задачата на Стефан ур.(3) със зона на преохлаждане позволява да се правят добри количествени оценки за термодинамичната движеща сила на кристализация. Възможността за оценка на преохлаждането се превръща в съществен технологичен фактор.

Термодинамиката на кристализация ур.(2, 1) в процеса на леене се получава от задачата на Стефан – Шварц, чрез ур.(3) т.е. разширената задача на Стефан е преход към процесът на структурообразуване, защото чрез ур.(2, 1) познаваме броя на частиците, изграждащи зародишите.

3. Мултимащабен подход за описание микро-структурите на новата фаза

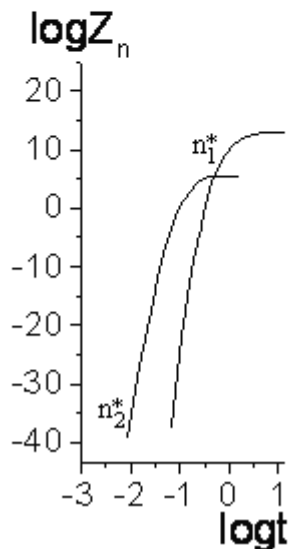
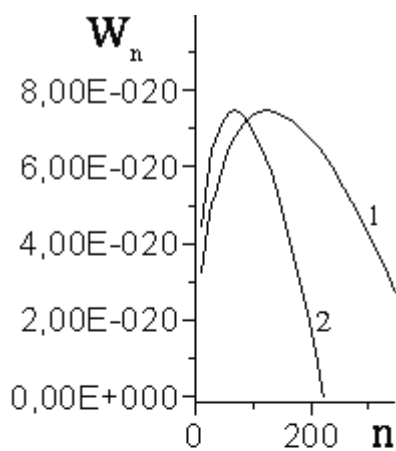


На Фиг. 5 е представена геометричната идея за основна клетка с характерни размер l_{corr} и време τ_{ch} – мащаби на корелация



Фиг.5 Геометрична представа за характерен обем на фазово превръщане и характеристични параметри: l_{corr} мащаб на корелация за процес в обема; ΔV – изменение в процеса от посоките на растеж d ; D – коефициент на дифузия; $\Delta \mu$ – от ур.(2, 1); ∇T_{FR} и R_{FR} – температурен градиент и скорост на движение на фронта; η – коефициент на плътност на упаковане; V_s и $V_s \eta$ – обем на атом и сфера (Вигнер – Зйтц), в която може да има само един атом [4].

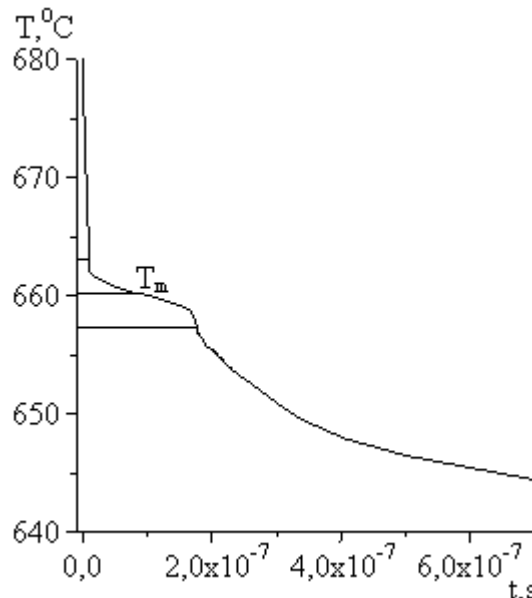
Мащабите на корелация е една от първите стъпки при използване на математичен метод за описание на процес (явление). При използване на η – коефициент на плътност на упаковане в ур.(2, 3) променят работата на зародишообразуване и кинетиката както следва:



Фиг. 6 Работа на зародишообразуване и кинетика на фазообразуване с отчитане на коефициента на плътност на опаковане: крива 1 $\eta = 1$, крива 2 $\eta = 0,533$.

Резултата на Фиг.6 е една индикация, че се отчита структурата, защото сферата, съдържаща един атом е част от кристалната решетка т.е. отчита се топологията на решетката. Иначе се работи само с ур.(2,2).

За да се отчита структурата са изчислени нано-задачи на Стефан за затвърдяване на сфера с радиус $r = 50$ nm – Фиг. 7



Фиг. 7 Затвърдяване на сфера от чист алуминий – с радиус ($r = 50$ nm) в температурен интервал $[T_m + \Delta, T_m - \Delta]$, където $T_m = 660,1$ °C и $\Delta = 3,5$ °C [11].

Нано-задача на Стефан е съпоставима с характерен обем в конкретен случай и с условията на процеса на затвърдяване от макро-задача на Стефан – Шварц ур.(1). Диаметър от 100 nm съвпада с образец, подготвен за структурен анализ с трансмисионна електронна микроскопия [7, 13].

Използва се динамична теория на дифракционен контраст в класичен подход [6, 7]: приближение на независими електрони в идеална кристална решетка, като това взаимодействие се отчита с помощта на ефективен едноелектронен периодичен потенциал; независимо от времето едноелектронно уравнение на Шрьодингер; вълнова функция на Блох ψ . Уравненията са:

$$U(\vec{r} + \vec{R}) = U(\vec{r}), \tag{4, 1, 2, 3}$$

$$H\psi(\vec{r}) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\vec{r}) \right) \psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}),$$

$$\psi_B(\vec{r}) = b(\vec{r}) \exp(2\pi i \vec{K} \vec{r}),$$

където U – потенциал с периодичност решетката на Браве за всяко R от решетката, удовлетворяващ условие (4, 1) и усещашт електрон с пълна енергия E ; H – едноелектронен хамилтониан на собствено състояние на ψ ; \hbar – константа на Планк (делена на 2π); m – маса на електрона; $\nabla^2 = \partial^2/\partial x^2 + \partial^2/\partial y^2 + \partial^2/\partial z^2$; $-(\hbar^2/2m)\nabla^2$ – кинетична енергия; ψ_B – вълнова функция на Блох: независим електрон, който се подчинява на едноелектронното уравнение на Шрьодингер (4, 2) с периодичен потенциал от вида (4, 1); K – вълнов вектор с дадена енергия и посока; b – функция, която има същата периодичност, както на кристала.

Модела от [4] заедно със задачи от типа ур.(3) и нано-задачата (Фиг. 7) и ур.(4) е добра основа за използване на изчислителната физика. Теорията на дифракционен контраст

дава оценка на елементи на структурата като: дислокации; комплекси от ваканции; дефекти в подреждането; граници на зърна, двойници и фази; полета на микронапрежения [7, 13]. Използването на квантовата механика [5÷8] за описание и получаване на нов дизайн на структури [9] е добре доказало се изчислително средство.

4. Изводи

1. Задачите на Стефан за малки обеми разширяват възможностите за оценка на температурните полета на затвърдяване на всяка отливка.

2. Микро- и нано-задачите на затвърдяване са математични методи, като мост за използването им с програмни продукти на изчислителната физика.

5. Литература

1.А. Балеvски, И. Димов, Метод за леене под налягане, Български патент 187/1961; British Patent No 989,353, 1965.

2.М. С. Флемингс, Процессы затвердевания, "Мир", Москва, 1977.

3. J. Arsov, E. Momchilov, K. Daskalov, G. Bachvarov, Theoretical And Technological Fundamentals of Gas Counter-Pressure Casting, "Prof. Marin Drinov" Publishing House, Sofia, 2007. ISBN 978-954-322-199-8

4. S. Bushev, N. Stoichev, N. Miloshev, M. Dimitrov, V. Todorov, Temperature Field and Crystallization during Solidification of Liquids, Journal of Material Science and Technology, vol. 18, 2010, No 4, 228-239.

5. М. Борисов, К. Маринова, Увод във физиката на твърдото тяло, I част, 1977.

6. Н. Ашкрофт, Н. Мермин, Физика твърдого тела, "Мир", Москва, 1979.

7. Р. У. Кана и П. Хаазена, Физическое металловедение, т. 1, "Металургия", Москва, 1987.

8. Uzi Landman, Materials by numbers: Computations as tools of discovery, PNAS, May 10, 2005, vol. 102, no. 19, 6671–6678.

9.А. Попов, Полупроводникови материали и структури за наноелектрониката, университетско издателство "св. Климент Охридски", София, 2007, ISBN978-954-07-2539-0.

10. St. Bushev, Phase Transition at Casting and Heat Treatment, Section 12 „Mathematical Physics” of „**SECOND NATIONAL CONGRESS ON PHYSICAL SCIENCES** and 41st NATIONAL CONFERENCE ON PHYSICS EDUCATION MATTERS”, 25–29, September 2013y., Sofia.

11. St. Bushev, Mathematical Modeling of Technologies With Phase Transitions – Casting and Heat Treatment, Section 12 „Mathematical Physics” of „**SECOND NATIONAL CONGRESS ON PHYSICAL SCIENCES** and 41st NATIONAL CONFERENCE ON PHYSICS EDUCATION MATTERS”, 25–29, September 2013y., Sofia.

12. S. Bushev, V. Georgiev, Comptes rendus de l'Academie bulgare des Sciences, **47**, No 3, 1994, 9-12.

13. Г.Златева, З. Маринова, Структура на металите електронномикроскопски атлас "Техника" София, 1995. ISBN 954-03-0389-3.