

Министерство науки и высшего образования РФ
Российская Академия Наук
ФГБОУ ВО «Удмуртский государственный университет»
ФГБУН «Удмуртский федеральный исследовательский центр УрО РАН»
АО Научно-производственное объединение «МКМ»

КРИСТАЛЛИЗАЦИЯ: КОМПЬЮТЕРНЫЕ МОДЕЛИ, ЭКСПЕРИМЕНТ, ТЕХНОЛОГИИ

Тезисы
X Всероссийской конференции
26–29 марта 2025 года

ФГБОУ ВО «УдГУ»
Удмуртский университет

Ижевск
2025

УДК 669.017.3:681.3.06 (043.3)

ББК 34.3

Главный редактор П. К. Галенко
Ответственный редактор В. Е. Анкудинов

К26 Кристаллизация: компьютерные модели, эксперимент, технологии: Тезисы X Всероссийской конференции. – Ижевск: Удмуртский университет, 2025. – 241 с.

Solidification: computer simulation, experiments and technology: Abstracts of the X All-russian conference. – Izhevsk: Udmurt University, 2025. – 241 p.

ISBN XXX

Настоящий сборник содержит тезисы докладов участников X Всероссийской конференции «Кристаллизация: компьютерные модели, эксперимент, технологии» (КРИС-2025, 26–29 марта 2025 года, УдГУ), 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, образования микроструктур и старения сплавов, а также связанные с металлургическими, литейными и аддитивными технологиями.

ISBN XXX

УДК 669.017.3:681.3.06 (043.3)

ББК 34.3

© Коллектив авторов, 2025

© Удмуртский университет, 2025

**«Кристаллизация: компьютерные модели, эксперимент, технологии»
(КРИС-2025), 26–29 марта 2025 года, г. Ижевск**

Национальный программный комитет

Галенко Петр Константинович (УдГУ, Ижевск) – председатель программного комитета,
Кривилев Михаил Дмитриевич (УдГУ, Ижевск) – сопредседатель, контактное лицо,
Харанжевский Евгений Викторович (УдГУ, Ижевск) – контактное лицо,

Голод Валерий Михайлович (СПбПУ, Санкт-Петербург),
Александров Дмитрий Валерьевич (УрФУ, Екатеринбург),
Кропотин Валентин Валентинович (НПО МКМ, Ижевск),
Ладьянов Владимир Иванович (УдмФИЦ УрО РАН, Ижевск),
Кондрашов Евгений Николаевич (ВСМПО-АВИСМА, Верхняя Салда),
Щелкачев Николай Михайлович (ИФВД РАН, Москва),
Рыльцев Роман Евгеньевич (Институт металлургии УрО РАН, Екатеринбург),
Лебедев Владимир Геннадьевич (НПО МКМ, Ижевск),
Анкудинов Владимир Евгеньевич (ИФВД РАН, Москва),
Гусакова Ольга Вадимовна (МГЭИ, Минск),
Камаева Лариса Вячеславовна (УдмФИЦ УрО РАН, Ижевск),
Князева Анна Георгиевна (ИФПМ СО РАН, Томск),
Панов Алексей Геннадьевич (КФУ, Набережные Челны),
Бельтюков Анатолий Леонидович (УдмФИЦ УрО РАН, Ижевск),
Колесниченко Илья Владимирович (ИМСС, Пермь).

Локальный организационный комитет

Данилов Андрей Васильевич (УдГУ),
Бабкина Вера Викторовна (УдГУ),
Писарева Татьяна Александровна (УдГУ),
Ворошилов Евгений Сергеевич (УдГУ),
Гордеев Георгий Андреевич (УдГУ),
Зыкин Андрей Владимирович (УдГУ),
Стерхова Ирина Валентиновна (УдмФИЦ УрО РАН),
Шутов Илья Владиславович (УдГУ),
Мосина Ринетта Маратовна (УдГУ),
Груздь Светлана Анатольевна (УдГУ, ИжГТУ),
Артемьева Анастасия Александровна (УдГУ),
Широбокова Анна Сергеевна (УдГУ),
Коньшин Родион Сергеевич (УдГУ),
Газизянова Алина Рафаеловна (УдГУ).

От редакции

Настоящий сборник содержит тезисы докладов участников X Всероссийской конференции «Кристаллизация: компьютерные модели, эксперимент, технологии», традиционно проводимой в г. Ижевске, и посвященной кристаллизации металлических расплавов, фазовым переходам в конденсированных средах и протекающим в них физико-химическим процессам. Важно отметить, что целью конференции является обсуждение как фундаментальных, так и практических аспектов литейных и металлургических технологий. С этих позиций наиболее ценным аспектом является генерация перспективных идей и направлений развития, которые могут привести к появлению новых или улучшению существующих технологий.

Конференция 2025 года ставит своей целью способствовать более активному научному взаимодействию между различными исследовательскими группами и промышленными предприятиями. В этом году конференция начинает свою работу с научно-технического форума, в котором участвуют предприятия, имеющие металлургические и литейные производства. Обсуждение текущих проблем позволит актуализировать задачи, стоящие в области проведения тематических НИОКР. Важным нововведением стала Молодёжная секция, где с докладами выступят аспиранты и студенты старших курсов. В конце конференции запланирован круглый стол и дискуссия о моделировании методами фазового поля и CALPHAD.

В конференции принимают участие докладчики более чем из 12 городов. Формат проведения в основном предполагает очное участие. Оргкомитет конференции надеется, что Юбилейная Конференция станет высокоэффективной площадкой для обмена научными работами в области затвердевания.

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

Секция I

**Теория и эксперимент
процессов затвердевания.
Рост и морфология кристаллов.**

Плавление в двух и трех измерениях – теоретические подходы и компьютерное моделирование

В.Н. Рыжов¹, Ю.Д. Фомин¹, Е.Н. Циок¹

¹ Институт физики высоких давлений им. Л.Ф. Верещагина РАН, 108840 Россия, г. Москва, г. Троицк, Калужское шоссе, 14

В докладе обсуждаются теоретические подходы к описанию кристаллизации и плавления двумерных и трехмерных систем, включая метод функционала плотности в теории кристаллизации и методы компьютерного моделирования [1-3]. Особое внимание уделяется описанию плавления двумерных систем [1,2].

Современные теории плавления двумерных систем базируются в значительной степени на представлениях теории фазовых переходов в двумерных системах с непрерывной симметрией Березинского-Костерлица-Таулеса (БКТ). В настоящее время существуют три основных сценария плавления двумерных кристаллов. Прежде всего, это теория Березинского-Костерлица-Таулеса-Хальперина-Нельсона-Янга (БКТХНЯ), в рамках которой двумерные кристаллы плавятся посредством двух непрерывных переходов типа БКТ с промежуточной гексатической фазой. При этом фазовый переход первого рода также может реализоваться. Недавно был предложен третий сценарий, в рамках которого плавление также может происходить посредством двух переходов, при этом переход кристалл-гексатическая фаза происходит как переход типа БКТ, а переход гексатическая фаза-изотропная жидкость - переход первого рода [1-3].

В докладе приведен критический анализ применяемых подходов для определения параметров и вида перехода методами компьютерного моделирования. Обсуждается зависимость перехода от вида потенциала и влияние случайного беспорядка на самоорганизацию двумерных систем и аномальные физические свойства. В экспериментах двумерная система обычно реализуется путем адсорбции на твердой подложке, которая вносит замороженный беспорядок из-за некоторой шероховатости или внутренних дефектов. Беспорядок может влиять на сценарии кристаллизации/плавления 2D-систем. Как показано в [4,5], сценарий плавления БКТХНЯ сохраняется при наличии слабого беспорядка. В наших работах [2,6-10] методами компьютерного моделирования было проанализировано влияние случайного пиннинга различной природы на ориентационный и трансляционный параметры порядка и показано, что пиннинг практически не влияет на ориентационный порядок, но разрушает трансляционный порядок и существенно понижает температуру перехода кристалл-гексатическая фаза. В результате область существования гексатической фазы расширяется. Более того, в случае перехода первого рода он переходит в два перехода – переход БКТ из кристалла в гексатическую фазу и переход первого рода в изотропную жидкость, т.е. плавление происходит в соответствии со сценарием БК [6-8]. Гауссовский пиннинг может превращать сценарий типа БК в БКТХНЯ [9]. В случае структурного перехода в кристаллической фазе переход первого рода может превратиться в три перехода [10]. В качестве примера

Всероссийская конференция

обсуждаются системы с потенциалом с мягких сфер, с потенциалом с отрицательной кривизной, а также модельная система с деформируемым потенциалом, применяемым для описания поведения коллоидов – потенциалом Герца.

Работа выполнена с использованием оборудования Межведомственного суперкомпьютерного центра и центра коллективного пользования «Комплекс моделирования и обработки данных исследовательских установок мега-класса», входящих в состав НИЦ «Курчатовский институт».

- [1] Рыжов В.Н., Тареева Е.Е., Фомин Ю.Д., Циок Е.Н. Переход Березинского—Костерлица—Таулеса и двумерное плавление // УФН, 2017. Vol. 187. P. 921.
- [2] Рыжов В.Н., Гайдук Е.А., Тареева Е.Е., Фомин Ю.Д., Циок Е.Н. Сценарии плавления двумерных систем – возможности компьютерного моделирования // ЖЭТФ, 2023. Vol. 164, P. 143.
- [3] Рыжов В.Н., Тареева Е.Е., Фомин Ю.Д., Циок Е.Н. Сложные фазовые диаграммы систем с изотропными потенциалами: результаты компьютерного моделирования // УФН, 2020. Vol. 190. P. 449.
- [4] Nelson D.R. Reentrant melting in solid films with quenched random impurities // Phys. Rev. B, 1983. Vol. 27. P. 2902.
- [5] Cha M.-C., Fertig H.A. Disorder-Induced Phase Transitions in Two-Dimensional Crystals // Phys. Rev. Lett., 1995. Vol. 74. P. 4867.
- [6] Tsiok E.N., Dudalov D.E., Fomin Yu.D., Ryzhov V.N. Random pinning changes the melting scenario of a two-dimensional core-softened potential system // Phys. Rev. E, 2015. Vol. 92. P. 032110.
- [7] Tsiok E.N., Fomin Y.D., Ryzhov V.N. Random pinning elucidates the nature of melting transition in two-dimensional core-softened potential system // Physica A, 2018. Vol. 490. P. 819.
- [8] Gaiduk E.A., Fomin Yu.D., Tsiok E.N., Ryzhov V.N. The influence of random pinning on the melting scenario of two-dimensional soft-disk systems // Molecular Physics, 2019. Vol. 117. P. 2910.
- [9] Fomin Yu.D., Gaiduk E.A., Tsiok E.N., Ryzhov V.N. The influence of Gaussian pinning on the melting scenario of a two-dimensional soft-disk system: First-order versus continuous transition // Physica A, 2024. Vol. 644. P. 129841.
- [10] Tsiok E.N., Fomin Y.D., Gaiduk E.A., Ryzhov V.N. Structural transition in two-dimensional Hertzian spheres in the presence of random pinning // Phys. Rev. E, 2021. Vol. 103. P. 062612.

Неравновесные эффекты при росте кристаллов

П. К. Галенко

Удмуртский государственный университет, 426034 Россия, г. Ижевск, ул. Университетская 1

Критически обсуждаются экспериментальные данные и исследования с использованием методов теоретического моделирования роста кристаллов. Основное внимание уделено анализу неравновесных эффектов при высокоскоростном затвердевании металлов, сплавов и полупроводниковых материалов. Для процессов затвердевания при росте дендритных, эвтектических и интерметаллических кристаллов анализируются кинетические эффекты, которые проявляются как

- неравновесное перераспределение примесей на границе раздела,
- захват кристаллом беспорядка жидкой фазы,
- сопротивление движению границы «кристалл-жидкость» со стороны примесной атмосферы,
- бездиффузионный (химически безразделительный) рост кристаллов.

Теоретические предсказания и расчеты тестируются в сравнении с результатами экспериментов по кинетике затвердевания элементарных веществ и сплавов, проведенных в наземных и микрогравитационных условиях.

Универсальное распределение кристаллов по размерам на заключительной стадии фазового превращения: коагуляция и оствальдово созревание

Д. В. Александров, Е. В. Маковеева

Уральский федеральный университет, 620000 Россия, г. Екатеринбург, проспект Ленина 51

Слияние частиц в результате их столкновений, называемое *коагуляцией* (рис. 1), определяет гранулометрический состав, средние характеристики дисперсной системы и её свойства при фазовых превращениях. Коагуляция частиц, содержащих более $10^3 - 10^4$ молекул, происходит в результате их столкновений под действием силы притяжения Ван-дер-Ваальса [1]. При этом физико-химические условия в среде определяют механизмы коагуляции частиц, к которым относятся [2, 3]: броуновская, гравитационная, сдвиговая, турбулентная, дифференциально-седиментационная, акустическая коагуляция. Эти механизмы коагуляции могут происходить как независимо, так и одновременно [2, 3].

Процесс *оствальдова созревания* (*коалесценции*) связан с тем, что более крупные кристаллы (с меньшей кривизной) могут расти за счёт растворения более мелких кристаллов (с большей кривизной) (рис. 1) [4].

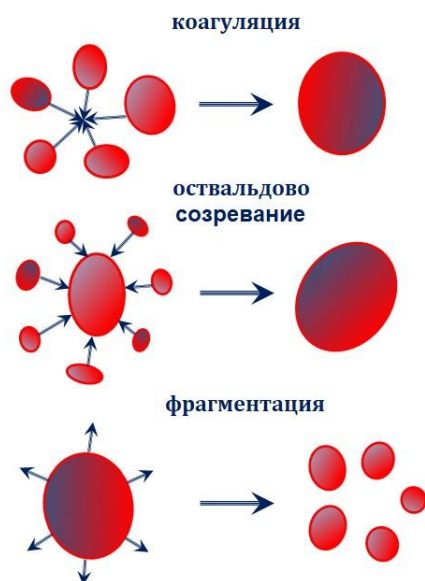


Рисунок 1.

Процессы, протекающие на заключительной стадии фазового превращения: коагуляция, оствальдово созревание и фрагментация частиц (агрегатов).

Распад частиц на отдельные фрагменты в результате различных воздействий, называемый *фрагментацией* (рис. 1), определяет состояние и свойства ансамбля частиц в процессе фазовых превращений. Этот процесс имеет место во многих физических системах, таких как разрушение капель и агрегатов, деградация полимеров, дробление пород, фрагментация аэрозолей, ДНК и эритроцитов [5, 6].

При анализе заключительной стадии фазовых превращений обычно выделяют один из возможных преобладающих процессов. Так, уравнение Смолуховского [2, 3] является основой для моделирования процесса коагуляции частиц, а модель Лифшица-Слёзова [4] описывает процесс оствальдова созревания (коалесценции)

Всероссийская конференция

частиц. Известно лишь несколько работ, посвященных одновременной реализации процессов коагуляции и оствальдова созревания.

В работе [7] было построено точное асимптотическое (на больших временах) решение уравнения коагуляции Смолуховского (решение Шумана), а в работе [8] было найдено универсальное распределение частиц по размерам для процесса оствальдова созревания (коалесценции) – решение Лифшица-Слёзова. Данная работа посвящена точному аналитическому решению нестационарной интегродифференциальной модели совместного процесса коагуляции и оствальдова созревания, расширяющее теории Шумана и Лифшица-Слёзова [7, 8]. Уравнение для функции распределения частиц по объемам $f(v, t)$, нормированной на числовую концентрацию частиц, имеет вид:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + R(C) \frac{\partial f}{\partial v} = \frac{1}{2} \int_0^v A(w, v-w) f(w, t) f(v-w, t) dw - f(v, t) \int_0^\infty A(w, v) f(w, t) dw. \quad (1)$$

Здесь v и t – переменные объёма и времени, $A(w, v)$ – ядро коагуляции, $R(C) = k_g(C(t) - C_s)^\gamma$ – скорость роста кристаллов, $C(t)$ и C_s – текущая концентрация пересыщенного раствора и концентрация насыщения, k_g и γ – константы скорости роста частиц. Начальное распределение $f(v, 0)$ считается известным.

Точное решение уравнения (1) построено для постоянных ядер коагуляции $A(w, v) = A_0 = \text{const}$ с помощью подстановки

$$f(v, t) = f(0, t) \exp(-b(t)v), \quad (2)$$

где $f(0, t)$ и $b(t)$ определяются подстановкой (2) в (1). Решение задачи находится в параметрическом виде (детали построения решения и его анализ опубликованы в работах [9, 10]).

Найденное решение можно представить в виде:

$$f(v, t) = \frac{N^2(t)}{V(t)} \exp\left[-\frac{N(t)v}{V(t)}\right], \quad (3)$$

где $N(t)$ – общее число частиц в системе, а $V(t)$ – объём сконденсированной фазы ($N(t)$ и $V(t)$ определены в работах [9, 10]).

Функцию распределения (3) можно переписать в пространстве радиусов (переменная r) с помощью выражения $f(v, t) dv = 4\pi r^2 f(v, t) dr = f(r, t) dr$:

$$f(r, t) = \frac{4\pi r^2 N^2(t)}{V(t)} \exp\left[-\frac{4\pi N(t)r^3}{3V(t)}\right]. \quad (4)$$

В переменных Лифшица-Слёзова решение (4) принимает вид [9, 10]:

$$P(u) = \frac{5u^2}{u_m^3} \exp\left[-\frac{5u^3}{3u_m^3}\right]. \quad (5)$$

где u и u_m определены в [9, 10].

Функция распределения (5), учитывающая коагуляцию и оствальдово созревание (коалесценцию), сопоставлена с экспериментальными данными (рис. 2). Видно, что максимум $P(u)$ находится существенно ниже решения Лифшица-Слёзова для чистой коалесценции, а также смещён влево. Кроме этого, у функции (5) есть ветвь, идущая выше и правее точки $u = 3/2$.

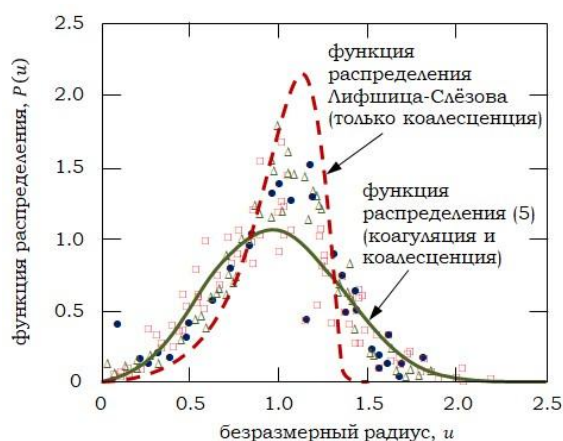


Рисунок 2.

Сопоставление решения (5) с экспериментальными данными (более подробное изложение материала представлено в работах [9, 10]).

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РНФ 23-19-00337.

- [1] Levich V.G. // Physicochemical hydrodynamics, Englewood Cliffs, NJ (1962).
- [2] Williams M.M.R., Loyalka S.K. // Aerosol science: theory and practice, Oxford (1991).
- [3] Friedlander S.K. // Smoke, dust, and haze. Fundamentals of aerosol dynamics, Oxford (2000).
- [4] Lifshitz E.M., Pitaevskii L.P. // Physical kinetics, New York (1981).
- [5] Niranjana P., Bodi K., Gadgil H. Towards a generalized droplet fragmentation model // Phys. Fluids, 2024. Vol. 36. P. 113101.
- [6] Liu M.J., Wiegel A.A., Wilson K.R., Houle F.A. Aerosol fragmentation driven by coupling of acid-base and free-radical chemistry in the heterogeneous oxidation of aqueous citric acid by OH radicals // J. Phys. Chem. A, 2017. Vol. 121. P. 5856.
- [7] Schumann T.E.W., Theoretical aspects of the size distribution of fog particles // Q. J. R. Meteorol. Soc., 1940. Vol. 66(285). P. 195.
- [8] Lifshitz I.M., Slyozov V.V. The kinetics of precipitation from supersaturated solid solutions // J. Phys. Chem. Solids, 1961. Vol. 19. P. 35.
- [9] Makoveeva E.V., Alexandrov D.V. An exact solution to nonstationary Smoluchowski's coagulation equation complicated by Ostwald ripening // Int. J. Heat Mass Trans., 2023. Vol. 217. P. 124706.
- [10] Makoveeva E.V., Alexandrov D.V. An exact analytical solution to unsteady population balance equation with particles coagulation // Commun. Nonlinear Sci. Numer. Simulat., 2024. Vol. 131. P. 107879.

Атомистическое моделирование кристаллизации и плавления в металлических сплавах с помощью машинно-обучаемых межатомных потенциалов

Р.Е. Рыльцев¹, Н.М. Щелкачев^{1,2}, Е.О. Хазиева¹, И.А. Балякин¹, Н.С. Пикалова¹,
А.О. Типеев³

¹Институт металлургии имени академика Н.А. Ватолина Уральского отделения Российской академии наук, 620016 Россия, г. Екатеринбург, ул. Амундсена 101

²Институт физики высоких давлений им. Л.Ф. Верещагина РАН, 142190 Россия, Москва, Калужское ш., 14

³Department of Materials Engineering, Federal University of Sao Carlos, 13565-905 Sao Carlos, SP, Brazil

Атомистическое моделирование является крайне полезным, а иногда и безальтернативным способом изучения процессов, происходящих в веществах на атомарном уровне. Ярким примером является изучение процессов кристаллизации, плавления, стеклования, когда атомистическое моделирование позволяет эффективно описывать микроскопические особенности изучаемых явлений на пространственно-временных масштабах, недоступных эксперименту.

В последние десять лет в вычислительном материаловедении наблюдается революционный прогресс, связанный с использованием методов машинного обучения для создания потенциалов межатомного взаимодействия (MLIPs – Machine Learning Interatomic Potentials). Основная идея такого подхода – аппроксимировать поверхность потенциальной энергии системы с помощью многочастичных функций общего вида (например, нейронных сетей) используя эталонные значения энергий и сил, полученные в *ab initio* расчетах. Атомистическое моделирование с MLIPs позволяет достигнуть *ab initio* точности при на порядки меньших вычислительных затратах [1].

Одним из наиболее эффективных моделей MLIPs на основе нейронных сетей является DeePMD [2], в которой поверхность потенциальной энергии системы аппроксимируется с помощью двух полносвязных многослойных искусственных нейронных сетей прямого распространения (перцептронов). Одна из них используется для преобразования координат локального окружения атомов в наборы так называемых дескрипторов; вторая аппроксимирующая сеть преобразует дескрипторы всех атомов системы в потенциальную энергию. Данный подход очень хорошо зарекомендовал себя при моделировании систем различной природы [3–7].

Широкое распространение MLIP привело к бурному росту научных результатов, полученных с их помощью. Наиболее ярко возможности MLIPs раскрываются при решении задач, которые требуют как высокой точности описания взаимодействий, так и высокой вычислительной эффективности, а потому не могут быть решены традиционными методами. Среди наиболее ярких примеров можно отметить моделирование кинетики фазовых и структурных превращений [8,9].

Всероссийская конференция

В данной работе обобщаются результаты, полученные авторами в данной области за последние несколько лет. Будут рассмотрены следующие задачи:

1. Моделирование спонтанной нуклеации в переохлажденных жидкостях в системах Al-Cu-Ni, Fe-Cr-C, TiZrHfNbTa, TiZrHfNbTa-C;
2. Моделирование плавления перегретого кристалла AlCu;
3. Расчет температур плавления систем Al-Cu-Ni, Fe-Cr-C, В-Р, TiZrHfNbTa-C методом движения двухфазной границы;
4. Особенности ближнего порядка при кристаллизации высокоэнтропийного карбида TiZrHfNbTa-C.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант РНФ 23-13-00162).

[1] Mishin Y. Machine-learning interatomic potentials for materials science // *Acta Mater.*, 2021. Vol. 214. P. 116980.

[2] Wen T., Zhang L., Wang H., Weinan E., Srolovitz D.J. Deep potentials for materials science // *Mater. Futures*, 2022. Vol 1. P. 02260.

[3]. Balyakin I.A., Rempel S.V., Ryltsev R.E., Rempel A.A. Deep machine learning interatomic potential for liquid silica // *Phys. Rev. E.*, 2020. Vol. 102. P. 052125.

[4] Ryltsev R.E., Chtchelkatchev N.M. Deep machine learning potentials for multicomponent metallic melts: Development, predictability and compositional transferability // *J. Mol. Liq.*, 2022. Vol. 349. P. 118181.

[5] Balyakin I.A., Yuryev A.A., Filippov V.V., Gelchinski B.R. Viscosity of liquid gallium: Neural network potential molecular dynamics and experimental study // *Comput. Mater. Sci.*, 2022. Vol. 215. P. 111802.

[7] Kondratyuk N., Ryltsev R., Ankudinov V., Chtchelkatchev N. First-principles calculations of the viscosity in multicomponent metallic melts: Al-Cu-Ni as a test case // *J. Mol. Liq.*, 2023. V. 380. P. 121751.

[8] Deringer V.L., Bernstein N., Csányi G., Ben Mahmoud C., Ceriotti M., Wilson M., Elliott S.R. Origins of structural and electronic transitions in disordered silicon // *Nature*, 2021. Vol. 589. P. 59.

[9] Tipeev A.O., Ryltsev R.E., Chtchelkatchev N.M., Ramprakash S., Zanutto E.D. Machine learning-assisted MD simulation of melting in superheated AlCu validates the Classical Nucleation Theory // *J. Mol. Liq.*, 2023. Vol. 387. P.122606.

Калибровочные теории стекла

Л. Д. Сон¹, М. Г. Васин²

¹ИМЕТ УрО РАН им. Н.А.Ватолина, 620016 Россия, г. Екатеринбург, ул.Амундсена 101

²ИФВД РАН им. Л.Ф.Верещагина, 108840 Россия, г. Москва, г. Троицк, Калужское шоссе, 14

В докладе обсуждается связь формально - аксиоматических статистических моделей стекла, в которых параметр порядка фрустрирован калибровочным полем, с реальными системами (в частности – со структурными стеклами, в которых дальний порядок нарушен топологическими дефектами [1]). Показано, что для систем, в которых канонический ансамбль представлен конфигурациями линейных топологических дефектов на фоне основного упорядоченного состояния, статистическую сумму можно представить в виде функционального интеграла по скалярным и векторным полям. При этом первые соответствуют плотности дефектов, а вторые описывают их взаимодействие. В приближении малой плотности дефектов эффективный гамильтониан выглядит как квадратичный функционал скалярных полей с калибровочным взаимодействием, в котором «удлинение» производной осуществляется с помощью векторного поля. Скалярное поле является критическим, т.е. «массовый» коэффициент перед квадратом поля проходит через нуль при некоторой критической температуре. В духе более ранних работ [2,3] можно показать, что при наличии «вмороженного» векторного поля, которое фрустрирует систему, при этой температуре имеет место переход в неэргодическую фазу (стекло), что подтверждается видом закона релаксации. Поскольку нами был получен полный эффективный гамильтониан, мы смогли в приближении среднего поля исследовать систему без предположения о малости плотности дефектов, и выяснить, при каких условиях можно создать вмороженное векторное поле, а также установить равновесное поведение и сценарии возможных фазовых переходов.

- [1] В.А.Лихачев, А.Е.Волков, В.Е.Шудегов. //Континуальная теория дефектов. Структурно-аналитическая механика материалов, Ленинград (1986)
- [2] Vasin M., Gauge theory glass transition, //Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment, 2011. N5. P.05009
- [3] Vasin M.G., Gauge theory of the liquid-glass transition in static and dynamical approaches, // Theoretical and Mathematical Physics, 2013. Vol.174. N3 P.406

Особенности кристаллизации сплавов на основе железа и кобальта из жидкого и аморфного состояний

В. Е. Сидоров^{1,3}, Б. А. Русанов^{1,3}, П. С. Попель¹, Л. Д. Сон^{1,2},
С. А. Петрова², К. Ю. Шуняев², В. И. Ладьянов³

¹Уральский государственный педагогический университет, 620091, Россия, г. Екатеринбург, пр. Космонавтов, 26

²Институт металлургии УрО РАН, 620016, Россия, г. Екатеринбург, ул. Амундсена, 101

³Удмуртский федеральный исследовательский центр УрО РАН, 426067, Россия, г. Ижевск, ул. Татьяны Барамзиной, 34

Объемные металлические стекла на основе железа и кобальта обладают уникальным сочетанием физических свойств: высокой прочностью и пластичностью, хорошей коррозионной стойкостью и отличными магнитомягкими свойствами (в аморфном состоянии коэрцитивная сила не превышает 10 А/м при намагниченности насыщения больше 1 Тл). Однако их промышленное применение ограничено достаточно низкой стеклообразующей способностью (glass-forming ability - GFA). Поэтому вопрос улучшения GFA данных сплавов остается по-прежнему актуальным.

В настоящей работе исследована кристаллизация сплавов CoFeBSiNb и FeNiBSiNb с помощью высокотемпературной дифракции рентгеновских лучей, дифференциальной сканирующей калориметрии (ДСК) и при получении температурных зависимостей физических свойств (плотности, электросопротивления и магнитной восприимчивости) в кристаллическом, жидком и аморфном состояниях. Объемно-аморфные образцы в виде цилиндров диаметром до 4 мм были получены методом вакуумного всасывания и инжестированием расплава в водоохлаждаемую медную изложницу. ДСК-кривые получены при скоростях нагрева 10, 20 и 40 К / мин.

Установлено, что при перегреве расплавов выше определенной температуры (1350 – 1400 °С в зависимости от состава) наблюдается гистерезис свойств, т.е. несовпадение значений, полученных при нагреве и последующем охлаждении, что может свидетельствовать о структурных превращениях, происходящих в расплавах. При кристаллизации из перегретого расплава основными фазами являются твердые растворы Fe-Ni, Co-Fe и стабильные интерметаллиды Fe₂B, Co₂B, Ni₂B, FeSi₂. Кристаллизация из перегретого расплава приводит к появлению метастабильных боридов и многокомпонентных твердых растворов.

Изучено влияние температуры нагрева расплава на качество объемно-аморфных образцов. Нам не удалось получить аморфные образцы из перегретого расплава. Это подтверждает нашу идею о том, что из бесструктурного расплава невозможно получить качественный аморфный сплав.

При кристаллизации из аморфного состояния первым всегда кристаллизуется метастабильный интерметаллид (Fe,Ni)₂₃B₆ или (Co,Fe)₂₃B₆ с ОЦК решеткой и частичным замещением атомов железа (кобальта) атомами ниобия, независимо от

Всероссийская конференция

скоростей нагрева и охлаждения. На второй стадии образуются метастабильные бориды $MNbB$ ($M = Fe, Co, Ni$), которые при дальнейшем нагреве или длительной изотермической выдержке переходят в стабильные соединения Nb_2B и M_2B .

Впервые установлено, что аморфные сплавы на основе кобальта демонстрируют аномальное поведение электросопротивления после кристаллизации — температурные зависимости, полученные в режиме охлаждения, являются нелинейными и описываются как $\ln R \sim T^{-1/4}$. Это может означать, что возникающие при кристаллизации аморфного состояния непроводящие оксиды и бориды образуют тонкую разветвленную сеть, пронизывающую весь объем образца. Как следствие, переход электронов из одной проводящей микрообласти в другую происходит в туннельном режиме. Более подробно этот вопрос рассмотрен в [1].

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ № 25-23-00049.

- [1] Сидоров В.Е., Русанов Б.А., Петрова С.А., Сон Л.Д., Ладьянов В.И. Особенности электрического сопротивления сплавов Co-Fe-Si-B-Nb-PЗМ в аморфном и кристаллическом состояниях // Журнал технической физики, 2023. № 1. С. 117-121.

Рост кристаллов и формирование аморфной структуры в мезоскопической модели стеклования

Анкудинов В. Е., Васин М. Г.

Институт физики высоких давлений им. Л.Ф. Верещагина РАН, 142190 Россия,
 г. Москва, Калужское шоссе, 14

Представлена физико-математическая модель, описывающая переход вещества из жидкого состояния в твердое в процессе его охлаждения. Модель основана на калибровочной теории стеклования [1], записанной в полевой форме [2]. Выполнен численный расчёт системы стохастических дифференциальных уравнений, учитывающих тепловые флуктуации [3]. С помощью предложенной модели описана конкуренция между процессами кристаллизации разных типов и стеклования, протекающими при охлаждении разупорядоченного расплава с разной скоростью. Предложен параметр, характеризующий степень застеклованности системы, $(\nabla \times \mathbf{A})$, где \mathbf{A} – поле, описывающее упорядочение дальнего порядка (калибровочное поле). Данный параметр порядка позволяет характеризовать степень разупорядочения, то есть степень аморфизации затвердевшего вещества. Парная корреляционная функция поля $(\nabla \times \mathbf{A})$ пропорциональна коррелятору поля упругих напряжений, $\langle \mathbf{u}\mathbf{u} \rangle$, которая может быть непосредственно получена из структурного фактора.

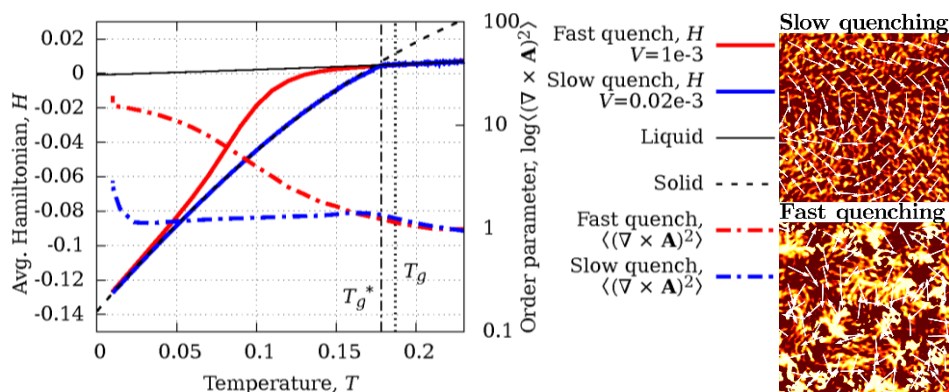


Рисунок 1. Зависимость усредненного гамильтониана H , и логарифма параметра порядка «стеклования» $\langle (\nabla \times \mathbf{A})^2 \rangle$ от температуры T для областей с высокой скоростью охлаждения (красные кривые, $V_{cool} = 10^{-3}$) и медленным охлаждением (синие кривые, $V_{cool} = 2 \times 10^{-5}$). На графике тонкими черными линиями нанесены кривые, экстраполирующие H жидкой (Liquid) и твердой (Solid) фаз. Также отмечены T_g – аналитическая температура стеклования и фактическая температура перехода T_g^* . Результирующие структуры в конце медленного охлаждения (Slow quenching) и быстрой закалки (Fast quenching) приведены на врезке справа.

Проведённые расчёты показали, что при скорости фронта застывания (кристаллизации) ниже некоторой критической величины формируется

Всероссийская конференция

столбчатый кристаллический агрегат, в объеме которого величина параметра порядка ($\nabla \times A$) мала. При увеличении скорости охлаждения, и соответствующем росте движущих сил, наблюдается переход от столбчатых к равноосным кристаллам (columnar-to-equiaxed transition, CET), качественно схожий с наблюдаемым экспериментально. Движущийся фронт следует за равновесной изотермой, соответствующей аналитической температуре перехода T_g , хотя торможение фронта, связанное с конечной скоростью упорядочения поля A приводит к эффекту кинетического переохлаждения на фронте и ограничению предельной скорости фронта кристаллизации. При высокой скорости охлаждения домен аморфизуется.

Литература

- [1] Vasin M.G. Glass transition as a topological phase transition // *Phys. Rev. E* **106**, 2022, P. 044124.
- [2] Vasin M., Ankudinov V. Phase-field model of glass transition: behavior under uniform quenching // *Phase Transitions*. 2024. P. 1–19.
- [3] Ankudinov V., Shklyaev K., Vasin M. Mesoscopic glass transition model: Influence of the cooling rate on the structure refinement // *AIMS Math*. 2024. Vol. 9, № 8. P. 22174–22196.

Анализ микроструктур на границе контактного плавления сплавов на основе систем Al-Mg и Al-Zn

Е. А. Баталова¹, Л. В. Камаева¹, И. В. Шутов², М. Д. Кривилев², М. Н. Королев²

¹Удмуртский федеральный исследовательский центр УрО РАН, 426067 Россия, г. Ижевск, ул. Татьяны Барамзиной, 34

²Удмуртский государственный университет, 426034 Россия, г. Ижевск, ул. Университетская, 1

В последнее время при разработке новых конструкционных материалов большое внимание исследователей уделяется биметаллическим композиционным материалам (БKM), которые могут сочетать в себе отличительные преимущества нескольких составляющих их металлов или сплавов. В результате БKM стали многообещающим выбором для применения в различных отраслях промышленности, включая электронику, связь и аэрокосмическую отрасль [1]. В этой связи особое внимание уделяется БKM на основе Mg и Al.

Магний и его сплавы благодаря своим благоприятным свойствам, включая высокую удельную прочность, удельную жесткость и отличную демпфирующую способность, разрабатываются и применяются как материалы для аэрокосмической отрасли. Однако присущие сплавам на основе Mg недостатки, такие как низкая формуемость и плохая коррозионная стойкость при комнатной температуре, связанные с плотноупакованной гексагональной (ГПУ) кристаллической структурой Mg, препятствуют более широкому внедрению магниевых сплавов. Напротив, сплавы Al, которые обладают гранцентрированной кубической (ГЦК) кристаллической структурой, демонстрируют превосходную коррозионную стойкость и формуемость при температуре окружающей среды, тем самым компенсируя недостатки магниевых сплавов и делая их более подходящими для промышленного применения. Поэтому БKM Mg/Al сочетают в себе легкость магниевых сплавов с высокой прочностью и коррозионной стойкостью сплавов Al, представляя значительный потенциал для различных применений. В результате синергетическое сочетание этих двух металлов стало основой при проектировании и инжиниринге новых материалов.

Важным этапом при создании БKM является создание металлургической переходной зоны и повышения прочности этой области. Ключевое различие между биметаллическими и монометаллическими изделиями заключается в существовании такой зоны на границе раздела разнородных материалов, что влияет на общие характеристики биметаллических изделий. Ширина и свойства переходной зоны в первую очередь определяются диффузионным поведением элементов вблизи границы раздела [2]. В то время как общие характеристики материала в значительной степени определяются средней концентрацией легирующих элементов, локализованные колебания концентраций элементов также могут влиять на механические свойства материала. Поэтому в работе

Всероссийская конференция

исследованы микроструктура и диффузионные процессы в композитах Al/Mg-Al, Al-Mg/Mg-Al, а также Al-Mg/Al-Mg-Mn, Mg-Al/Al-Mg-Mn и Zn-Al/Al-Mg-Mn

В качестве материала основы использовались пластины сплавов АМг3 и АМг6, вырезанные из листов с регламентируемым стандартом ГОСТ 21631 и слитки модельных сплавов $Mg_{66}Al_{34}$ и $Zn_{97.5}Al_{2.5}$, полученные в условиях высокотемпературного термического анализатора. Образцы получали в различных условиях. При пайке АМг3 сплавом $Mg_{66}Al_{34}$ нагрев проводили в атмосфере Ar (ОСЧ), после предварительного вакуумирования печи до 10^{-2} Па. До температуры $500^{\circ}C$ скорость нагрева составляла $10^{\circ}C/мин$, после чего образцы выдерживали в течение 10 мин и затем охлаждали с печью. Получение образцов при пайке АМг6 сплавом $Zn_{97.5}Al_{2.5}$ проводили в два этапа: сначала проводили механическое нанесение припоя (лужение) на поверхность пластин АМг6 при температуре $400^{\circ}C$, после чего систему быстро охлаждали ($v = 50-100^{\circ}C/мин$). На втором этапе полученные композитные образцы подвергали термической обработке: нагрев со скоростью $v = 50$ град/мин до $400^{\circ}C$, выдержках при этой температуре 1 и 2 мин и охлаждении со скоростью 10 град/мин до комнатной температуры.

Металлографический анализ показал, что микроструктура сплава $Mg_{66}Al_{34}$ при контактном плавлении с АМг3 не претерпевает существенных изменений. В зоне сплавления на границе контакта подложки и припоя не происходит образования эвтектической структуры, вместо этого наблюдается выделение последовательного ряда интерметаллидов системы Al-Mg. Однако самостоятельные исследования особенностей затвердевания сплавов Mg-Al в области эвтектики при изменении параметров получения показывают, что при некоторых условиях кристаллизации в них возможно образования метастабильных структур.

Исследование процессов контактного плавления сплавов АМг6 и $Zn_{97.5}Al_{2.5}$ показывает, что температуры $400^{\circ}C$ недостаточно для формирования плотного композита в процессе лужения. Это связано с наличием в структуре выбранного сплава крупных дендритов твердого раствора на основе Zn, которые плавятся при более высокой температуре. Несмотря на это при проведении последующей термообработки между припоем и подложкой наблюдается протекание интенсивных диффузионных процессов, приводящих к изменению их микроструктур на границе контакта.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 24-22-00370, <https://rscf.ru/project/24-22-00370/>

[1] Sun L., Li F., Zhang A.X., Zhang J.Y., Wang Z.Y., Synergistic Mechanism of Strengthening and Toughening of Tissue Regulation Response to Mg/Al Composite Laminates by Hard Plate Accumulative Roll Bonding // Mater. Sci. Eng. A, 2024. Vol. 892. P. 146105.

[2] Suresh K.S., Krishnamoorthi J., Ravisankar B., Balusamy V., Assessing quality of diffusion bonded joints with interlayer using ultrasonic/ultrasound // J. Mater. Process. Technol., 2017. Vol. 242. P. 139. 242(2017) 139.

Экспериментальное исследование и численное моделирование усталостной прочности металлических сплавов, полученных методом селективного лазерного плавления

А.Д. Никитин¹, И.С. Никитин¹

¹Институт автоматизации проектирования Российской Академии Наук, 123056 Россия, г. Москва, ул. 2-я Брестская, 19/18

В последние годы большой научный и промышленный интерес вызывают вопросы применения современных аддитивных технологий (АТ) для создания изделий сложной формы. Отмечается, что аддитивные технологии, в частности, селективное лазерное плавление (СЛП) позволяют производить элементы конструкций таких форм, которые невозможно получить традиционными методами обработки металлов давлением или литьем. При этом для некоторых изделий применение СЛП позволяет удешевить их производство. Однако, результаты исследования механических свойств материалов, полученных методами АТ, оказываются неоднозначными. Показано, что АТ материалы могут обладать существенной анизотропией механических свойств в зависимости от направления и стратегии печати. При этом в выделенных направлениях их квазистатические механические характеристики (модуль Юнга, предел текучести и прочности) могут превосходить механические свойства материалов, полученных традиционными методами. Однако, исследования циклической прочности СЛП материалов показывают существенное снижение их предела усталости [1] по сравнению с образцами, полученными литьем или обработкой давлением. В данной работе представлены результаты экспериментальных исследований циклической прочности СЛП материала AlSi10Mg в области больших долговечностей – при сверхмногоциклового усталости (СВМУ). Проведен анализ снижения уровня циклической прочности по сравнению с горячекатаным алюминиевым сплавом Д16Т. Проведено исследование морфологии поверхности излома СЛП образца при СВМУ нагружении с использованием электронного сканирующего микроскопа. Исследованы микромеханизмы усталостного разрушения порошкового алюминиевого сплава AlSi10Mg. Показано, что доминирующую роль в процессе усталостного СВМУ разрушения играют межслойные границы материала и характерные дефекты сплавления.

Для объяснения закономерностей формирования дефектов, приводящих к разрушению СЛП материала в области СВМУ, была в энтальпийной формулировке решена задача плавления [2] слоев порошкового алюминия AlSi10Mg и исследованы различные режимы лазерного плавления. В качестве параметров исследования выбраны мощность и скорость лазерного луча. Результаты математического моделирования сопоставлены с результатами экспериментального исследования по формированию единичных, линейных и многослойных треков в порошковом алюминии при различных мощностях и

Всероссийская конференция

скоростях лазерного луча. Показано, что математическое моделирование даёт хорошее совпадение с экспериментальными исследованиями в рабочем диапазоне параметров. Под рабочим диапазоном подразумеваются случаи регулярного плавления, при котором не наблюдаются эффекты «расплёскивания» ванн расплава. Нерегулярные режимы плавления заведомо приводят к формированию статистически дефектной, нерегулярной структуры и не желательны в практических приложениях.

Результаты математического моделирования зон плавления использованы для построения модели микроструктурного строения СЛП образца при различных скоростях и мощностях лазерного луча. Показано, что в зависимости от параметров лазерного луча могут формироваться как зоны повторного переплава, так и локальные области «недоплава», Рис.1. Полученные типы дефектов СЛП материала моделируются областями сниженных или повышенных значений модуля упругости.

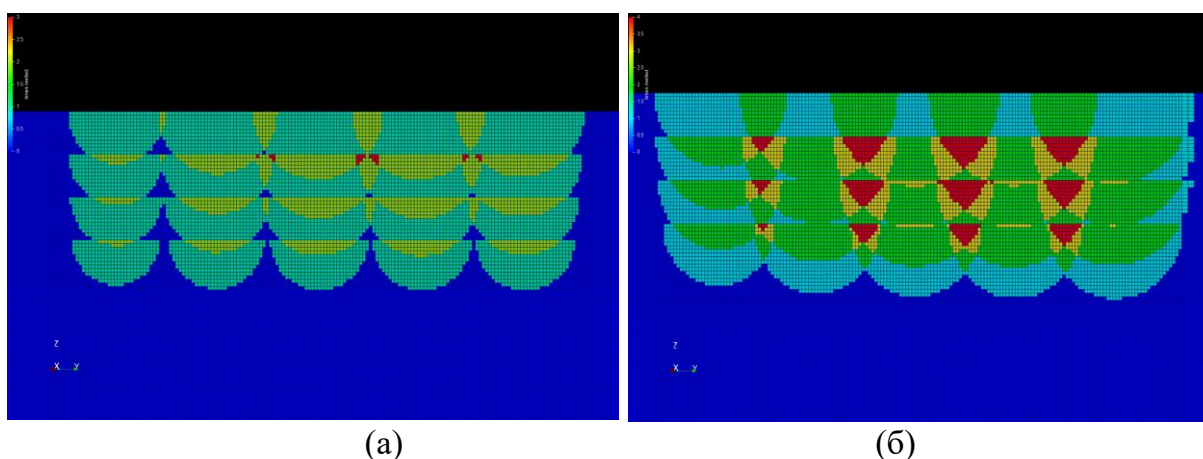


Рисунок 1. Результат математического моделирования процесса плавления порошка AlSi10Mg при различных режимах печати: (а) скорость=1000 мм/с, мощность=50 Вт, формирование недоплавов (б) скорость =500 мм/с, мощность 50=Вт, формирование переплавов.

Для оценки усталостной прочности и долговечности таких СЛП образцов использована мультирежимная двухкритериальная модель усталостного разрушения [3, 4]. Показано, что усталостная прочность СЛП материала существенно зависит от типа дефекта: при «переплавах» усталостная долговечность сокращается в 2 – 3 раза; при «недоплавах» снижение усталостной долговечности может достигать порядка и более.

Исследование поверхностей излома алюминиевого сплава AlSi10Mg, полученных при высокочастотном нагружении, показывают наличие выраженных межслойных разрушений, а также зарождение трещины от дефектов типа «непроплав» Рис.2. На рисунке 2-б представлена область материала с ярко выраженными непроплавленными порошинками. Область дефекта имеет линейный размер порядка 50 на 50 микрометров. Характерная строчечность морфологии поверхности излома указывает на направление распространения усталостной трещины в разные стороны от выявленного дефекта.

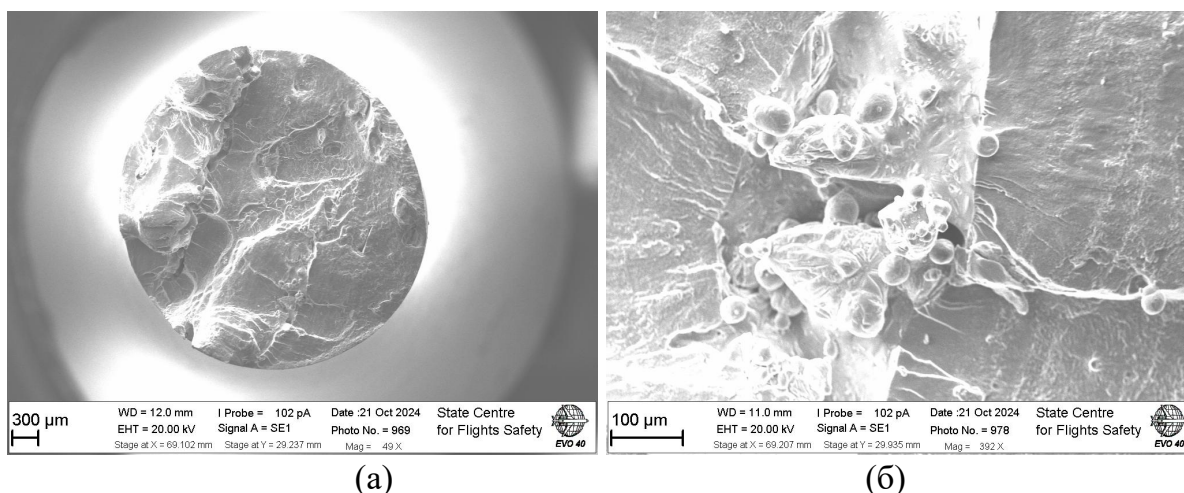


Рисунок 2. Поверхность излома СЛП образца из AlSi10Mg в области СВМУ (а) и область зарождения усталостной трещины (б).

В результате проведенных исследований показано, что усталостная прочность СЛП образцов при высокочастотном нагружении существенно ниже, чем прочность аналогичных образцов, полученных традиционными методами. Проведены экспериментальные исследования усталостного разрушения алюминиевого сплава AlSi10Mg в области сверхмногоциклового усталости. Метод СВМУ испытаний может быть использован для экспресс анализа усталостной прочности структурно-неоднородных материалов и исследования микромеханизмов разрушения. Предложена связанная математическая модель определения усталостных характеристик СЛП материалов в зависимости от технологических параметров лазерного луча (скорости, мощности и шага). Результаты математического моделирования показывают хорошее совпадение с экспериментальными данными.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФ проект № 23-19-00640.

- [1] Ильиных А.В., Паньков А.М., Лыкова А.В. Многоцикловая усталость при растяжении и кручении алюминиевого сплава AlSi10Mg, полученного методом селективного лазерного сплавления // Вестник ПНИПУ. Механика, 2024. Т. 4. С. 14 – 25.
- [2] Nikitin I.S., Burago N.G., Nikitin A.D., Stratula B.A. Fatigue Strength under High Frequency Loading of Materials Produced by Selective Laser Melting// Mech. Solids. 2024. Vol. 59. No 5. Pp. 2789-2805.
- [3] Никитин И.С., Бурого Н.Г., Никитин А.Д. Повреждаемость и усталостное разрушение элементов конструкций в различных режимах циклического нагружения // Прикладная математика и механика 2022. Т. 86. Вып. 2. С. 276-290.
- [4] Бурого Н.Г., Никитин И.С., Никитин А.Д., Стратула Б.А. Численное моделирование усталостного разрушения на основе нелокальной теории циклической повреждаемости // Математическое моделирование. 2024. Т. 36. №. 3. С. 3-19.

Новые теоретические и экспериментальные данные о затвердевании как двухстадийном процессе

И. А. Иванов¹, А. В. Дуб², В. В. Дрёмов³, К. Э. Купер⁴, М. Д. Кривилев⁵,
Е. Б. Черепецкая⁶, В. С. Дуб¹

¹Акционерное общество «Научно-производственное объединение «Центральный научно-исследовательский институт технологии и машиностроения», 115088 Россия, г. Москва, ул. Шарикоподшипниковская, 4

²Акционерное общество «Наука и инновации», 115035 Россия, г. Москва, Кадашевская набережная, 32/2, с. 1

³Федеральное государственное унитарное предприятие «Российский Федеральный Ядерный Центр – Всероссийский научно-исследовательский институт технической физики имени академика Е.И. Забабахина», 456770 Россия, г. Снежинск, Челябинская область, ул. Васильева, 13, а/я 245

⁴Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт ядерной физики им. Г.И. Будкера Сибирского отделения Российской академии наук, 630090 Россия, г. Новосибирск, пр-т Академика Лаврентьева, 11

⁵Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Удмуртский государственный университет», 426034 Россия, г. Ижевск, ул. Университетская, 1

⁶Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС», 119049 Россия, г. Москва, Ленинский пр-т, 4, стр. 1

Процесс кристаллизации металла является решающим этапом большинства технологий получения металлоизделий, определяющим их качество и служебные свойства. Единственным реальным фактором влияния на кинетику кристаллизации является воздействие на теплоотвод от поверхности затвердевающего объекта. Эффективность такого решения во многих случаях является абсолютно недостаточной, тем более, если речь идет о затвердевании достаточно больших объемов/сечений металла или наплавных процессах (переплавные процессы, сварка, аддитивные технологии). Поэтому исследование физических аспектов процесса кристаллизации, возможности для которых дают новые аналитические методы, направленные на поиск новых, управляющих затвердеванием воздействий, является актуальной научно-технической задачей, решение которой позволит обеспечить изотропию заданных физико-химических свойств заготовок для металлоизделий.

Классическая теория кристаллизации рассматривает этот процесс как последовательность двух стадий: зарождения частиц твердой фазы критического размера, зависящего от величины переохлаждения, и последующий рост твердой фазы, принимая, что он происходит путем присоединения отдельных атомов из жидкой фазы к зародышу в наиболее энергетически выгодном месте. Тем не менее, такой подход в полной мере не может объяснить экспериментальных данных, прежде всего высокие фактические скорости кристаллизации расплавов

Всероссийская конференция

(от 10^{-2} см/с до 5 м/с), превышающие на несколько порядков теоретические оценки.

Такие значения скорости кристаллизации могут быть достигнуты лишь при реализации следующих механизмов: или одновременным присоединением большого числа частиц к уже сформировавшейся твердой фазе, или присоединением к твердой фазе агрегатов частиц, то есть кластеров с близким к кристаллическому состоянию строением. Механизм формирования твердой фазы с использованием кластеров называют кластерным. Именно этого механизма роста мы будем придерживаться в дальнейшем. Кластеры можно определить, как структуры с более низким, по сравнению с жидкой фазой, уровнем симметрии, которые возникают в результате самоорганизации (упорядочения структуры) в пограничном слое. При этом размер таких кластеров может достигать нескольких десятков ангстрем [7].

На микроуровне при кристаллизации расплава рассматриваются три области: закристаллизовавшаяся область твердой фазы, переходная межфазная область, в которой металл находится в особом состоянии в виде кластеров, и область жидкой фазы. Наличие локальной упорядоченности в жидких металлах (в том числе расплавах на основе железа) косвенно подтверждается анализом полученных экспериментального радиальных функций распределения [1,2]. Более того, оказалось, что в расплавах присутствуют области различных типов упорядоченности, включая икосаэдрическую. Интересная идея высказана авторами [3], которые предположили наличие перед фронтом затвердевания перколяционного икосаэдрического кластера, “армирующего” жидкую фазу и препятствующего затвердеванию и позволяющего переохлаждать расплав.

Следующим важным положением кластерного механизма роста является стохастический подход [4-6], основная идея которого заключается в вероятностном описании присоединения кластеров к твердой фазе при ее росте, что позволяет в полной мере объяснить перераспределение примеси перед границей фронта. Можно предположить, что физико-химические характеристики кластеров, такие как индивидуальные свойства (аккомодационная совместимость), кинетические характеристики (скорость и направление движения) и условия теплоотвода оказывают влияние на морфологию формирующейся твердой фазы. Наиболее интересным результатом оказалось влияние индивидуальных свойств на динамику роста кристаллической структуры, так как расчеты получили экспериментальное подтверждение. Следующим шагом стало предположение о том, что не только состав кластера влияет на вероятность его присоединения к твердой фазе, но и его структура. Например, если материал кристаллизуется в ОЦК, то вероятность присоединения ОЦК кластера должна быть выше, чем кластера, имеющего другую структуру. Следовательно, чем больше концентрация ОЦК кластеров, тем выше скорость затвердевания. Таким образом, меняя структурный состав предкристаллизационного слоя, можно управлять скоростью роста твердой фазы, что и является направлением в поисках решения сформулированной выше задачи. Важно отметить, что кластерный механизм позволил применить к формирующейся структуре фрактальную параметризацию [6] и, тем самым, подтвердить известные фрактальные размерности дендритной структуры. Новым в данном случае оказывается

Всероссийская конференция

классификация дендритной структуры как полноценной фрактальной, а не псевдофрактальной.

Так как именно на кластеры будет направлено внешнее воздействие, то необходимо изучить их характеристики (размер, энергия, зарядовое состояние, механический и магнитный моменты, спектры вращательных и поступательных движений и пр.).

Учитывая нано размер кластеров, для теоретического изучения этих объектов можно применить современные инструменты цифрового материаловедения, такие как расчеты из первых принципов и моделирование с использованием молекулярной динамики. С использованием указанных выше инструментов, были проведены серии расчетов по изучению затвердевания расплавов на основе железа, включая оценку распределения кластеров по размерам в зависимости от теплофизических условий (температуры, степени переохлаждения), энергетического состояния и анизотропии распределения плотности при наличии локального порядка в расплаве, а также были изучены спектры поступательного и вращательного движений кластеров. На основании проведенных расчетов можно сделать следующие выводы:

- 1) Наличие любого локального порядка в расплаве энергетически выгодно, при этом максимальное снижение энергии приходится на икосаэдрический порядок и кластеры, имеющую схожую с ОЦК структуру, который приблизительно составляет $-0,30$ и $0,20$ эВ/атом, соответственно.
- 2) Наличие локального порядка в расплаве существенно меняет распределение электронной плотности, что можно объяснить тем, что энергетические уровни вытесняются за пределы кластеров, что приводит к появлению положительно заряженных областей. Так, заряд кластеров, имеющих икосаэдрическую и ОЦК структуру при наличии в центре атома, имеющего плохую аккомодационную совместимость с железом (например, сера и фосфор), может составлять величину порядка единиц $+e$.
- 3) Доля кластеров (областей, обладающих локальным ОЦК/ГЦК порядком) при температуре $T_{пл}$ составляет величину не менее 1% и растет до величин не менее 4% при температуре, равной $0,8T_{пл}$.
- 4) Средний размер кластера составляет $\sim 20-25$ ат. при $T_{пл}$ и $\sim 50-80$ ат. при $0,8T_{пл}$.
- 5) Анализ спектров поступательного и вращательного движения показал наличие линий в спектре $\sim 10^{10}$ и $\sim 10^{12}$ Гц, экспериментальное обнаружение которых позволит получить прямые доказательства кластерного механизма роста твердой фазы.

Анализ функции радиального распределения атомов Fe-Cr-Ni системы после обработки дифракционных данных, полученных с использованием синхротронного излучения и на основе теоретического исследования, показал отсутствие противоречий между теорией и экспериментом, а также дал верхнюю границу доли областей локального порядка, которая составляет $\leq 10\%$.

В настоящий момент работа над проектом продолжается, и основная задача, которую ставят перед собой авторы, состоит в получении количественных достоверных данных, подтверждающих характеристики областей локальной упорядоченности в расплавах на основе железа.

Всероссийская конференция

Выполнение работы осуществляется, в том числе, в рамках комплексной программы «Развитие техники, технологий и научных исследований в области использования атомной энергии в Российской Федерации на период до 2024 года» Госкорпорации «Росатом».

- [1] Inui M., Maruyama K., Kajihara Y., Nakada M. Icosahedral ordering in liquid iron studied via x-ray scattering and Monte Carlo simulations. // PHYSICAL REVIEW B, 2009. Vol. 80. P. 180201.
- [2] Белащенко Д.К. // Компьютерное моделирование жидких и аморфных веществ: Научное издание, М.: МИСиС (2005). С. 408.
- [3] Вахмин С.Ю., Косилов А.Т. Кластерный анализ атомной структуры железа в процессе закалки из жидкого состояния // Пожарная безопасность: проблемы и перспективы, 2013. № 1 (4). С.270-272.
- [4] Дуб В.С., Макарычева Е.В., Колпишон Э.Ю., Дуб А.В. Влияние кремния и марганца на воздействие фосфора в сталях для крупных поковок. Современные проблемы металлургического производства // Сборник трудов международной научно-практической конференции. Волгоград, РПК «Политехник», 2002. С. 300-304.
- [5] Дуб В.С., Копелиович Д.Д., Панкратов О.С., Дуб А.В. Имитационное моделирование формирования элементов структуры при затвердевании. Процессы разливки, модифицирования и кристаллизации стали и сплавов // Труды II всесоюзной конференции, 1990. Ч. 1. С. 47-50.
- [6] Иванов И.А., Дуб А.В. Применение фрактальной параметризации для моделирования процессов формирования первичной кристаллической структуры металлов // Металлы, 2005. №4. С. 17-25.
- [7] Дуб А.В. Роль расплава при затвердевании металлов // Труды седьмого конгресса сталеплавильщиков, М.: Черметинформация, 2003. С. 637-642.

Влияние экстремальных (термобарических) воздействий на структуру и свойства сплавов Al-ПМ-РЗМ при охлаждении их расплавов

С. Г. Меньшикова

Удмуртский федеральный исследовательский центр УрО РАН, 426067 Россия, г. Ижевск, ул. Татьяны Барамзиной, 34

Прогресс в понимании процессов структурообразования, происходящих в расплавах типа Al-ПМ-РЗМ (ПМ-переходный металл, РЗМ-редкоземельный металл) в области эвтектики, а также в изучении влияния экстремальных воздействий (высоких давлений, температур и скоростей охлаждения) на процессы их затвердевания имеет высокую научную значимость и актуальность.

Цель работы - выявление закономерностей затвердевания и структурообразования в сплавах выбранной системы при быстром охлаждении расплавов под высоким давлением.

Рассмотрены основные типы камер высокого давления, применяемых в России и за рубежом, а также их экспериментальные возможности [1]. Изучены структура и свойства сплавов на основе алюминия бинарных систем Al-ПМ, а также бинарных и многокомпонентных стеклообразующих сплавов Al-РЗМ, Al-ПМ-РЗМ при быстром затвердевании их высокотемпературных расплавов в камере высокого давления типа «тороид». Исследована возможность образования новых фаз в сплавах.

Диапазон температур: от температуры ликвидуса до 2000 К. Диапазон давлений: от атмосферного до 10 ГПа. Схема эксперимента: установление давления → импульсный нагрев → выдержка при заданных давлении и температуре → быстрое охлаждение без сброса давления до комнатной температуры → снижение высокого давления до атмосферного. Скорость охлаждения ~ 1000 град/с.

В зависимости от режима получения в сплавах либо меняются механизмы кристаллизации расплава, либо формируются аномально пересыщенные твердые растворы. При давлениях выше 7 ГПа и температурах порядка 1800 К в сплавах, содержащих РЗМ, формируются новые метастабильные соединения, которые длительное время сохраняются в нормальных условиях. Все образцы однородные, плотные, не обнаружено пор и усадочных раковин. Структура мелкодисперсная с высокими механическими свойствами. Высокое давление повышает стеклообразующую способность сплавов.

Благодарим Академика РАН, д.ф.-м.н. В.В. Бражкина за содействие в получении образцов в камере типа «тороид» (ИФВД РАН, г. Москва).

[1] Циклис Д.С. // Техника физико-химических исследований при высоких и сверхвысоких давлениях, Москва (1976). 432 с.

К вопросу о диспергировании и коагуляции при разделении фаз в расплавах Co-Cu

О. А. Чикова

Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, 620002, Россия, г. Екатеринбург, ул. Мира 19

Особенностью фазовой диаграммы системы Cu-Co является наличие метастабильной зоны смешения: при достаточно глубоком переохлаждении расплав Co-Cu разделяется на две жидкости: богатую кобальтом и богатую медью [1]. Разделение фаз происходит за счет одновременного зародышеобразования, коалесценции и диффузии [2] и определяет условия кристаллизации сплавов Cu-Co [3]. Микроструктура закристаллизованных образцов Co-Cu содержит сферолиты одной фазы, внедренные в матрицу другой; сферолиты в сплавах, содержащих более ~60 ат. % Cu, затвердевают из расплава на основе Co, а в сплавах с содержанием менее ~40 ат. % Cu – из расплава на основе Cu [4]. Микроструктура закристаллизованных образцов определяется морфологией, характером сегрегации и распределением по размерам капель, богатых Co, при этом миграция капель контролируется силой Марангони и силой Стокса [5]. После разделения фаз в переохлажденном расплаве Co-Cu термодинамически возможны процессы как самопроизвольного диспергирования, так и коагуляции частиц.

Используя выражение, полученное Ребиндером для предельного значения межфазного поверхностного натяжения, при котором самопроизвольное диспергирование становится термодинамически выгодным:

$$\sigma_{1-2} = \frac{(10-15)kT}{r^2} \quad (1)$$

для расплавов Co-Cu оценили величину межфазного поверхностного натяжения на границах дисперсных частиц (Co85Cu15) и расплава (Co10Cu90) в предположении полного смачивания $\sigma_{1-2} = 0.22 \frac{\text{Н}}{\text{м}}$ [6]. Согласно критерию Ребиндера (1) если принять $r=10$ нм, то получим $\sigma_{1-2} \sim 10^{-3} \frac{\text{Н}}{\text{м}}$. Таким образом, возможность самопроизвольного диспергирования зависит от соотношения размеров диспергируемых частиц и величины межфазного натяжения на их границах. Оценка термодинамической устойчивости дисперсных частиц (Co85Cu15) в среде (Co10Cu90) возможна и в формализме Гиббса по уравнениям, предложенным Г. Каптаем для регулярного раствора. [7]. Обращает внимание, что при радиусе дисперсной частицы $r > 5$ нм избыточная свободная энергия переходного слоя на границе частицы и среды имеет отрицательное значение, что согласно [7] является условием самопроизвольного диспергирования системы, т.е. дисперсные частицы с радиусом $r > 5$ нм термодинамически неустойчивы.

Кинетику коагуляции частиц в переохлажденном расплаве Co-Cu после разделения фаз возможно описать на основе представлений теории Лифшица-Слезова-Вагнера (теории LSW). Теория LSW соответствует объемной доле, приближающейся к нулю, и предсказывает, что когда скорость укрупнения

Всероссийская конференция

контролируется диффузией растворенного вещества через матрицу, скорость укрупнения определяется выражением [8]:

$$\bar{r}^3 - \bar{r}_0^3 = kt, \quad \text{где } k = \frac{8X_0\sigma V_m^2 D}{9RT} \quad (2)$$

Теория LSW основана на предположении, что нет перекрытия полей диффузии вокруг частиц и взаимодействия между частицами. Известен ряд модификаций теории LSW путем включения эффекта объемной доли частиц.

Модифицированная модель столкновения Лифшица-Слезова (модель LSEM) [9] предполагает, что столкновение двух частиц приводит к мгновенному слиянию с образованием более крупной частицы, объем которой равен сумме объемов сталкивающихся частиц. Модифицированная модель Брейлсфорда-Винблатта (модель BWEM) [10] представляет собой комбинацию теории LSEM и модели Брейлсфорда-Винблатта, где утверждается, что перенос растворенного вещества между частицами может быть описан статистически усредненными показателями диффузии в эффективной однородной среде с потерями. Поток растворенного вещества связан со значением скорости потерь на частицу, которая зависит от объемной доли. Voorhees и Glicksman [11] разработали статистическую теорию среднего поля (GV-модель), которая описывает среднее поведение ансамбля частиц, диспергированных в матрице с определенной объемной долей. Движущей силой коагуляции (укрупнения) является профиль концентрации растворенного вещества вокруг частиц, который задается уравнением Гиббса-Томсона (идеальный раствор и нулевая растворимость):

$$\Delta X = X - X_0 = X_0 \frac{2\sigma V_m}{rRT} \quad (2)$$

С учетом не идеальности раствора растворимость растущих частиц изменяется на величину, которую Chaix et al. [12] назвали термодинамическим фактором g :

$$\frac{k}{k_{LSW}} = \frac{1}{(1-2\beta X_m X_p)} \frac{1-X_m}{(1-X_m-X_p)(1-X_p)} = g \quad (3)$$

Параметр взаимодействия β в уравнении (3) можно получить из выражения для избыточной свободной энергии:

$$G^E = RT(X_1 \ln \gamma_1 + X_2 \ln \gamma_2) = \Omega X_1 X_2 \quad ; \quad G_1^E = RT \ln \gamma_1 = \Omega X_2^2 \quad ; \quad \frac{d \ln \gamma_1}{d X_2} = 2 \frac{\Omega}{RT} X_2 = 2\beta X_2 \quad \text{и} \quad 1 - 2\beta X_1 X_2 = 1 - \frac{X_1}{RT} \frac{d G_1^E}{d X_2} = 1 + \frac{X_1 X_2}{RT} \frac{d^2 G^E}{d X_1^2} = 1 + X_1 \frac{d \ln \gamma_1}{d X_1} \quad (4)$$

Свободная энергия смешения позволяющая оценить параметр взаимодействия β обычно представляется в виде:

$$G^E = X_1 X_2 [a_0 + a_1 A + a_2 A^2 + a_3 A^3] - B \quad (5)$$

Применение теоретических моделей, включающих учет объемной доли дисперсных частиц и термодинамический фактор (LSW, LSEM, GV и BWEM), для изучения кинетики коагуляции частиц при жидкофазном спекании сплавов Co-Cu позволило оценить значения межфазной энергии на единицу площади между частицей и матрицей - $\sigma_{1-2} = 1008, 630, 393$ и $346 \frac{\text{мН}}{\text{м}}$ [13], что значительно выше опытных данных $\sigma_{1-2} = 234 \frac{\text{мН}}{\text{м}}$ [14]. Показано, что кинетика укрупнения частиц Co при жидкофазном спекании сплава Cu-30 мас.% Co соответствовала соотношению (2). Сильное магнитное поле заметно усиливало взаимодействие и коалесценцию частиц Co, что приводило к образованию цепочечных структур при

Всероссийская конференция

температурах ниже температуры Кюри [15]. Обращает внимание близость оценки межфазного поверхностного натяжения для случая самопроизвольного диспергирования $\sigma_{1-2} = 0.22 \frac{H}{M}$ [6] и случая коагуляции частиц $\sigma_{1-2} = 234 \frac{MH}{M}$ [14], что позволяет предположить установления динамического равновесия в процессе микроструктурной эволюции системы.

- [1] Nishizawa T., Ishida K. The Co-Cu (Cobalt-Copper) system // Bull. Alloy phase diagr., 1984. Vol. 5. P. 161–165.
- [2] Guo F., Lu T., Qin J., Zheng H., Tian X. Abnormal resistivity behavior of Cu–Ni and Cu–Co alloys in undercooled liquid state // Phys. B, 2012. Vol. 407. P. 4108–4113.
- [3] Yang W., Chen S.H., Yu H., Li S., Liu F., Yang G.C. Effects of liquid separation on the microstructure formation and hardness behavior of undercooled Cu–Co alloy // Appl. Phys. A, 2012. Vol. 109. P. 665–671.
- [4] Munitz A., Abbaschian R. Microstructure of Cu-Co alloys solidified at various supercoolings // Metall Mater Trans A, 1996. V. 27. P. 4049–4059.
- [5] Zhao D., Gao J. Liquid phase separation in undercooled Cu–Co alloys under the influence of static magnetic fields // Philosophical Transactions A, 2019. Vol. 377. P. 20180207.
- [6] Chikova O., Tsepelev V., Shmakova K. On Spontaneous Dispersion as a Cause of Microstratification of Metal Melts // Materials, 2024/ Vol. 17(10), P. 2215.
- [7] Kaptay G. On the negative surface tension of solutions and on spontaneous emulsification // Langmuir, 2017. Vol. 33. No. 40. P. 10550–10560.
- [8] Lifshitz I.M., Slyozov V.V. The kinetics of precipitation from supersaturated solid solutions // Journal of Physics and Chemistry of Solids, 1961. Vol. 19. P.35-50
- [9] Davies C.K., Nash P., Stevens R.N. The effect of volume fraction of precipitate on ostwald ripening // Acta Metallurgica, 1980. Vol.28. P.179-189.
- [10] Tokuyama, M., & Kawasaki, K. Fractal dimensions for diffusion-limited aggregation // Physics Letters A, 1984. Vol. 100. P.337-340
- [11] Voorhees P. W., Glicksman M. E. Solution to the multi-particle diffusion problem with applications to Ostwald ripening—II. Computer simulations // Acta metallurgica, 1984. Vol. 32(11). P. 2013-2030.
- [12] Chaix J.M., Eustathopoulos N., Allibert C.H. Ostwald Ripening Growth Rate for Nonideal Systems with Significant Mutual Solubility - I. Binary Systems // Acta metall., 1986. Vol. 34. P. 1589–1592.
- [13] Sung Chul Yang, Nash P. Application of thermodynamic factors in analysis of particle coarsening kinetics in Fe–Cu and Co–Cu // Materials Science and Technology, 1988. Vol. 4(10). P. 860-866
- [14] Servi I.S., Turnbull D. Thermodynamics and kinetics of precipitation in the copper-cobalt system // Acta Metallurgica, 1966. Vol. 14. P. 161-169.
- [15] Zhang S., Liu T., Miao L. et al. Effect of temperature on Co particle coarsening behavior of Cu-Co alloy during liquid phase sintering in high magnetic field // Materials Today Communications, 2025. Vol. 42. P.111478.

Особенности формирования морфологии и структурно-фазового состава поверхностных слоев титанового сплава ВТ6 в зависимости от температуры ионно-плазменного азотирования

В.Л. Воробьёв, В.С. Гладышева¹, С.Г. Быстров, П.В. Быков, В.Я. Баянкин

¹Удмуртский федеральный исследовательский центр Уральского отделения РАН, 426067 Россия, г. Ижевск, ул. Т. Барамзиной, 34

Сплавы титана широко применяются в различных областях техники из-за их высокой прочности, пластичности и низкой биотоксичности. Актуальной является проблема разработки технологий модификации поверхности титановых сплавов для повышения их твердости, износостойкости, коррозионной стойкости и биосовместимости [1, 2]. Одним из широко применяемых методов модификации титановых сплавов является ионно-плазменная обработка их поверхности [3,4], а также облучение потоками ионов N^+ [5].

В данной работе методами атомно-силовой микроскопии, рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии и рентгеноструктурного анализа исследованы особенности формирования морфологии поверхности, химического и фазового состава поверхностных слоев и атомно-кристаллической структуры при ионно-плазменной обработке сплава Ti-6Al-4V в плазме тлеющего разряда ионов N^+ без нагрева и с нагревом образцов до температур 300 °С, 500 °С и 700 °С. Время обработки составляло 1 час.

Установлено, что поверхность титанового сплава ВТ6, обработанного в плазме ионов N^+ с нагревом образцов до 500 °С и 700 °С, состоит из блоков округлой формы (рис.1). Предполагается, что данная морфология поверхности формируется в результате образования в поверхностных слоях образцов нитридов титана Ti_2N и TiN , синтез которых приводит к увеличению параметров шероховатости поверхности Ra и Rz.

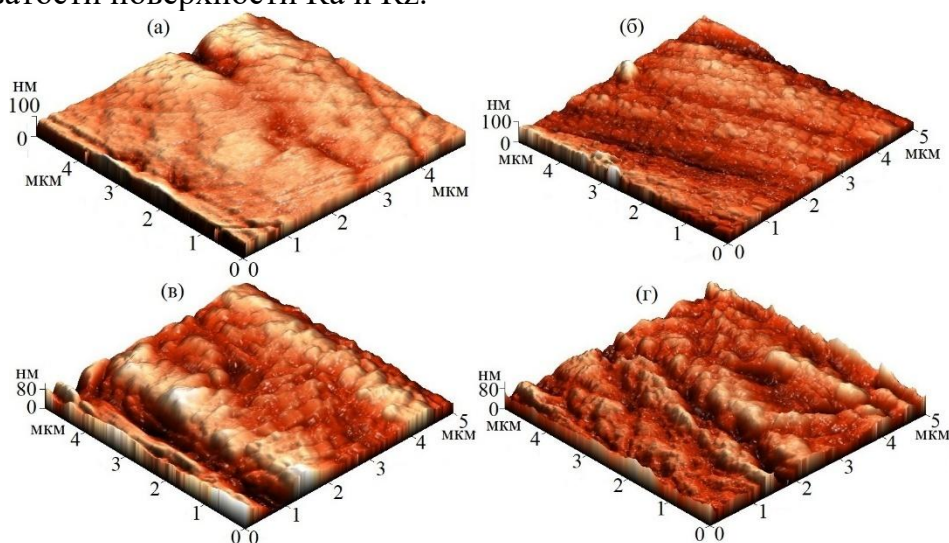


Рис. 1. АСМ изображения морфологии поверхности исследуемых образцов: (а) – исходный образец; (б) – плазма N^+ с нагревом образцов до 300 °С; (в) – плазма N^+ с нагревом образцов до 500 °С; (г) – плазма N^+ с нагревом образцов до 700 °С.

Всероссийская конференция

Показано, что при азотировании сплава ВТ6 в плазме тлеющего разряда без нагрева и с нагревом образцов до 300 °С наблюдается незначительное (до ~ 15 ат.%) насыщение азотом поверхностных слоев, что обусловлено низкой диффузионной подвижностью азота при данных температурах и процессами окисления компонентов сплава.

При более высоких температурах азотирования 500 °С и 700 °С происходит насыщение поверхности азотом до концентраций ~ 35 ат.%, сопровождающееся образованием нитридов титана Ti_2N и TiN , что обусловлено преобладающей ролью диффузионных процессов в формировании поверхностных слоев в данных условиях обработки.

Ионно-плазменное азотирование при наибольшей из выбранных температур обработки (700 °С) приводит к увеличению микротвердости образцов в 1,7 раза (рис. 2).

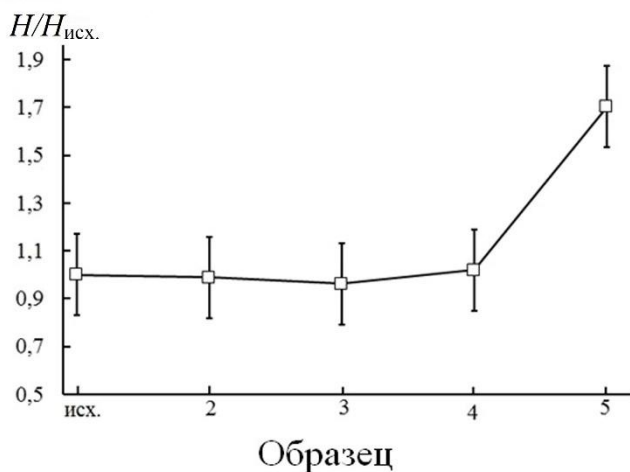


Рис. 2. Относительное изменение микротвердости образцов титанового сплава ВТ6 в результате обработки в плазме ионов N^+ без нагрева (2) и с нагревом образцов до температур 300 °С (3), 500 °С (4) и 700 °С (5).

На основании проведенных исследований предполагается, что формирование тонких приповерхностных слоев (~ 20 нм) при обработке в плазме азота без нагрева и с нагревом до 300 °С определяется процессами окисления компонентов сплава, а при обработке с нагревом до 500 °С и 700 °С – процессами диффузии азота.

Проведенные исследования показывают возможность целенаправленной модификации морфологии, механических свойств, химического и фазового состава поверхности и поверхностных слоев сплава ВТ6 путем обработки в плазме ионов N^+ в мягких условиях (при температурах до 700 °С).

Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования РФ № 124021900017-1.

Исследования выполнены с использованием оборудования ЦКП «Центр физических и физико-химических методов анализа, исследования свойств и характеристик поверхности, наноструктур, материалов и изделий» УдмФИЦ УрО РАН.

- [1] Bai H., Zhong L., Kang L., Liu J., Zhuang W., Lv Z., Xu Y. A review on wear-resistant coating with high hardness and high toughness on the surface of titanium alloy // *Journal of Alloys and Compounds*. 2021. Vol. 882. P. 160645.
- [2] Liu X., Chu P., Ding C. Surface modification of titanium, titanium alloys, and related materials for biomedical applications // *Materials Science and Engineering: R: Reports*. 2004. Vol. 47. P. 49–121.
- [3] Поболь И.Л., Олешук И.Г., Дробов А.Н., Фун С., Лиин В. Исследование формирования упроченных слоев на титановых сплавах методом ионноплазменного азотирования // *Вестник Национальной академии наук Белоруссии. Серия физико-технических наук*. 2019. Т. 64. №1. С. 25–34.
- [4] Zhevtun I.G., Gordienko P.S., Yarusova S.B., Silant'ev V.E., Yudakov A.A. Producing a microporous structure on titanium alloys by means of plasma surface treatment // *Protection of Metals and Physical Chemistry of Surfaces*. 2017. Vol. 53. P. 100–104.
- [5] Vorobyev V.L., Bykov P.V., Bystrov S.G., Kolotov A.A., Bayankin V. Ya. The effect of the chemical activity of the implanted element to metal alloy components on the formation of surface layers under ion irradiation // *Diagnostics, Resource and Mechanics of materials and structures*. 2023. Vol. 3. P. 29–43.

Системное моделирование литой микроструктуры стали 110Г13Л

Добош Л.Ю.¹, Феоктистов Н.А.², Голод В.М.¹

¹ Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, 195251, Россия, г. Санкт-Петербург, ул. Политехническая, д.29, литера Б.

² Магнитогорский политехнический университет им. Г.И. Носова, 455000, Россия, г. Магнитогорск, пр. Ленина, д.38.

Не секрет, что комплекс механических и эксплуатационных свойств литых изделий определяется параметрами их микроструктуры. Агрегатная структура, формирующаяся при затвердевании литейных сплавов, а также ее неоднородность, являются наиболее серьезным затруднением для актуального прогнозирования и – соответственно – управления литейными процессами. Говоря о дендритной структуре, нельзя не подчеркнуть, что морфологическая сложность дисперсной системы стволов и ветвей дендритов связана с тем, что происходит непрерывное изменение (возникновение и растворение) в результате коалесценции боковых ветвей кристаллизующегося сплава. Растущие дендриты впоследствии срастаются и образуют зерна макроструктуры отливок, а в междендритных пространствах располагаются различные элементы структуры.

Обзор литературы показывает, что на сегодняшний день нет однозначного мнения по поводу того, какой именно параметр структуры литого металла наиболее полно позволяет оценить его механические свойства (предел прочности, удлинение), размеры пор – расстояния между ветвями дендритов (λ_1 и λ_2) [1] или размеры литого зерна [2]. Используемый комплексный подход ориентирован на оценку структурной неоднородности металла и выявление корреляции между сопряженными структурно-фазовыми процессами развития дендритной структуры с последующим переходом к этапу зерновой коалесценции.

Рассматриваемое исследование ориентировано на выявление взаимосвязи и взаимовлияния коалесценции зерен и дендритов, поскольку существующие модели роста зерна (рис. 1) не дают адекватной картины зерновой коалесценции, вследствие чего необходима радикальная корректировка представлений о сопряженном механизме этапов дендритной и зерновой эволюции при кристаллизации.

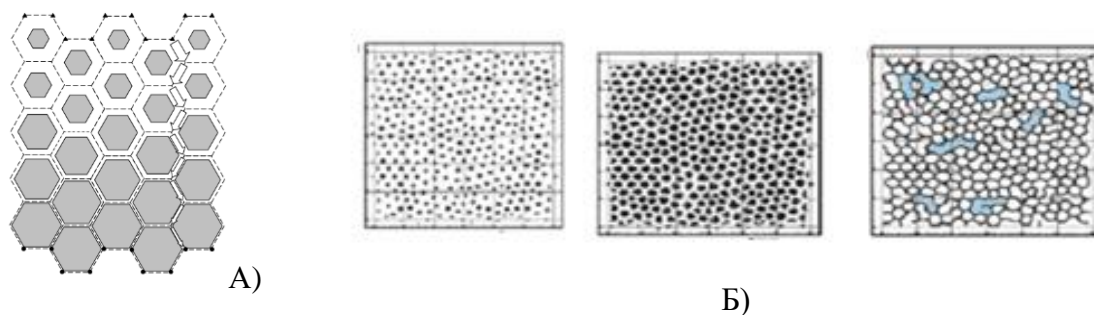


Рисунок 1. Экспериментальные схемы затвердевания расплавов

Всероссийская конференция

в ходе непрерывного преобразования симметричных зерен (А) или интенсивного неупорядоченного массива мелких зерен (Б) [3].

Проблема структурной диагностики кристаллизации литейных сплавов связана с системным характером накопившихся нерешенных задач по анализу закономерностей формирования мезомасштабной дендритно-зерновой структуры. Подавляющее большинство работ по оценке и прогнозу расстояний между осями дендритов или размерами зерен основаны на анализе среднестатистической величины исследуемого параметра, что является лишь вероятностной оценкой прогнозируемого результата [3]. При этом возможно рассчитать среднюю величину параметра микроструктуры (например, междоузльных промежутков) или оценить аналогичную характеристику на основе металлографического анализа экспериментальных образцов (табл. 1). Однако, этой информации недостаточно для комплексной оценки структурной неоднородности. Получаемые в ходе расчетов величины структурных параметров характерны только для выделенного локального мезообъема. Поэтому так важно объединить статистические результаты мезомасштабного микроструктурного анализа с моделированием кинетики кристаллизации сплавов.

Таблица 1. Сравнительная характеристика условий затвердевания дендритной и зерновой композиции

	Дендриты			Зерна	
Скорость охлаждения (К/с)	1.9	25.0	Скорость охлаждения (К/с)	1.9	25.0
Интенсивность кристаллизации (мкм):			Интенсивность кристаллизации (мкм):		
*минимальная	23.9	14.5	*минимальная	26.8	24.4
*средняя	68.0	26.5	*средняя	233.7	113.0
*максимальная	121.5	45.2	*максимальная	1635.6	658.0

Исследования стали 110Г13Л (рис. 2) показывают [3], что количественно охарактеризовать структуру можно за счет оценки соотношения мезомасштабных дендритных (121.5 мкм) и зерновых (1635.6 мкм) структур (табл. 1). Пристальное внимание к деталям структуры стали 110Г13Л позволяет указать в ней ряд особенностей, играющих важную роль при выборе направлений дальнейшего развития методики исследования.

Выявленная микроструктура отражает сложное агрегатное строение стали 110Г13Л, возникающее при кристаллизации в ходе совместной двухэтапной коалесценции (дендритной и зерновой). Процесс возникновения вторичных ветвей дендритов изначально характеризуется появлением комплекса ветвей разной ориентации, протяженности и толщины, капиллярно-диффузионное взаимодействие которых порождает условия для возникновения стохастического ансамбля продуктов мезомасштабной коалесценции (рис. 2).

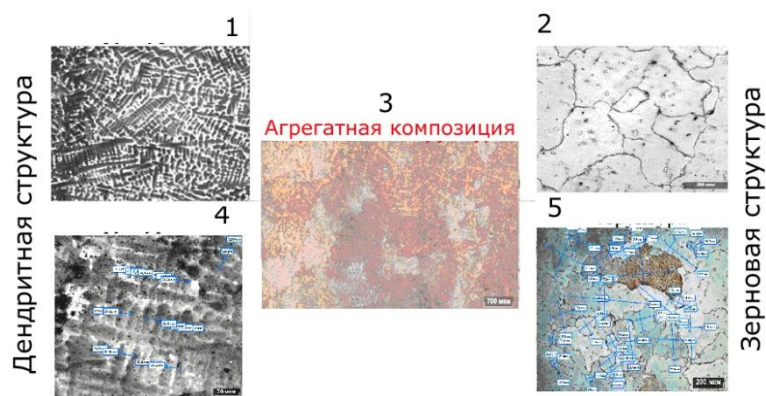


Рисунок 2. Взаимное расположение неоднородной дендритной (1) и зерновой (2) структуры сплава 110Г13Л в сопоставлении с демонстрацией их ячеистых композиций (4) и (5) на фоне синтетической дендритно-зерновой структуры (3)

В отличие от дендритной структуры, для прогноза которой существует множество эмпирических и аналитических моделей, при расчете размеров литого зерна такого разнообразия подходов не наблюдается. Оценка среднего размера зерна методом концентрических окружностей не подходит для тех случаев, когда литые зерновые стволы имеют вытянутость в направлении кристаллизации, что требует проведения набора дополнительных измерений средних значений длины и ширины зерен.

Многие исследования, связанные с определением размеров зерен, ориентированы на выявление того, в какой степени растворенные в расплаве легирующие элементы вызывают уменьшение конечных размеров зерна. Сложной задачей оценки многих подобных параметров являются условия, когда нет возможности видеть истинные размеры зерен, уходящих вглубь образца или жидкой фазы. Эти ситуации представляют собой вопросы, поиск ответа на которые находится в тесной взаимосвязи с прогнозом дендритной структуры.

- [1] Tiryakioğlu M. On the statistical distribution of primary and secondary dendrite arm spacing in cast metals // *Materials science and technology*. 2019. Vol. 35. Issue 4. P. 509-511.
- [2] Figueiredo R.B., Langdon T.G. Effect of grain size on strength and strain rate sensitivity in metals // *Journal of material science*. 2022. Vol. 57. P. 5210–5229.
- [3] Добош Л.Ю., Голод В.М., Феоктистов Н.А., Салынова М.А. Поиск закономерностей зерновой коалесценции и ее взаимосвязи с дендритной структурой стали 110Г13Л. // Труды 14-й международной научно-практической конференции "Литейное производство сегодня и завтра", Санкт-Петербург, 2023. С. 329-339.
- [4] Shuai Ma et al. Prediction of Grain Size in Cast Aluminum Alloys // *Crystals*. 2022. Vol. 12 (4):474.

Рост кристаллов в пересыщенном растворе с учётом двухступенчатого механизма

Е. В. Маковеева

Уральский федеральный университет, 620000 Россия, г. Екатеринбург, проспект Ленина 51

В данном исследовании разработана теоретическая модель, описывающая двухступенчатый механизм зарождения и роста ансамбля частиц в метастабильном растворе. Математическая модель основана на двухступенчатом росте отдельных кристаллов на разных стадиях фазового превращения. На первой стадии происходит образование и эволюция кристаллических зародышей внутри плотных жидких кластеров. На этой стадии рост частиц хорошо описывается диффузионно-ограниченным законом роста [1,2]. Поскольку концентрация и вязкость раствора внутри таких жидких кластеров выше, чем в окружающей жидкости, закон роста изменяется, когда они становятся достаточно большими, чтобы выйти за пределы этих кластеров. На второй стадии рост частиц хорошо описывается гиперболическим законом. Для описания всего процесса эволюции кристаллов эти законы роста были сшиты вместе и показано, что обобщенный закон эволюции кристаллов включает в себя диффузионно-ограниченный и гиперболический законы, а также удовлетворяет экспериментальным данным.

Таким образом, закон роста (1) представленный на рис. 1, дает дополнительные предсказательные возможности по сравнению с ранее разработанными подходами

$$G(r) = \frac{G_I(r)b_I(r) + G_{II}(r)b_{II}(r)}{b_I(r) + b_{II}(r)}, \quad (1)$$

где

$$G_I(r) = \frac{\alpha}{1 + \beta r}, \quad (2)$$

$$G_{II}(r) = G_0 \left(1 - \frac{r^2}{r_m^2} \right), \quad (3)$$

$$b_I(r) = \varepsilon \exp \left[- \left(\frac{r}{2r_c} \right)^m \right], \quad b_{II}(r) = \exp \left[- \left(\frac{2r_c}{r} \right)^m \right]. \quad (4)$$

Здесь r – радиус кристалла, r_m – равновесный радиус кристалла, $G(r)$ – скорость роста кристаллов, α и β постоянные системы, m – константа, $\varepsilon = G_0 / (2r_c m y)$ – малый параметр, $y = 2\alpha\beta$.

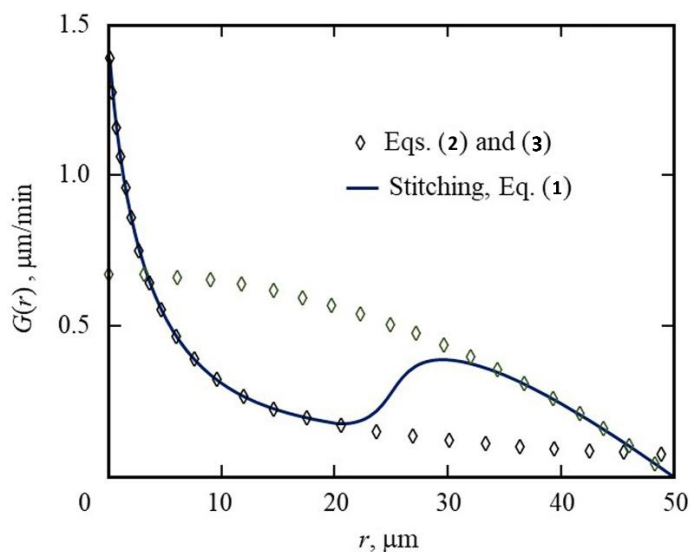


Рисунок 1.
Сшитая скорость роста (1) (сплошная кривая) и предельные скорости роста (2) и (3) двухэтапного процесса для кристаллов инсулина.

Этот обобщенный закон двухэтапного процесса затем используется в модели, описывающей эволюцию кристаллического ансамбля. Интегродифференциальная модель кинетических и балансовых уравнений, начальных и граничных условий аналитически решается с использованием метода седловой точки. Вычислив первые три поправки к основному вкладу, можно прийти к выводу, что построенное решение быстро сходится и хорошо описывает экспериментальные точки для снятия пересыщения раствора. Функция распределения кристаллов по размерам показывает диапазон радиусов кристаллов, который соответствует переключению скоростей роста частиц. В этом диапазоне функция распределения уменьшается, что соответствует переходу скорости роста кристаллов от ветви, ограниченной диффузией, к ветви роста по закону гиперболического тангенса. При этом большинство кристаллов выходят за пределы своих плотных жидких кластеров. Затем функция распределения снова увеличивается до максимального размера кристаллов, имеющих в растворе в данный момент времени.

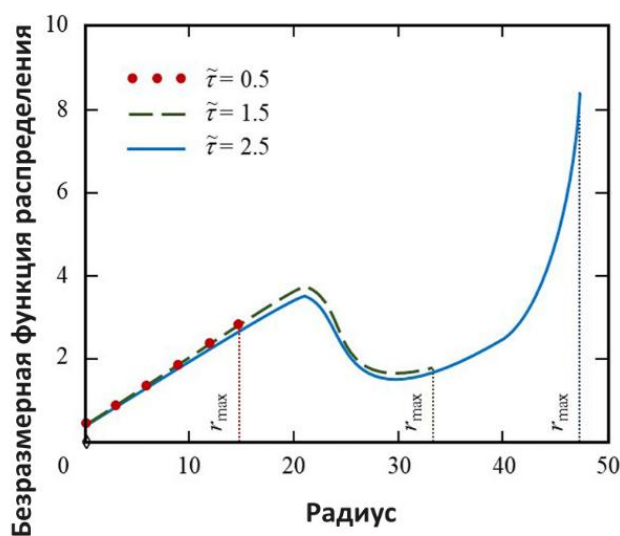


Рисунок 2.
Безразмерная функция распределения частиц по размерам для кристаллов инсулина в разные моменты времени.

Функция распределения (рис. 2) демонстрирует более сложное поведение, отражающее двухступенчатый процесс зародышеобразования, по сравнению с теорией одноступенчатого механизма, где функция распределения экспоненциально убывает с ростом радиуса кристаллов. Следует отметить, что сшитый закон роста (1), представляющий новизну данной теории, позволяет построить полное решение интегродифференциальной модели для эволюции ансамбля кристаллов. Решение этой задачи получено благодаря непрерывности нового закона роста (1), а также непрерывности всех производных этой функции, необходимых для применения метода седловой точки. Поэтому двухступенчатый закон роста (1) для отдельных кристаллов и полное аналитическое решение для ансамбля кристаллов являются новыми идеями, которые развивают классическую теорию, описывающую одноступенчатый процесс кристаллизации [3,4].

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ 24-79-10024.

- [1] Vekilov P.G. Two-step mechanism for the nucleation of crystals from solution // *J. Cryst. Growth.*, 2005. Vol. 275. P. 65–76.
- [2] Vekilov P. G. The two-step mechanism of nucleation of crystals in solution // *Nanoscale.*, 2010. Vol. 2. P. 2346–2357.
- [3] Barlow D. A., LaVoie-Ingram E., Bayat J. Population-balance study of protein crystal growth from solution using a hyperbolic rate law // *J. Cryst. Growth.* – 2022. – V. 578. – 126417.
- [4] L'vov P. E., Umantsev A. R. Two-step mechanism of macromolecular nucleation and crystallization: Field theory and simulations // *Cryst. Growth Des.* – 2021. – V. 21. – P. 366–382.

Влияние температуры расплава на вязкость, переохлаждение и процессы кристаллизации сплава $Ni_{60}Nb_{40}$

И.В. Стерхова, А. Л. Бельтюков, В.И., Ладьянов

Удмуртский федеральный исследовательский центр УрО РАН, 426067 Россия, г. Ижевск, ул. Т. Барамзиной 34

Сплавы системы Ni-Nb с содержанием ниобия 38-40 ат.% привлекают интерес исследователей в связи с высокой склонностью к объемной аморфизации. Они часто используются в качестве модельных систем при изучении процессов аморфизации расплава при быстрой закалке и кристаллизации аморфного состояния при его термообработке. Одним из основных способов получения аморфных материалов является сверхбыстрая закалка расплава. Между тем известно, что аморфизирующая способность и свойства получаемых быстрозакаленных сплавов в значительной степени связаны со структурным состоянием жидкой фазы перед закалкой. Поэтому изучение жидкого состояния и влияния состояния расплава на процессы затвердевания имеет важное значение.

Вязкость является одним из наиболее структурно чувствительных свойств расплава и измерения её температурной и концентрационной зависимостей зачастую используются в качестве косвенного метода при изучении особенностей строения жидких сплавов и при анализе межчастичного взаимодействия в них. Наличие надежные экспериментальных данных имеет важное значение для развития теории и модельных представлений жидкого состояния, а также процесса аморфизации.

В настоящей работе изучено влияние температуры расплава $Ni_{60}Nb_{40}$ на его вязкость и процессы кристаллизации при охлаждении со скоростью 100 град/мин.

Кинематическую вязкость расплавов измеряли методом затухающих крутильных колебаний цилиндрического тигля с расплавом [1]. При измерениях использовали тигли с крышкой, плавающей на поверхности расплава внутри тигля. Наличие крышки исключает влияние на результаты измерений вязкости пленочных эффектов и явлений смачивания. Измерения проводили в режиме нагрева от температуры ликвидуса до 1670 °С и последующего охлаждения до начала кристаллизации расплава. Относительная погрешность определения вязкости не превышает 4% при погрешности единичного эксперимента не более 2%.

Исследование особенностей кристаллизации расплава проводили методом дифференциального термического анализа (ДТА) в режиме циклирования образца через интервал плавление-кристаллизация. Образец нагревали до заданной температуры со скоростью 20 град/мин, выдерживали в течение 20 мин и затем охлаждали со скоростью 100 град/мин. В следующем цикле температуру, до которой нагревали расплав, повышали на 30°С. Температура максимального нагрева расплава изменялась в интервале от 1240 до 1650°С. По полученным термограммам нагрева и охлаждения определяли температуры всех этапов плавления и кристаллизации сплава, величину переохлаждения (ΔT) расплава

Всероссийская конференция

перед кристаллизацией и температурный интервал кристаллизации (T_L - T_S). На образцах после ДТА проводили исследования структуры с помощью методов металлографии, рентгеноструктурного анализа и сканирующей электронной микроскопии.

На температурной зависимости кинематической вязкости жидкого сплава $Ni_{60}Nb_{40}$ обнаружен гистерезис политерм полученных при нагреве и охлаждении ниже $1450^\circ C$. Проведена аппроксимация политерм вязкости экспоненциальным уравнением Аррениуса. На зависимости логарифма вязкости от обратной абсолютной температуры, полученной в режиме нагрева, наблюдается излом вблизи $1450^\circ C$. В режиме охлаждения температурная зависимость вязкости хорошо описывается уравнением Аррениуса во всем интервале температур. Гистерезис политерм вязкости свидетельствует о необратимом изменении структурного состояния расплава при его нагреве выше температуры ликвидуса.

Согласно ДТА плавление сплава $Ni_{60}Nb_{40}$ протекает в две стадии, температуры солидус и ликвидус составляют $1180^\circ C$ и $1235^\circ C$, соответственно, что согласуется с диаграммой состояния [2]. Кристаллизация исследуемого расплава протекает в несколько стадий, которые четко не разделяются на кривых ДТА. При этом кристаллизация расплава протекает в широком температурном интервале, величина которого зависит от температуры жидкой фазы перед охлаждением. Полученные зависимости величины переохлаждения в условиях которого начинается кристаллизация расплава $Ni_{60}Nb_{40}$ и температурного интервала его кристаллизации от температуры жидкой фазы перед охлаждением характеризуются не монотонными зависимостями. При охлаждении от температур вблизи температуры плавления кристаллизация начинается в условиях небольшого переохлаждения $\sim 30^\circ C$ и протекает в достаточно широком интервале $\sim 75^\circ C$. При повышении температуры расплава перед охлаждением до $1360^\circ C$ наблюдается значительное увеличение величины переохлаждения (почти в два раза). Кристаллизация исследованного расплава при охлаждении от температур из интервала 1360 - $1500^\circ C$ начинается в условиях переохлаждения 60 - $70^\circ C$. Дальнейшее повышение температуры жидкой фазы перед охлаждением сопровождается резким понижением величины переохлаждения. При этом в области наибольших значений переохлаждения кристаллизация расплава протекает в более узком температурном интервале. Как известно, переохлаждение с одной стороны, определяет исходное состояние жидкой фазы при заданной температуре, с другой стороны - контролирует условия зарождения и роста кристаллических фаз. Поэтому наблюдаемое увеличение величины переохлаждения исследованного расплава с повышением температуры жидкой фазы перед охлаждением может быть связано с изменением структурного состояния жидкой фазы и условий зарождения фаз. При этом, учитывая околоэвтектический состав сплава и тенденцию к уменьшению температурного интервала кристаллизации, можно предположить, что существенное влияние изменение переохлаждения оказывает на начальный этап кристаллизации.

Анализ микроструктуры слитков сплава $Ni_{60}Nb_{40}$, полученных в условиях охлаждения со скоростью 100 град/мин из температурных интервалов, отличающихся характером переохлаждения расплава и температурным интервалом его кристаллизации, показал, что в зависимости от температуры

Всероссийская конференция

жидкой фазы перед охлаждением наблюдается изменение морфологии структурных составляющих слитков (первичных кристаллов Ni_3Nb и эвтектики ($Ni_3Nb+Ni_6Nb_7$)). Для слитков, полученных при охлаждении от $1300^{\circ}C$ и $1650^{\circ}C$, наблюдается достаточное большое количество первичных кристаллов Ni_3Nb . Тогда как в слитке, полученном охлаждением от $1500^{\circ}C$, наблюдается значительное уменьшение доли и размера первичных кристаллов Ni_3Nb . Поскольку кристаллизация расплава $Ni_{60}Nb_{40}$ в этом случае начиналась в условиях большего переохлаждения (практически в два раза) по сравнению со слитками полученными от $1300^{\circ}C$ и $1650^{\circ}C$, то наблюдаемая особенность может свидетельствовать о температурном изменении условий зарождения химического соединения Ni_3Nb , т.е. в этом случае затруднено образование из расплава первичных кристаллов Ni_3Nb , формирование которых из расплава происходит практически одновременно с началом кристаллизации эвтектики. Таким образом, при кристаллизации расплава $Ni_{60}Nb_{40}$ от температур из интервала $1350-1500^{\circ}C$, когда кристаллизация начинается в условиях большого переохлаждения, затруднено образование первичных кристаллов Ni_3Nb .

- [1] Бельтюков А.Л., Ладьянов В.И. Автоматизированная установка для определения кинематической вязкости металлических расплавов // ПТЭ, 2008, №2. С. 155.
- [2] Диаграммы состояния двойных металлических систем: Справочник. Т. 3, книга 1 / Под общ. ред. Н.П. Лякишева. М.: Машиностроение, 2001. 872 с.

Фазовый состав и физические свойства высокоэнтропийных сплавов AlNiCoCuZr в твёрдом и жидком состояниях

Б. А. Русанов^{1,2}, В. Е. Сидоров^{1,2}, Л. Д. Сон^{1,3},
Э. А. Карфидов⁴, С. А. Петрова³, А. И. Русанова^{2,3}

¹Уральский государственный педагогический университет, 620091 Россия, г. Екатеринбург, пр. Космонавтов 26

²Удмуртский федеральный исследовательский центр Уральского отделения Российской академии наук, 426067 Россия, г. Ижевск, ул. Т. Барамзиной 34

³Институт металлургии им. академика Н.А. Ватолина Уральского отделения Российской академии наук, 620016 Россия, г. Екатеринбург, ул. Амундсена 101

⁴Институт высокотемпературной электрохимии Уральского отделения Российской академии наук, 620066 Россия, г. Екатеринбург, ул. Академическая 20

Высокоэнтропийные сплавы (ВЭС) активно исследуются в последние годы благодаря высоким значениям механических свойств и коррозионной стойкости. Эти материалы начинают рассматриваться в качестве перспективных для различных практических применений. Особое место занимают составы, содержащие алюминий, для получения материалов с низким удельным весом [1, 2]. В настоящей работе сплавы Al-Ni-Co-Cu-Zr с различным соотношением компонентов (всего 5 составов) получены методом электродуговой плавки в защитной атмосфере аргона. Для гомогенизации образцов, их переплав повторялся пять раз. Из полученных слитков методом вакуумного всасывания в медную водоохлаждаемую изложницу подготовлены быстрозакалённые стержни диаметром 3 мм, длиной до 50 мм.

Для всех полученных образцов (исходных слитков и быстрозакалённых стержней) проведены исследования их структуры методами рентгеновской дифракции и сканирующей электронной микроскопии, установлены основные фазы, возникающие при медленной кристаллизации и быстрой закалке, определены температуры плавления и вид тепловых реакций при нагреве методом дифференциальной сканирующей калориметрии.

Плотность сплавов AlNiCoCuZr изучена на автоматизированной экспериментальной установке методом проникающего гамма-излучения в защитной атмосфере гелия. Данные получены в режиме непрерывного нагрева и последующего охлаждения со скоростью 2 К/мин. Относительная погрешность определения плотности – 1 %. Электрическое сопротивление исследовано на установке, в которой реализован бесконтактный метод во вращающемся магнитном поле. Измерения проведены в защитной атмосфере гелия в режиме ступенчатого нагрева/охлаждения с шагом 15 К. Относительная погрешность измерений электрического сопротивления – 3 %. Магнитная восприимчивость сплавов изучена с помощью метода Фарадея в защитной атмосфере гелия в режиме ступенчатого нагрева/охлаждения с шагом 15 К. Относительная погрешность измерений магнитной восприимчивости – 3 %. Все эксперименты по измерению свойств сплавов проведены в температурном интервале $T = 300 - 1700$ К.

Всероссийская конференция

Коррозионные испытания сплавов проводились в водном растворе 5 мас. % NaCl при температуре 293 К. Для приготовления раствора использовались дистиллированная вода и хлорид натрия высокой чистоты. Время коррозионной выдержки составило 1500 часов. Исследования сплавов каждого состава проведены в режиме параллельной выдержки трех образцов.

Установлено, что сплавы AlNiCoCuZr характеризуются практически линейным уменьшением плотности до температуры солидус. Плавление образцов происходит в несколько этапов, сопровождающихся резким уменьшением абсолютных значений плотности. В жидком состоянии плотность сплавов AlNiCoCuZr также может быть описана линейными функциями. На основе полученных результатов рассчитаны значения температурного коэффициента расширения сплавов и их молярный объём [1].

Установлено, что для сплавов AlNiCoCuZr характерны аномалии электрического сопротивления и магнитной восприимчивости в твердом состоянии, а именно: уменьшение электросопротивления и увеличение магнитной восприимчивости в интервале температур $T = 600 - 1200$ К. Экспериментально показано, что обнаруженные аномалии можно объяснить процессами высокотемпературной структурной перестройки в сплавах, а величина аномалий зависит от концентрации кобальта. Из экспериментальных данных рассчитаны параметры электронной структуры сплавов в жидком состоянии - парамагнитная температура Кюри, эффективный магнитный момент и плотность электронных состояний на уровне Ферми [2].

По результатам коррозионных испытаний показано, что значение скоростей коррозии для исследуемых сплавов увеличиваются в следующем ряду: $Al_{20}Ni_5Co_{15}Cu_{20}Zr_{40}$ (0,2 мг/м²ч) < $Al_{35}Ni_{10}Co_{15}Cu_{35}Zr_5$ (0,7 мг/м²ч) < $Al_{30}Ni_{15}Co_{15}Cu_{35}Zr_5$ (1,0 мг/м²ч) < $Al_{20}Ni_{10}Co_{30}Cu_{30}Zr_{10}$ (2,0 мг/м²ч). Обнаружено, что в случае преимущественного содержания в составе сплавов наиболее электроотрицательных компонентов – Al и Zr, скорость коррозии материала снижается [3].

Полученные результаты о фазовом составе, физических свойствах и коррозионной стойкости высокоэнтропийных сплавов AlNiCoCuZr могут использоваться при разработке перспективных материалов.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Российского научного фонда №23-22-00029.

- [1] Rusanov B.A., Petrova S.A., Sterkhov E.V., Rusanova A.I., Bykov V.A., Sidorov V.E. Effect of phase composition on density and structure of Al–Ni–Co–Cu–Zr high-entropy alloys in solid and liquid states // *Intermetallics*, 2024. V. 169. 108292.
- [2] Rusanov B.A., Sidorov V.E., Petrova S.A., Perevyshin V.A., Rusanova A.I., Sabirzyanov A.A., Shunyaev K.Y. Electrical resistivity and magnetic susceptibility of Al-Ni-Co-Cu-Zr high-entropy alloys in solid and liquid states // *Journal of Alloys and Compounds*, 2024. V. 1008. 176792.
- [3] Karfidov E.A., Nikitina E.V., Rusanov B.A. The effect of Al and Zr content on corrosion of AlNiCoCuZr high-entropy alloys in a 5 wt% NaCl solution // *Journal of Alloys and Compounds*, 2024. V. 1007. 176423.

Особенности гомогенного плавления металла при ультракоротком сверхмощном воздействии лазерного излучения.

В.И. Мажукин, А.В. Шапранов, М.М. Демин, О.Н. Королева, А.В. Мажукин

Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН, 125047 Россия, Москва, Миусская пл., д.4

Рассматривается воздействие лазерного излучения фемто-пикосекундной длительности и интенсивности $\sim (10^{13} - 10^{14})$ Вт/см² на металлическую мишень (Al). Воздействие сопровождается возникновением высокой степени температурной неравновесности между электронной и ионной подсистемой. Электронный газ, поглощающий основную долю излучения, за счет высокой электронной теплопроводности быстро распространяет поглощенную энергию вглубь кристалла и, таким образом, превращается в объемный источник энергии для ионов кристаллической решетки. Температура ионной подсистемы, за счёт энергии передаваемой электронной компонентой, быстро возрастает, преодолевая значение равновесной температуры плавления T_m , в результате чего образуется перегретое метастабильное состояние, развивающееся вплоть до сильно перегретого неравновесного состояния кристалла. Это в свою очередь, приводит к объемному разрушению кристаллической решетки под воздействием гомогенного (объемного) плавления. Как следствие, одной из наиболее важных проблем является всестороннее обоснованная формулировка критерия появления жидкой фазы в перегретом кристалле.

Для исследования быстро протекающих взаимосвязанных процессов разработана относительно простая математическая модель микроуровня, в которой, воспользовавшись предположением о наличии в перегретом метастабильном кристалле генерации дефектов, при достижении которыми количества равного некоторому критическому значению, вероятность появления устойчивых зародышей жидкой фазы становится равной единице, что соответствует процессу гомогенного плавления кристалла.

Очевидно, что скорость накопления дефектов должна быть функцией степени перегрева кристалла $f(\eta)$, где $\eta = (T - T_m)/T_m$, η - степень перегрева, T_m - равновесная температура плавления, T - температура кристалла ($T \geq T_m$). Для определения возможного вида функции $f(\eta)$, а также значений параметров, входящих в предложенную модель, используется метод молекулярной динамики [1]. С его помощью осуществляется молекулярно - динамическое моделирование процесса объемного плавления монокристалла алюминия (Al).

Моделирование. В расчётах использовались: кубическая форма со стороной 6.5 нм содержащая 16384 частицы ГЦК-кристалла (Al), потенциал межчастичного взаимодействия EAM (Al) [2], на границы расчетной области налагаются периодические граничные условия, т.е. моделируемый объект - бесконечный монокристалл алюминия. Начальные условия - $t = 0$, $T_m = 949$ К, $P = 0$.

В процессе нагрева контролируется параметр порядка, значение которого резко падает, когда кристалл плавится. В этот момент фиксируется время t_d ,

Всероссийская конференция

которое прошло с момента начала нагрева, и температура T_{over} , при которой началось объемное плавление. Затем эксперимент повторяется для других скоростей нагрева.

На рис.1 представлены результаты этой серии вычислительных экспериментов.

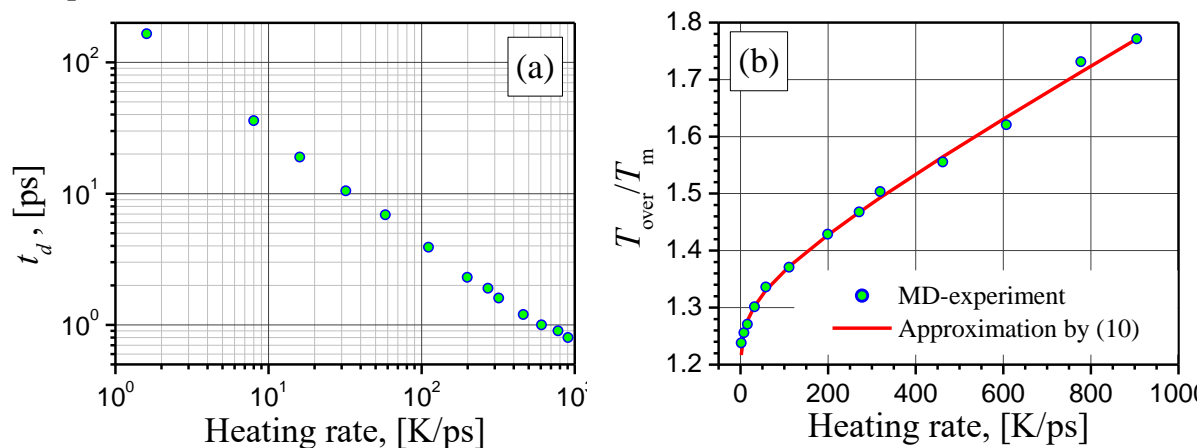


Рис.1. Время начала объемного плавления (a) и максимальный перегрев кристалла (b) в зависимости от скорости нагрева.

На рис.1(a) можно видеть, что в двойном логарифмическом масштабе изменение времени задержки t_d до начала объемного плавления происходит приблизительно по линейному закону, по крайней мере в области невысоких скоростей нагрева. Это соответствует степенной зависимости t_d от скорости нагрева.

В области больших скоростей нагрева $k > 100 \div 150$ К/пс линейное поведение демонстрирует уже степень перегрева (см. рис.1(b)). Связано это со сменой механизма разрушения решетки. Если при малых скоростях нагрева – это плавление метастабильного перегретого кристалла, то при больших скоростях кристалл становится термодинамически неустойчивым на фоне существенного нарушения равновесия между кинетической и потенциальной энергиями в системе. Во втором случае разрушение решетки происходит уже не за счет накопленного критического количества дефектов, а за счет большой кинетической энергии частиц, позволяющей преодолеть силы связи в кристалле. Время разрушения кристалла в этом случае сопоставимо со временем прохождения межатомного расстояния частицей в решетке и почти не зависит от скорости нагрева. Отсюда и получается линейная зависимость $\eta(k) \sim k \times t_0$, которая в случае больших скоростей нагрева просто пропорциональна произведению скорости нагрева на это постоянное время прохождения t_0 .

- [1] Plimpton S. Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics // J. Comp. Phys., 1995. Vol. 117(1), P. 1. Doi:10.1006/jcph.1995.1039
- [2] Zhakhovskii V.V., Inogamov N.A., Petrov Yu.V., Ashitkov S.I., Nishihara K. Molecular dynamics simulation of femtosecond ablation and spallation with different interatomic potentials // Appl. Surf. Sci., 2009. Vol. 255, P. 9592.

Развитие теории роста кристаллов в переохлажденных эвтектических расплавах

М. В. Дудоров¹, А. Д. Дрозин¹, В. Е. Роцин¹

¹Южно-Уральский государственный университет (национальный исследовательский университет), 454080 Россия, г. Челябинск, пр. Ленина, 76

Разработан комплексный подход описания процессов роста кристаллов новой фазы из многокомпонентных расплавов [1]. Для этого методами неравновесной термодинамики получено описание тепловых и диффузионных процессов в системе частица новой фазы – исходный расплав. При этом процессы на границе раздела фаз представлены в виде химических реакций. Далее с использованием разработанного вариационного подхода, удалось получить новое общее выражение роста частиц новой фазы, применимое как к задачам роста кристаллов при локальном равновесии на границе раздела фаз, так и к задачам роста при условии отклонения от локального равновесия.

На основе разработанной теории проводились расчеты скорости роста метастабильной фазы Fe₃V для расплава эвтектического состава Fe₈₃V₁₇ (рис. 1а) в широком интервале переохлаждений ниже температуры метастабильной эвтектики 1387 К [2]. Значительное влияние на рост фазы Fe₃V оказывают эффекты «захвата примеси» [3], обусловленные высокой скоростью роста кристаллов этой фазы. Указанные эффекты приводят к отклонению от локального равновесия у поверхности растущего кристалла.

Для проведения расчетов разработана методика продолжения линий равновесия диаграммы состояния в область низких температур, что позволило прогнозировать изменение мольной доли железа на поверхности растущей частицы для различных значений температуры (рис. 1б). Сплошная красная линия на диаграмме отражает продолжение линии равновесия при отклонении от локального равновесия. Пунктирной линией представлено продолжение линии равновесия фазы Fe₃V в гипотетическом случае при условии соблюдения локального равновесия.

Разработанная методика позволила изучить закономерности роста кристаллов метастабильной фазы Fe₃V при глубоких переохлаждениях расплава. На рис. 1а сплошной линией представлен результат расчета скорости роста кристаллов Fe₃V при условии отклонения от локального равновесия на поверхности растущего кристалла, пунктирной линией представлен результат расчета скорости роста кристаллов Fe₃V при условии локального равновесия. Из графика видно, что локально-неравновесные эффекты существенно влияют на скорость роста. Скорость роста кристаллов Fe₃V при отклонении от локального равновесия (красная сплошная линия) существенно больше скорости роста в гипотетическом локально-равновесном случае.

Для проверки полученных результатов дополнительно проведены расчеты при помощи известной ЛКТ-модели (Lipton-Kurz-Trivedi) [4]. Результат расчета скорости роста кристаллов Fe₃V методом ЛКТ приведен пунктирной линией на рис. 1а. Расчеты обоими методами демонстрируют схожие результаты.

Всероссийская конференция

Преимуществом разработанного метода является обобщенное описание системы кристалл – расплав методами неравновесной термодинамики. Такой подход позволяет гибко использовать разработанную модель для изучения закономерностей, протекающих в системе процессов с учетом различных факторов. К примеру, дальнейшим направлением исследования может стать изучение роста кристалла с учетом взаимного влияния тепловых и диффузионных процессов в объеме рассматриваемой системы, а также процессов «захвата примеси» на поверхности.

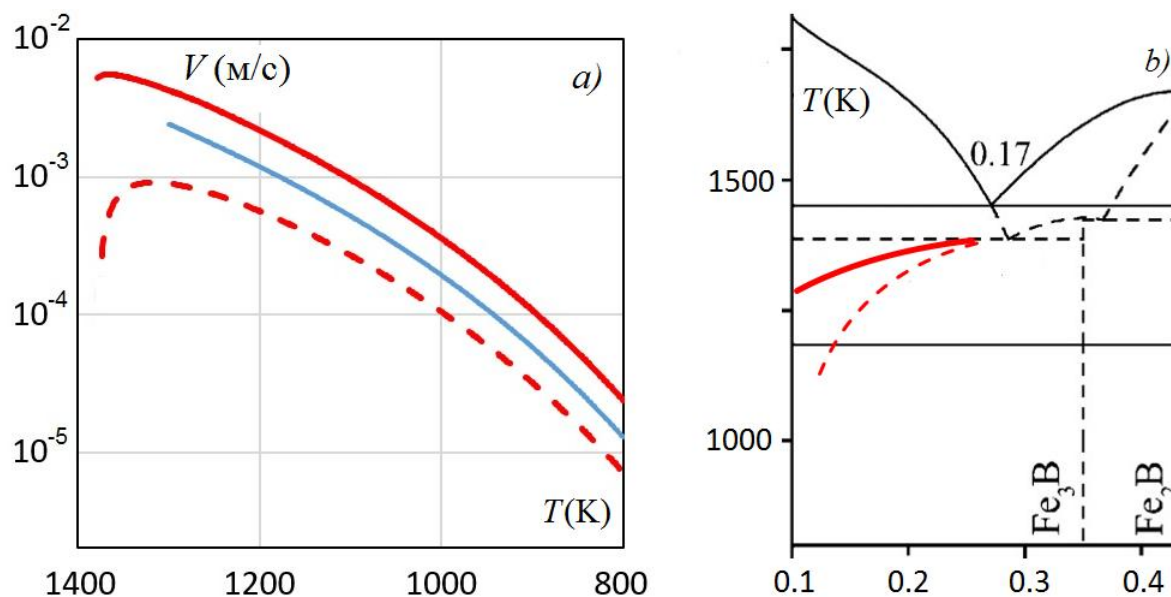


Рисунок 1. *a)* Изменение скорости роста V кристаллов Fe_3B при различном переохлаждении расплава. Красная сплошная линия отражает скорость роста кристаллов, рассчитанную по нашей методике, а синяя – по методу ЛКТ. Пунктирная линия отражает скорость роста в случае соблюдения условия локального равновесия. *b)* Продолжение линий равновесия в область низких температур на диаграмме Fe-B. Сплошная красная линия отражает линию равновесия для фазы Fe_3B при условии отклонения от локального равновесия, пунктирная – при условии локального равновесия.

- [1] Dudorov M.V., Drozin A.D., Roshchin V.E., Vyatkin G.P. Nonlinear Theory of the Growth of New Phase Particles in Supercooled Metal Melts // Russian Journal of Physical Chemistry A, 2024. Vol. 98. No. 11. P. 2447.
- [2] Dudorov M.V. Drozin A.D., Stryukov A.V., Roshchin V.E. Variational theory of crystal growth and its application for analysis of forming processes for metastable phases in overcooled metallic melts with eutectic composition // CIS Iron and Steel Review, 2021. Vol. 22, P. 48.
- [3] Herlach D.M., Galenko P.K., Holland-Moritz D. Metastable solids from undercooled melts, Amsterdam :Elsevier (2007). P. 432.
- [4] Lipton J., Glicksman M.E., Kurz W. Dendritic growth into undercooled alloy metals/ J. Lipton, // Materials Science and Engineering, 1984. Vol. 65. No. 1. P. 57.

Анализ процесса неравновесной кристаллизации металла шва сварного соединения легированной Nb аустенитной Cr-Ni-Si стали

Л. В. Палаткина¹, П. А. Алексеёнок²

¹Институт металлургии и машиностроения, ²Институт сварки АО «НПО «Центральный научно-исследовательский институт технологии машиностроения» Росатома, 115088, г. Москва, ул. Шарикоподшипниковская, 4.

На сегодняшний день для реакторных объектов атомной энергетики одной из перспективных задач является повышение уровня эффективности их использования с одновременным увеличением продолжительности периода безопасной эксплуатации. При этом возможность проведения ремонтных работ, мониторинга и контроля деталей и узлов особо ответственного оборудования как правило - практически отсутствует. В работе [1] на примере установок с тяжелым жидкометаллическим теплоносителем показано, что при высоких эксплуатационных параметрах, в целом надежность их работы и безаварийная эксплуатация отдельных элементов конструкции обеспечивается: качеством основного конструкционного материала [2]; качеством сварочных материалов; комплексом технологических решений при многопроходной сварке толстостенных элементов конструкции, в том числе с учетом проведения термической обработки для снятия остаточных сварочных напряжений.

Для различных методов сварки плавлением первичная структура (кристаллическое строение металла шва) формируемая при переходе сварочной ванны из жидкого состояния в твердое является одним из ключевых факторов, определяющих качество и свойства этого участка сварного соединения [3].

Несмотря на высокие скорости протекания процессов структурообразования при формировании сварного шва, все закономерности процесса кристаллизации – сохраняются. Именно поэтому следует предположить, что накопленный опыт по управлению структурой затвердевания железоуглеродистых сплавов [4, 5] возможно использовать для совершенствования первичной структуры металла шва сварного соединения с целью дальнейшего повышения его качества.

Понимание процессов структурообразования протекающих при затвердевании сталей в неравновесных (реальных) условиях невозможно без исследования, равновесного состояния. Последнее является отправной точкой [7] в разработке направлений совершенствования первичной структуры для улучшения технологических и эксплуатационных свойств готовых изделий. Для представленных в работе [1] композиций сварочных материалов, а также составов основного металла [2] в программном комплексе «Thermo-Calc» были построены псевдобинарные диаграммы состояния.

Следует отметить, что предложенная в работе [6] классификация карбидных фаз богатых Nb требует внесения уточнения в описание процесса кристаллизации как для рассматриваемого в работе состава металла шва сварного соединения, так и для основного конструкционного материала.

В соответствии с равновесной диаграммой состояния, для исследуемых в работе составов легированной Nb аустенитной Cr-Ni-Si стали, при

Всероссийская конференция

переохлаждении ниже температуры ликвидус из расплава выделяются дендритные кристаллы высокотемпературного δ -феррита, в которых максимальная растворимость Nb составляет 2,8 % (ат). При достижении температуры перитектической реакции, на дендритах первичного δ -феррита, образуется изолирующая их от расплава сплошная пленка аустенита в которой максимальная растворимость Nb снижается до 0,6 % (ат.). При этом в аустените в 100 раз снижается коэффициент диффузии ниобия относительно его диффузионной подвижности в феррите. Далее при охлаждении до температуры солидуса в системе протекает перитектическое превращение по способу ободкового роста.

Необходимо добавить, что в сплавах, претерпевающих перитектическое превращение при достижении в объеме расплава 0,65 % твердой фазы происходит смена механизмов её роста с дендритного на послойный. За счет наложения междендритной жидкости первичные дендритные кристаллы достраиваются до полиэдрических кристаллов внешняя форма которых диктуется столкновением с соседними зернами [8, 9].

В период дендритной кристаллизации сложнелегированных сталей Nb ликвирует в междендритную жидкость обогащая её, и создавая такую концентрацию, которая способна обеспечить протекание эвтектической реакции с образованием эвтектик на основе карбидных фаз богатых Nb [6]. Следует отметить, что из-за высокого сродства ниобия к углероду на этапе введения в расплав ниобий содержащих ферросплавов образуются первичные кубические карбиды. При поведении металлографического анализа металла шва сварного соединения были зафиксированы кубические карбидные фазы богатые ниобием размером 14 — 16 мкм.

После разработки методики металлографического выявления первичных дендритных кристаллов для металла сварного соединения было обнаружено зонное строение дендритных кристаллов различной дисперсности (что по-видимому обусловлено особенностями теплоотвода). При этом каждая зона состоит из «ячеек» - замкнутых областей сформированными несколькими дендритами. Также было показано, что при затвердевании металла сварного шва наблюдается смена механизмов роста твердой фазы с дендритного на послойный. Что напрямую подтверждает зафиксированные в работе [1] различия при исследовании локальных концентраций элементов в различных микроликвационных зонах. На основании сопоставительного анализа данных электронной микроскопии и результатов металлографической идентификации дендритных кристаллов и междендритного пространства показано, что:

- хром, кремний, ниобий - проявляют прямой характер остаточной микроликвации – при затвердевании обогащая зоны междендритного пространства.

- никель и марганец – в данных условиях – ликвируют обратно – обогащая зоны дендритных кристаллов.

Таким образом, в работе впервые показано, что легированная Nb аустенитная Cr-Ni-Si сталь затвердевает с выделением дендритных кристаллов и с последующей сменой механизмов роста твердой фазы с дендритного на послойный.

[1] Алексеёнок П.А. Разработка аустенитных сварочных материалов для технологии сварки оборудования АЭУ с тяжелым жидкометаллическим теплоносителем: дис. ... канд. техн. наук. – Москва, 2023. – 163 с.

[2] ТУ 14-1-2052077 Поковки из стали марки 10X15H9C3B1-Ш (ЭП302-Ш)

[3] Лившиц Л.С., Хакимов А.Н. Металловедение сварки и термическая обработка сварных соединений. – М.: Машиностроение, 1989. 336с.

[4] Костылева Л.В., Создание новых научных принципов упрочнения железоуглеродистых сплавов на основе развития теории кристаллизации и микроликвации: дис.. докт. техн. наук: - Волгоград, 2002. 340 с.

[5] Палаткина Л.В. Совершенствование дендритной структуры серого чугуна с целью повышения его прочности дис. ... канд. техн. наук. – Нижний Новгород, 2011. – 148 с.

[6] Палаткина Л.В., Чубуков М.Ю., Матасова М.В., Кириличев М.В. Особенности формирования в расплаве карбидных фаз, богатых ниобием, и их влияние на стойкость высокопрочных обсадных труб к сульфидному коррозионному растрескиванию под напряжением // Черные металлы. 2024. № 5. С. 36-42.

[7] Физическое металловедение: в 3-х т. под ред. Кана Р.У., Хаазена П.Т. Т.2: Фазовые превращения в металлах и сплавах и сплавы с особыми физическими свойствами: - М.: Металлургия, 1987. 624 с.

[8] Флемингс М. С., Процессы затвердевания / Мир. Москва, 1977. – 423 с.

[9] Металлография железа. Т. III. Кристаллизация и деформация стали // Металлургия. Москва, 1972. 236 с.

Метод граничного интеграла для задач кристаллизации в ограниченной области

Е. А. Титова¹, Д. В. Александров¹

¹Уральский федеральный университет, Кафедра теоретической и математической физики, Лаборатория многомасштабного математического моделирования, 620000 Россия, г. Екатеринбург, просп. Ленина, 51

В работах [1,2] получено интегральное решение задачи стационарного роста одиночного дендрита в канале. В настоящей работе методом граничного интеграла построено интегро-дифференциальное уравнение для нестационарной термо-концентрационной кристаллизации в канале с учетом конвекции. Методом отражений была построена функция Грина

$$G_j(\mathbf{p}|\mathbf{p}_1) = \frac{1}{4\pi D_j \tau} \exp\left(-\frac{(z - z_1 + V\tau)^2}{4D\tau}\right) \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left[\exp\left(-\frac{(x + 2na - (-1)^n x_1)^2}{4D\tau}\right) \right],$$

где нижний индекс $j = T$ для тепловой и $j = C$ для концентрационной задачи, соответственно, D_T - коэффициент температуропроводности, D_C коэффициент диффузии примеси, $\tau = t - t_1$, a - полуширина канала. Кристалл предполагается растущим в центре канала, на равном расстоянии от его боковых стенок, как показано на рисунке 1.

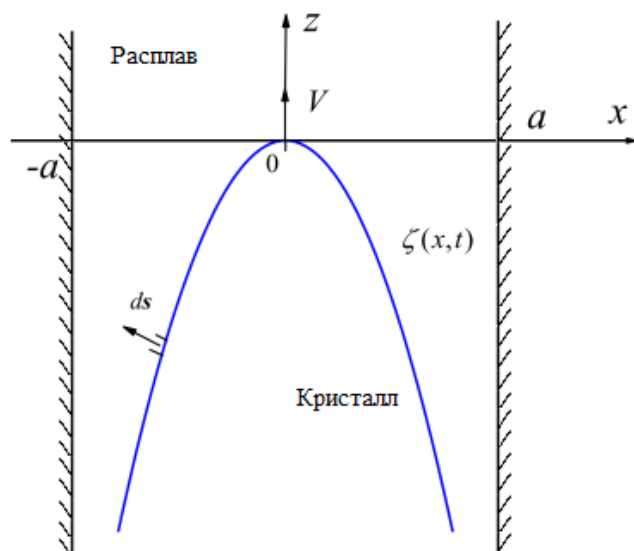


Рисунок 1.
 Рост кристаллического выступа в канале.

Всероссийская конференция

Применение подхода, предложенного в работе [3], позволило перейти от краевой задачи к одному интегро-дифференциальному уравнению, которое содержит поверхностную функцию $\zeta(x, t)$:

$$\begin{aligned} \frac{Q}{mc_p} & \left[\int_0^\infty \int_{-a}^a G_T(\mathbf{p}|\mathbf{p}_1) \left[V + \frac{\partial \zeta}{\partial t_1} \right] dt dx_1 - \int_0^\infty \int_{-a}^a \int_\zeta^\infty G_T(\mathbf{p}|\mathbf{p}_1) \mathbf{u} \cdot \nabla_1 T dt dx_1 dz_1 - \Delta + d_c K \right. \\ & \left. + \beta \left(V + \frac{\partial \zeta}{\partial t} \right) \right] \\ & = (1 - k_0) \int_0^\infty \int_{-a}^a G_C(\mathbf{p}^\zeta|\mathbf{p}_1^\zeta) C_i \left[V + \frac{\partial \zeta}{\partial t_1} \right] dt dx_1 \\ & - \int_0^\infty \int_{-a}^a \int_\zeta^\infty G_C(\mathbf{p}|\mathbf{p}_1) \mathbf{u} \cdot \nabla_1 C dt dx_1 dz_1 + C_\infty. \end{aligned}$$

Здесь Q – теплота кристаллизации, c_p – теплоемкость, m – наклон линии ликвидуса, V – скорость стационарной кристаллизации, $\Delta = T_0 - T_\infty$ – переохлаждение плоского фронта чистого вещества относительно температуры кристаллизации, d_c – анизотропная капиллярная длина, K – кривизна поверхности, β – кинетический коэффициент, k_0 – коэффициент сегрегации примеси, $C_i = C_i(x, t)$ – концентрация примеси на фронте, \mathbf{u} – поле скоростей течения жидкой фазы, C_∞ – концентрация примеси вдали от растущего кристалла. Данное уравнение позволяет учитывать нестационарную стадию процесса кристаллизации, поскольку поверхностная функция ζ может быть функцией как координат, так и времени.

Построенное интегро-дифференциальное уравнение имеет предельный переход к ранее известным решениям, полученным в работах [1,2] в стационарном случае, при отсутствии конвекции ($\mathbf{u} = 0$).

Построенная модель также верифицировалась сравнением с результатами компьютерного моделирования [4] и данными натуральных экспериментов [5], показав хорошее согласие.

- [1] Kessler D.A., Koplik J., Levine H. Dendritic growth in a channel // Physical Review A, 1986. Vol. 34. P. 4980-4987.
- [2] Brener E.A., Geilikman M.B., Temkin D.E. Growth of a needle-shaped crystal in a channel // Zh. Eksp. Teor. Fiz., 1987. Vol. 94. P. 241-255.
- [3] Langer, J.S. Studies in the theory of interfacial stability – II. Moving symmetric model // Acta Metallurgica, 1977. Vol. 25. P. 1121-1137.
- [4] Marinozzi, F., Conti M., Marconi U.M.B. Phase-field model for dendritic growth in a channel // Phys. Rev. E, 1996. Vol. 53. P. 5039-5043.
- [5] Campbell, J.M. et al., Dynamics of dendritic ice freezing in confinement // Cryst. Growth Des., 2022. Vol. 22. P. 2433-2440.

Исследование возможностей метода термического анализа для прогнозирования структуры отливок из нелегированных чугунов

А.М. Шишкин^{1,2}, Д.А. Гуртовой², А.Г. Панов^{1,3}

¹Набережночелнинский институт (филиал) Казанского (Приволжского) федерального университета, 423812, Республика Татарстан, г. Набережные Челны, проспект Мира д. 68/19

²ПАО КАМАЗ, 423827, Республика Татарстан, г. Набережные Челны, проспект Автозаводский, д. 2

³Ярославский государственный технический университет, 150023, г. Ярославль, Московский проспект, д. 88

В данной работе содержится обзор современных решений, позволяющих использовать метод термического анализа (ТА) для прогнозирования и контроля структуры степени графитизации и формы графита в структуре отливок.

Термин «термический анализ» как критериальный анализ поведения термических кривых затвердевания расплава и последующего охлаждения применительно к чугуну впервые появился еще в 1931 г., его авторство приписывается немецким специалистам Г. Эссеру и Г. Лаутенбушу [1]. Развитие компьютерной техники и методов обработки информации позволило записывать и анализировать кривые охлаждения в режиме реального времени, что привело к значительному росту практического применения ТА в последние десятилетия [2]. В настоящее время зарубежные литейные предприятия широко используют метод термического анализа для контроля производственных процессов, среди которых: подбор оптимального химического состава чугуна, выбор оптимальных модификаторов, а также их расходов, выбор оптимальной температуры заливки и времени выдержки металла в ковше, определение необходимости вторичного модифицирования и др. [3].

Мировыми лидерами в разработке систем термического анализа можно считать шведскую компанию SinterCast AB и испанский институт Azterlan, наиболее активно внедряющие свои разработки в производство [4,5]. В качестве примера использования системы ТА шведские авторы [4] приводят оптимизацию ковшевого модифицирования проволокой при получении ЧВГ (рисунок 1).

Регулировка расхода модификатора для расплавов текущих ковшей текущей плавки осуществлялась на основе статистической обработки результатов ТА SinterCast-методом расплавов предыдущих ковшах той же плавки и в зависимости от содержания серы в базовом расплаве текущей плавки, веса и температуры металла в ковше [3]. Метод термического анализа позволил подобрать оптимальное «технологическое окно» критериев ТА (MGM, рисунок 1) получения ЧВГ, в рамках которого и выдерживался производственный процесс.

Вместе с тем, предлагаемые комплексы ТА, как правило, не сопровождаются научно-технической информацией, расшифровывающей критерии ТА, отвечающие за «технологическое окно». В рамках импортозамещения и развития технологического суверенитета исследовали поведение термических кривых в сопоставлении с получаемыми структурами отливок из нелегированного чугуна.

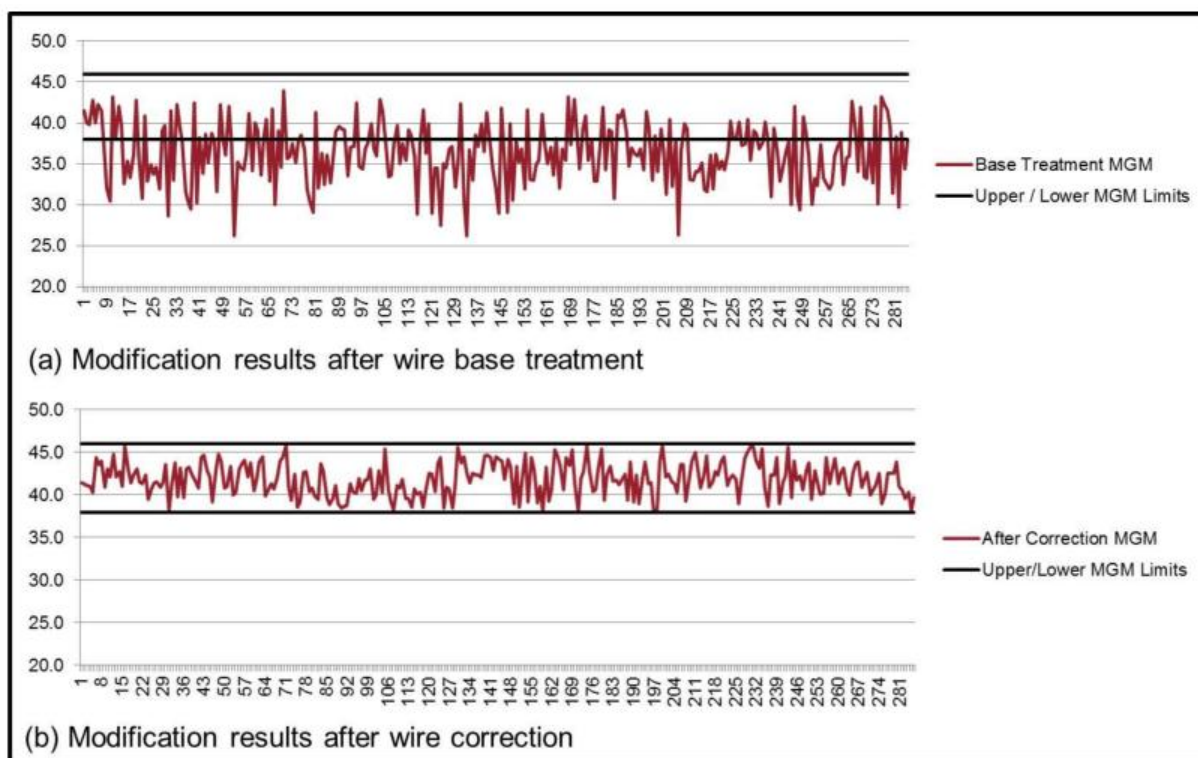


Рис. 1 - Результаты применения метода SinterCast в серийном производстве 281 ковша ЧВГ [4]

Первые исследования показали, что для каждого условия производства чугунных отливок необходимо предварительно опытным путём подбирать как минимум уровни технологических окон критериев ТА (TL, Tst, Tmet, ΔTE и др.), поскольку единую «универсальную» кривую охлаждения для конкретного вида чугуна с определённой микроструктурой для разных отливок получить очень сложно (вероятно, невозможно). Это связано с так называемой технологической наследственностью, поскольку каждое предприятие имеет свою собственную технологию, отличающуюся применяемым оборудованием, оснасткой, конструкцией литниковой системы, массой и толщинами стенок отливки, различием используемых материалов, квалификацией персонала и др., что в свою очередь и влияет на критерии термического анализа расплава, которым заливаются отличающиеся в разных производственных условиях литейные формы.

- [1] D.M. Stefanescu, R. Suarez, S.B. Kim. 90 years of thermal analysis as a control tool in the melting of cast iron. // China Foundry, 2020. Vol. 17. P. 69–84.
- [2] Информационный ресурс по литейному производству [Электронный ресурс]: Использование термического анализа для контроля процесса получения ВЧ. Автор: Адриан Удрю, главный инженер завода ANSELM I, Компосампьеро, Италия. URL: <http://http://otlivka.info/wp-content/uploads/2017/04/file52.pdf> (дата обращения 27.02.2025).

- [3] С. Доусон, А.Г. Панов, Д.А. Гуртовой, С.А. Аникин. Технология стабильного получения вермикулярного графита в отливках массового производства. // Литейное производство, 2018. №4. Стр. 7-12.
- [4] SINTERCAST [Электронный ресурс]: Thermal analysis and process control for compacted graphite iron and ductile iron / Техническая информация SinterCast. URL: <https://sintercast.com/library/published-papers> (дата обращения 25.02.2025).
- [5] Anna Regordosa, Urko de La Torre, Jon Sertucha, Jacques Lacaze. Quantitative analysis of the effect of inoculation and magnesium content on compact graphite irons - experimental approach. // Journal of Materials Research and Technology, 2020. Vol. 9. P. 11332-11343.

Немонотонные релаксационные процессы в расплавах галлия и алюминия с редкоземельными металлами

А. И. Русанова^{1,2}, Л. Д. Сон^{1,3}, А. Л. Бельтюков²,
Б. А. Русанов^{2,3}, В. Е. Сидоров^{2,3}, В. И. Ладьянов²

¹Институт металлургии им. академика Н.А. Ватолина Уральского отделения Российской академии наук, 620016 Россия, г. Екатеринбург, ул. Амундсена 101

²Удмуртский федеральный исследовательский центр Уральского отделения Российской академии наук, 426067 Россия, г. Ижевск, ул. Т. Барамзиной 34

³Уральский государственный педагогический университет, 620091 Россия, г. Екатеринбург, пр. Космонавтов 26

Сплавы на основе галлия начинают активно использоваться в ряде отраслей промышленности, включая микроэлектронику, электротехнику и в качестве жидкометаллических теплоносителей в ядерных реакторах благодаря их низким температурам плавления и широкой области существования жидкого состояния. Наряду с этим в материаловедении активно развиваются исследования сплавов, содержащих редкоземельные металлы (РЗМ), таких как Al-РЗМ, ввиду их уникальных магнитных и теплофизических свойств, а также относительно высокой стеклообразующей способности. В настоящее время РЗМ являются важным легирующим компонентом многих конструкционных и функциональных сплавов. Несмотря на широкие возможности практического применения сплавов на основе галлия и большое количество исследований их термодинамических характеристик, физические свойства сплавов Ga-РЗМ в кристаллическом и жидком состояниях до настоящего времени практически не изучены. Недавние исследования свойств сплавов Al-РЗМ, содержащих до 10 ат. % редкоземельных металлов, показали, что для этих объектов характерны длительные немонотонные изменения (релаксационные процессы) в жидком состоянии [1, 2]. Сходство алюминия и галлия по их физико-химическим свойствам в соединениях позволило выдвинуть гипотезу о существовании релаксационных процессов в расплавах Ga-РЗМ, аналогичных процессам в расплавах Al-РЗМ.

В настоящей работе впервые исследованы плотность и вязкость расплавов Ga-РЗМ (РЗМ = Nd, Sm, Gd, Tb, Ho) в широком температурном интервале, а также получены данные об изменениях свойств при длительных изотермических выдержках расплавов при высоких температурах. Кроме того, проведён сравнительный анализ данных с результатами, полученными ранее для расплавов Al-РЗМ (РЗМ = La, Ce, Sm, Gd, Tb). Для алюминиевых составов проведены металлографические исследования.

Плотность изучена на автоматизированной экспериментальной установке методом проникающего гамма-излучения в защитной атмосфере гелия. Данные получены в режиме непрерывного нагрева и последующего охлаждения со скоростью 2 К/мин. Относительная погрешность определения плотности – 1 %. Вязкость расплавов измерена на автоматизированной установке с использованием метода затухающих крутильных колебаний тигля (метод Е.Г. Швидковского).

Всероссийская конференция

Измерения проведены в режиме ступенчатого нагрева и последующего охлаждения. Относительная погрешность измерений вязкости – 3 %. Также проведены измерения свойств при длительных изотермических выдержках в жидком состоянии (при температурах от 1073 К до 1173 К в зависимости от используемого РЗМ), время выдержки – 3-5 часов.

По результатам экспериментов установлено, что сплавы Ga-РЗМ имеют широкую двухфазную область, в которой наблюдаются аномальные изменения плотности. Показано, что для исследованных составов в жидком состоянии характерны длительные немонотонные изменения свойств (релаксационные процессы) [3]. Ключевыми отличиями обнаруженных релаксационных процессов в расплавах Ga-РЗМ от процессов в расплавах Al-РЗМ является их вид и длительность. Так в расплавах на основе галлия релаксации являются более немонотонными, в процессе перехода в более однородное состояние при измерении свойств обнаружено 2-3 локальных максимума, тогда как в расплавах на основе алюминия релаксации характеризуются одним локальным максимумом. Характерное время релаксации расплавов на основе галлия – 200-250 минут, для алюминиевых образцов – 150-200 минут.

По результатам металлографии показано, что сплавы Al-РЗМ представляют собой смесь крупных образований частиц ГЦК-Al и первого интерметаллида. Установлено, что неоднородное состояние расплавов «наследуется» при нагреве из кристаллического состояния, а распад неоднородностей достижим только при существенном перегреве расплавов или при длительных изотермических выдержках при температурах выше ликвидуса.

Таким образом можно заключить, что полученные результаты могут служить основой для дальнейших исследований бинарных систем галлий-редкоземельные металлы, а также использоваться для оптимизации процессов получения материалов на их основе.

- [1] Beltyukov A.L., Rusanov B.A., Yagodin D.A., Rusanova A.I., Sterkhov E.V., Son L.D., Lad'yanov V.I. Relaxation processes in Al-R (R= Ce, Sm) glass-forming alloys // Solid State Communications, 2023. V. 360. 115044
- [2] Бельтюков А.Л., Русанов Б.А., Ягодин Д.А., Мороз А.И., Стерхов Е.В., Сон Л.Д., Ладьянов В.И. Релаксация в аморфизирующемся расплаве Al-La // Расплавы, 2022. №5. С. 485-493
- [3] Rusanova A.I., Son L.D., Rusanov B.A., Sidorov V.E., Beltyukov A.L. Non-Monotonic Relaxation Processes in Ga₉₅Nd₅ and Ga₉₇Sm₃ Melts // Russian Journal of Physical Chemistry A, 2024. V. 98. P. 3449–3453.

Структура сплавов $Al_{66}Cu_{24}Ni_{10}$, полученных в разных условиях затвердевания

А.Л. Алтунян¹, Л.В. Камаева²

¹Удмуртский государственный университет, 426034, Россия, г. Ижевск, ул. Университетская, 1

²Удмуртский федеральный исследовательский центр УрО РАН, 426067, Россия, г. Ижевск, ул. им. Татьяны Барамзиной, 34

В работе с помощью методов дифференциально-термического анализа (ДТА) и металлографии проведен сравнительный анализ протекания кристаллизации при охлаждении расплава $Al_{66}Cu_{24}Ni_{10}$ от различных температур при нормальном давлении и от температуры $1400^{\circ}C$ при нормальном и высоком (5ГПа) давлениях. Во всех экспериментах скорость охлаждения составляла $100^{\circ}C/мин$.

ДТА сплава в режимах нагрева и охлаждения показывает, что сплав $Al_{66}Cu_{24}Ni_{10}$ плавится при $550^{\circ}C$ и сопровождается большим эндотермическим эффектом с двумя максимумами теплопоглощения в области до $630^{\circ}C$, затем от 630 до $550^{\circ}C$ наблюдается еще серия небольших эндотермических эффектов, заканчиваясь плавлением при $1000^{\circ}C$ протяженным эндотермическим пиком. Кривые ДТА в режиме охлаждения от $1100^{\circ}C$ и $1400^{\circ}C$ в основном соответствуют термограмме нагрева. При охлаждении от $1100^{\circ}C$ переохлаждение перед началом кристаллизации составляет $20^{\circ}C$, а от $1400^{\circ}C$ – $50^{\circ}C$. В результате такого длительного и сложного процесса затвердевания образуется многофазная, двухуровневая структура (рис. 1).



Рисунок 1.
Структура сплава $Al_{66}Cu_{24}Ni_{10}$, полученная при охлаждении от $1400^{\circ}C$ со скоростью $100^{\circ}C/мин$ при нормальном давлении.

Серые кристаллы на переднем плане слитка – это первичные кристаллы Al_3Ni_2 , которые окружает более светлая узорчатая каемка – кристаллы Al_3Ni , образующиеся по перитектической реакции: $L+Al_3Ni_2 \rightarrow Al_3Ni+L$. На заднем плане находятся протяженные светлые кристаллы с четкой огранкой, между которыми

расположены эвтектические области. Несколько структурных уровней возникает в результате большого температурного интервала кристаллизации ($\sim 500^\circ\text{C}$). Уменьшение температуры расплава приводит к изменению морфологии первичных кристаллов, но слабо сказывается на самом процессе затвердевание.

При высоком давлении в тех же условиях охлаждения формируется также двухуровневая, но принципиально другая микроструктура (рис.2).

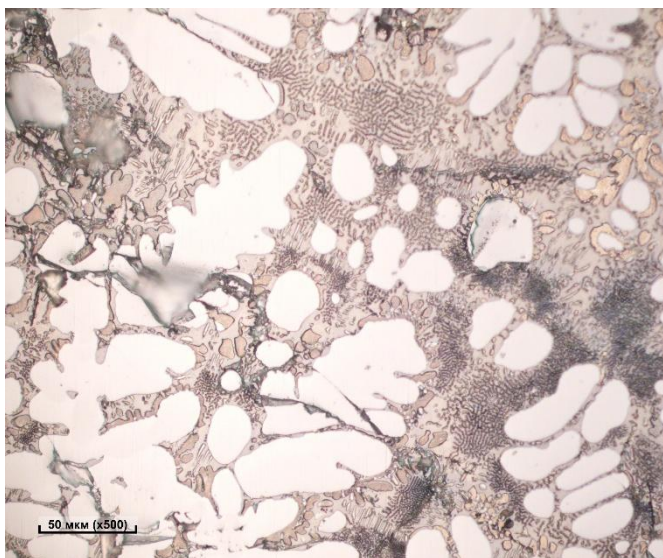


Рисунок 2.

Структура сплава $\text{Al}_{66}\text{Cu}_{24}\text{Ni}_{10}$, полученная при охлаждении от 1400°C со скоростью $120^\circ\text{C}/\text{мин}$ при давлении 5 ГПа.

На переднем плане находятся светлые массивные кристаллы округлой формы, сохранившие дендритное строение, на заднем плане расположена многофазная структура, состоящая из отдельных кристаллов и эвтектических колоний разной морфологии и состава. Полученная микроструктура показывает, что в условиях высокого давления сохраняется протяженная область между началом затвердевания и полной кристаллизации слитка. Однако фазовые равновесия существенно изменяются, что приводит к изменению состава первичных кристаллов и отсутствию на первом этапе затвердевания паратактических превращений.

Таким образом, проведенные исследования показывают, что комплексный анализ ДТА и металлографии позволяет детально понять процесс сложной многоступенчатой кристаллизации, а увеличение давление не только смещает фазовые равновесия по температуре и концентрации, но и принципиально изменяет характер затвердевания сплавов.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 24-22-00370, <https://rscf.ru/project/24-22-00370/>

К вопросу о зарождении и росте кристаллов перед подвижной межфазной границей твёрдая фаза - расплав

А.Е. Глебова¹, Д.В. Александров¹

¹Уральский Федеральный Университет, Лаборатория «Стохастический транспорт наночастиц в живом организме», Лаборатория многомасштабного математического моделирования, Кафедра теоретической и математической физики, Екатеринбург, Россия

Процессы кристаллизации расплавов и растворов из переохлажденной/пересыщенной жидкости отвечают за формирование определенного типа микроструктуры и свойств твёрдых материалов. Движущей силой таких процессов является градиент температуры/концентрации, приложенный вдоль определенного пространственного направления и обеспечивающий направленную кристаллизацию. При этом чисто твёрдая и жидкая фазы могут быть разделены, либо резкой границей фазового превращения, (фронтом кристаллизации), либо областью смешанного состояния обеих фаз (двухфазной областью). В первом случае существует только одна межфазная граница, тогда как во втором случае - две межфазные границы: «твёрдое тело - двухфазная область» и «двухфазная область - жидкость». На этих границах происходят выделение тепла и вытеснение/поглощение растворённых примесей. Часто межфазные границы движутся нестационарным образом.

Наличие переохлажденной двухфазной области усложняет процесс кристаллизации тем, что в этой области, помимо направленного роста дендритоподобных структур может происходить зарождение и рост ядер в объёме (примесные частицы, например, могут выступать в качестве центров кристаллизации). Другими словами, направленная и объёмная кристаллизация могут происходить одновременно при движении фронта кристаллизации в температурном/концентрационном поле и росте кристаллов перед этим фронтом. В этом случае математическая модель в двухфазной области дополняется кинетическим уравнением типа Фоккера-Планка для функции распределения кристаллов по радиусам/объёмам, которое определяет долю твёрдой фазы и влияет на уравнения тепло- и массопереноса [1, 2].

Экспериментальные данные по кристаллизации Al-Ni сплавов [3, 4] показали возможность реализации U -образной зависимости скорости кристаллизации V от переохлаждения расплава ΔT . Для количественного описания этих экспериментов была построена нелинейная математическая модель совместной объёмной и направленной кристаллизации с двумя подвижными границами.

В работе рассматривается процесс направленной кристаллизации бинарного расплава или раствора вдоль координатной оси ξ , вызванный заданным градиентом температуры (рис. 1). Этот градиент возникает в результате разности температур между холодной стенкой $\xi = 0$ и бинарным расплавом вдали от области фазового перехода ($\xi \rightarrow \infty$). Твёрдый материал и бинарный расплав

Всероссийская конференция

занимают области $\xi < \Lambda(\tau)$ и $\xi > \Sigma(\tau)$, соответственно. Здесь τ - время кристаллизации, а $\Lambda(\tau)$ и $\Sigma(\tau)$ - границы фазового перехода. Предполагается, что область, лежащая между $\Lambda(\tau)$ и $\Sigma(\tau)$, заполнена зарождающимися и растущими кристаллами при достаточно высоком переохлаждении. Эволюционирующие кристаллы частично компенсируют переохлаждение в результате выделения скрытой теплоты кристаллизации. Кроме этого, такие кристаллы могут присоединяться к границе фазового перехода $\Lambda(\tau)$ и ускорять её движение вдоль пространственного направления ξ .

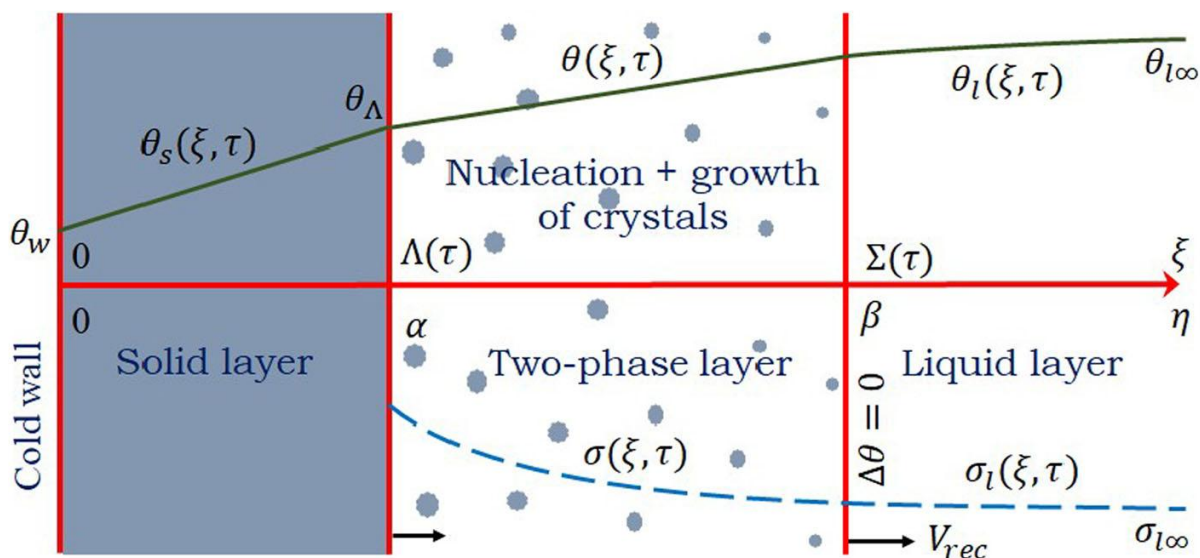


Рисунок 1.

Схема комбинированной направленной и объёмной кристаллизации бинарного расплава от холодной стенки $\xi = 0$ вдоль пространственной оси ξ . Процесс разделён на три области: область $0 < \xi < \Lambda(\tau)$ заполнена твёрдым материалом, при $\Lambda(\tau) < \xi < \Sigma(\tau)$ располагается двухфазная область, а бинарный расплав находится при $\Sigma(\tau) < \xi < \infty$. Двухфазная область переохлаждается; поэтому в ней возможно зарождение и рост кристаллов. Зелёные сплошные и синие пунктирные линии схематически иллюстрируют профили температуры и концентрации примеси, соответственно. Границами двухфазной области являются α и β при использовании автомодельной переменной η .

В результате решения сложной интегро-дифференциальной модели рассматриваемого процесса кристаллизации были аналитически определены профили температуры и концентрации примеси, доли твёрдой фазы, распределение кристаллов по размерам и границы двухфазной области. Найденное решение позволяет определить скорость кристаллизации в зависимости от переохлаждения расплава. При некоторых параметрах эта зависимость демонстрирует U -образное anomalous поведение. Теория согласуется с экспериментальными данными по кристаллизации алюминий-никелевых расплавов.

- [1] Mansurov V. V. The nonlinear dynamics of solidification of a binary melt with a nonequilibrium mushy region //Mathematical and Computer Modelling. – 1990. – Т. 14. – С. 819-821.
- [2] Alexandrov D. V., Ivanov A. A., Alexandrova I. V. On the theory of bulk crystallization in the moving phase transition layer //Journal of Crystal Growth. – 2020. – Т. 532. – С. 125420.
- [3] Reinartz M. et al. Study on anomalous rapid solidification of Al-35 at% Ni in microgravity //JOM. – 2022. – Т. 74. – №. 6. – С. 2420-2427.
- [4] Galenko P. K. et al. Anomalous kinetics, patterns formation in recalescence, and final microstructure of rapidly solidified Al-rich Al-Ni alloys //Acta Materialia. – 2022. – Т. 241. – С. 118384.

Кинетика кристаллизации аморфных лент на основе кобальта

Коваленко Д.А.¹, Быков В.А.¹, Куликова Т.В.¹, Евдокимов И.В.¹, Ягодин Д.А.¹

¹ Институт металлургии УрО РАН, 620016, г. Екатеринбург, ул. Амундсена, д. 101

Аморфный сплав, состоящий из переходных металлов и неметаллов, состава $\text{Co}_{41}\text{Fe}_7\text{Cr}_{15}\text{Mo}_{14}\text{C}_{15}\text{B}_6\text{Y}_2$ относится к классу glassy ribbons, обладающие превосходными магнитомягкими свойствами [1], что обуславливает их возможное применение в области электроники.

Сплав $\text{Co}_{41}\text{Fe}_7\text{Cr}_{15}\text{Mo}_{14}\text{C}_{15}\text{B}_6\text{Y}_2$ получен методом спиннингования. Метод рентгеновской дифракции подтверждает то, что образец рентгеноаморфный (рис. 1).

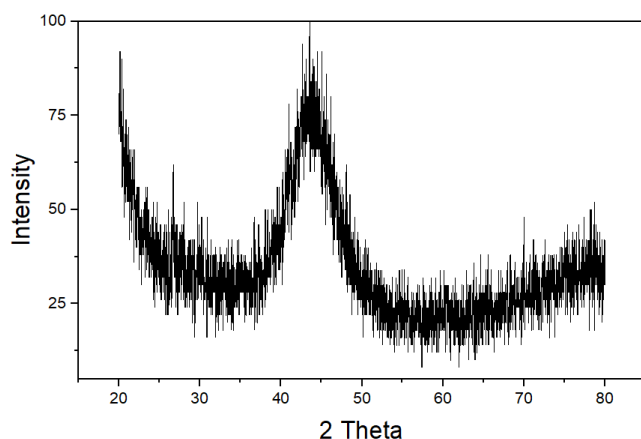


Рисунок 1.
Рентгенограмма образца
 $\text{Co}_{41}\text{Fe}_7\text{Cr}_{15}\text{Mo}_{14}\text{C}_{15}\text{B}_6\text{Y}_2$.

Ввиду того, что магнитомягкие свойства аморфных сплавов могут быть утрачены при кристаллизации, изучение кинетики кристаллизации является ключевым предметом исследования такого класса материалов [2].

Результаты дифференциальной сканирующей калориметрии, полученные при нагреве до 850°C при скоростях нагрева 5,10,15 К/мин, показывают сложную четырехступенчатую кристаллизацию аморфного сплава (рис. 2). Поскольку нас интересует процесс первичной кристаллизации, в работе был изучен только первый пик кристаллизации.

Получены термические характеристики исследуемого сплава для скорости нагрева 10 К/мин: температура стеклования $T_g = 551^\circ\text{C}$, температура начала кристаллизации $T_x = 631^\circ\text{C}$, а также показатель стеклообразующей способности: интервал переохлаждения жидкости $\Delta T_x = T_g - T_x = 80$.

Проведено комплексное исследование кинетики кристаллизации сплава $\text{Co}_{41}\text{Fe}_7\text{Cr}_{15}\text{Mo}_{14}\text{C}_{15}\text{B}_6\text{Y}_2$ при помощи изоконверсионных методов термического анализа и программного пакета Netzsch Thermokinetics NEO (рис. 3).

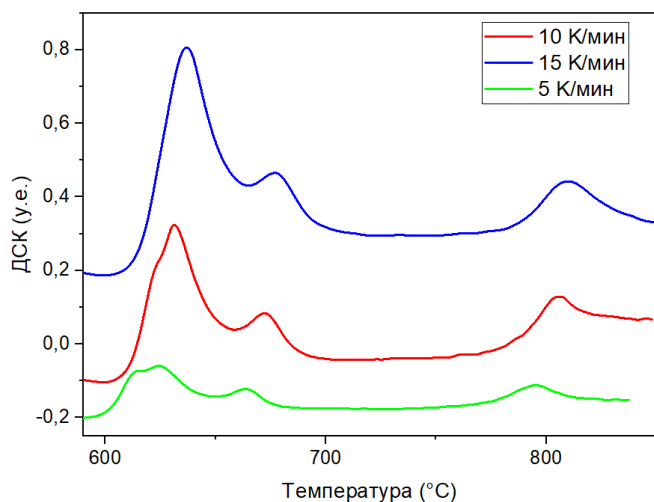


Рисунок 2.
ДСК кривые образца $\text{Co}_{41}\text{Fe}_7\text{Cr}_{15}\text{Mo}_{14}\text{C}_{15}\text{B}_6\text{Y}_2$ при скоростях нагрева 5, 10, 15 К/мин.

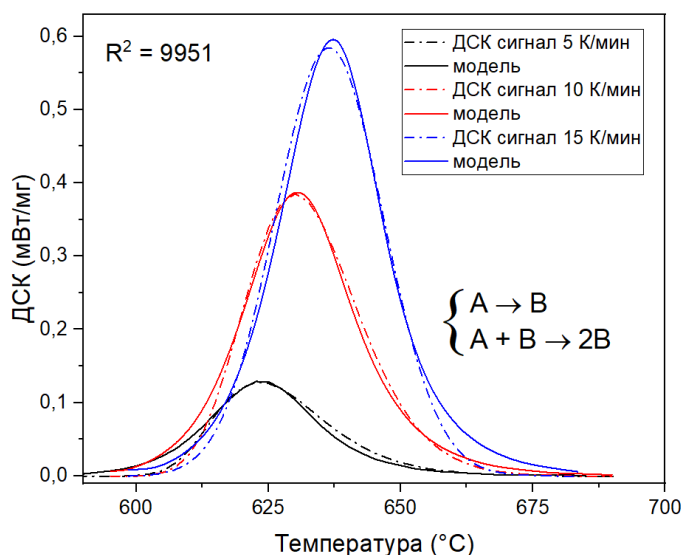


Рисунок 3.
Модель кристаллизации сплава $\text{Co}_{41}\text{Fe}_7\text{Cr}_{15}\text{Mo}_{14}\text{C}_{15}\text{B}_6\text{Y}_2$, описываемая комбинированной реакцией автокатализа в виде двух параллельных реакционных путей ($A \rightarrow B$, $A+B \rightarrow 2B$).

Согласно расчетам, наилучший коэффициент корреляции (0,9951) между экспериментальными и смоделированными кривыми ДСК был получен путем комбинированной реакции автокатализа в виде двух параллельных реакционных стадий: $A \rightarrow B$, $A+B \rightarrow 2B$ и описанные автокаталитическим уравнением Kamal-Sourour [3]:

$$\frac{d\alpha}{dt} = A e^{-\frac{E_{a1}}{RT}} \cdot (1 - \alpha)^n + k_{cat} \cdot A e^{-\frac{E_{a2}}{RT}} \cdot (1 - \alpha)^n \cdot a^m$$

где k_{cat} – коэффициент автокатализа; α – конверсия; n , m – порядок реакции; T – температура.

В табл. 1 представлены кинетические параметры, соответствующие построенной модели.

Таблица 1. Кинетические параметры модели.

	E_a , кДж/моль	Предэкспоненциальный множитель $\log A$	Вклад	Порядок реакции n	Автокаталитический порядок	Коэффициент корреляции R^2
Значение параметра	674	36,5	1	2	0,3	0,9951

Методом многомерной нелинейной регрессии показано, что первичная кристаллизация аморфного сплава $Co_{41}Fe_7Cr_{15}Mo_{14}C_{15}B_6Y_2$ протекает как комбинированная реакция автокатализа по двум параллельным реакционным путям ($A \rightarrow B$, $A+B \rightarrow 2B$), где механизм зародышеобразования определяется гетерогенной реакцией n -го порядка ($A \rightarrow B$), а рост зерна ($A+B \rightarrow 2B$) — реакцией автокатализа m -степени.

- [1] Rho I.C., Yoon C.K., Kim T.Y. et al., Microstructure and crystallization kinetics of amorphous metallic alloy: $Fe_{54}Co_{26}Si_6B_{14}$ // Journal of Non-Crystalline Solids, 2003. Vol. 316. P. 289-296.
- [2] Yuan Z.Z., Chen X.D., Wang B.X. et al., Crystallization kinetics of melt spun $Co_{43}Fe_{20}Ta_{5.5}B_{31.5}$ amorphous alloy // Journal of Alloys and Compounds, 2005. Vol. 399. P. 166-172.
- [3] Sourour S., Kamal M.R. Differential scanning calorimetry of epoxy cure: isothermal cure kinetics // Thermochim Acta, 1976. Vol. 14. P. 41-59.

К вопросу о кристаллизации с двухфазной областью при наличии слабого натекания расплава

И.Е. Корозникова¹, Д.В. Александров¹

¹Уральский Федеральный Университет, Лаборатория «Стохастический транспорт наночастиц в живом организме», Лаборатория многомасштабного математического моделирования, Кафедра теоретической и математической физики, Екатеринбург, Россия

Направленные и объёмные фазовые превращения лежат в основе многих технологических процессов и лабораторных установок для получения твёрдых материалов с заданной микроструктурой и свойствами [1, 2]. В таких процессах между расплавленной фазой и твёрдым материалом часто образуется область смешанного состояния твёрдой и жидкой фаз - двухфазная область. При этом тепломассоперенос в такой области определяется долей твёрдой (жидкой) фазы, которая влияет на плотность, теплоёмкость, теплопроводность и коэффициенты диффузии материала [3, 4]. Поэтому математическая модель тепломассопереноса должна быть сформулирована для каждой из фаз системы: твёрдого материала, двухфазной области и застывающего расплава. Кроме этого, решения уравнений тепло- и массопереноса во всех фазах должны удовлетворять граничным условиям, накладываемым на межфазные границы: «твёрдый материал-двухфазная область» и «двухфазная область-жидкость». Также должны выполняться пограничные условия вдали от межфазных границ и начальные условия. В результате получается нелинейная задача тепломассопереноса с двумя подвижными границами фазовых превращений [5, 6]. Рассмотрим стационарный процесс направленной кристаллизации бинарного расплава/раствора с постоянной скоростью v вдоль пространственной оси ξ , обусловленный заданными градиентами температуры в твёрдой (g_s) и жидкой (g_l) фазах (рис. 1).

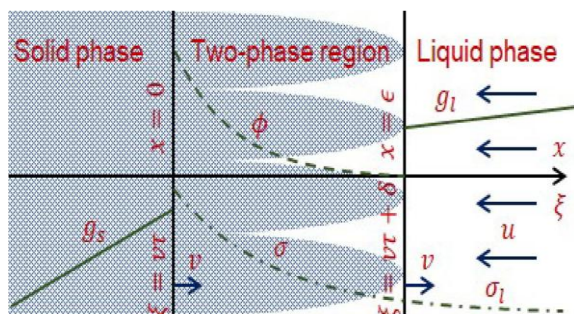


Рисунок 1.

Схема стационарной направленной кристаллизации с постоянной скоростью v вдоль оси ξ . Границы твёрдая фаза-двухфазная область и двухфазная область - жидкая фаза расположены соответственно в точках $\xi = vt$ ($x = 0$) и $\xi = vt + \delta$ ($x = \epsilon$). Сплошные, штрихпунктирные и пунктирные линии схематически иллюстрируют распределения температуры, концентрации примеси и долю твёрдой фазы, соответственно.

Модель аналитически решена для стационарного сценария затвердевания, когда границы фазового перехода в двухфазной области движутся с постоянной скоростью. Найдены распределения концентрации примеси, температуры и доли твёрдой фазы в двухфазной области, а также её толщина и скорость кристаллизации в случае слабого притока/оттока расплава. Выведен закон, определяющий зависимость концентрации примеси бинарной жидкости от доли твёрдой фазы при различных скоростях притока/оттока расплава. Развитая теория в сочетании с критерием отбора устойчивой моды дендритного роста позволяет найти характерное междендритное расстояние в двухфазной области.

- [1] Ivanov A. A., Alexandrova I. V., Alexandrov D. V. Evaporation kinetics of a polydisperse ensemble of drops //Philosophical Transactions of the Royal Society A. – 2021. – Т. 379. – №. 2205. – С. 20200309.
- [2] Vollmer U., Raisch J. H_∞ -Control of a continuous crystallizer //Control Engineering Practice. – 2001. – Т. 9. – №. 8. – С. 837-845.
- [3] Batchelor G. K. Transport properties of two-phase materials with random structure //Annual Review of Fluid Mechanics. – 1974. – Т. 6. – №. 1. – С. 227-255.
- [4] Worster M. G. Solidification of an alloy from a cooled boundary //Journal of Fluid Mechanics. – 1986. – Т. 167. – С. 481-501.
- [5] Makoveeva E. V. et al. Sea ice freezes faster when fluctuations in the atmospheric temperature and friction velocity occur //The European Physical Journal Special Topics. – 2023. – Т. 232. – №. 8. – С. 1153-1163.
- [6] Fowler A. C. The formation of freckles in binary alloys //IMA Journal of Applied Mathematics. – 1985. – Т. 35. – №. 2. – С. 159-174.

Переохлаждения эвтектических сплавов в системах: дифенилметан-дифенил, нафталин-дифенилметан

Е.А. Покинтелица, О.В. Соболев, С.А. Фролова

ФГБОУ ВО «Донбасская национальная академия строительства и архитектуры», 286123, Россия, ДНР, г. Макеевка, ул. Державина, 2

Анализ результатов, полученных при изучении кристаллизации сплавов в системах: нафталин-дифенил, дифенил-дифенил, дифенил-нафталин, показал общую закономерность уменьшения предкристаллизационных переохлаждений сплавов по мере приближения составов к эвтектическим [1]. В этой связи представляет интерес изучение переохлаждений при кристаллизации эвтектических сплавов других углеводородов, в частности, в системах дифенилметан-дифенил и нафталин-дифенилметан.

В нормальных условиях предкристаллизационные переохлаждения составляют ~22 К для дифенилметана и ~10 К для дифенила и нафталина соответственно [1].

Из литературы известно, что смеси кристаллов дифенилметана и дифенила образуют диаграмму состояния эвтектического типа [2]. Эвтектика соответствует составу 72.2 масс.% дифенилметана (Дм) – 27.8 масс.% дифенила (Д) и температуре $T_{\text{Э}} = 284.4$ К (рис. 1). Смеси нафталина с дифенилметаном образуют сплавы эвтектического типа со следующими параметрами: состав эвтектики 20.2 масс.% Н – 79.8 масс.% Дм, эвтектическая температура $T_{\text{Э}} = 293.4$ К [3] (рис. 2).

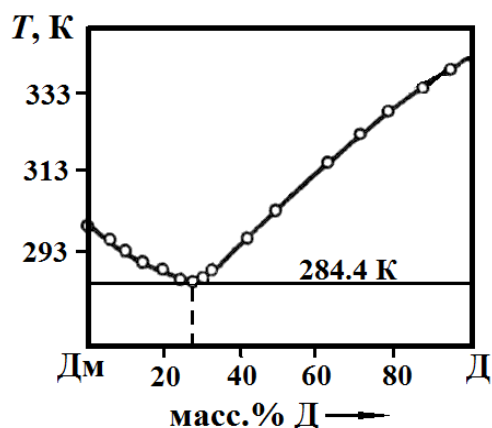


Рисунок 1.

Диаграмма состояния дифенилметан-дифенил [2].

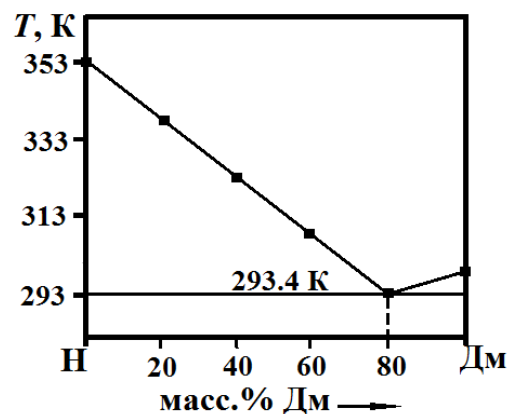


Рисунок 2.

Диаграмма состояния нафталин-дифенилметан [3].

В качестве примера на рисунке 3.30 а, б показаны термограммы эвтектического сплава 72.2 масс.% Дм – 27.8 масс.% Д (сплав 1).

Из рис. 3 следует что, как и для чистых компонентов, наблюдается два вида кристаллизации – с переохлаждением (а) и без него (б). Аналогичная картина имеет место и для эвтектического сплава 20.2 масс.% Н – 79.8 масс.% Дм (сплав 2).

Всероссийская конференция

Кроме того, для обоих сплавов установлен скачкообразный переход от неравновесно-взрывной кристаллизации (НРВК) к квазиравновесной кристаллизации (КРК) в зависимости от величины перегрева расплава аналогично явлению, наблюдаемому на чистых компонентах. Критические перегревы для сплава 1 составляют $\sim 7-8$ К, а для сплава 2 $\sim 4-5$ К, а средние переохлаждения соответственно 19 и 9 К с дисперсией ± 1.5 К. Дальнейший перегрев расплавов эвтектических сплавов не влиял на средние переохлаждения (рис. 4).

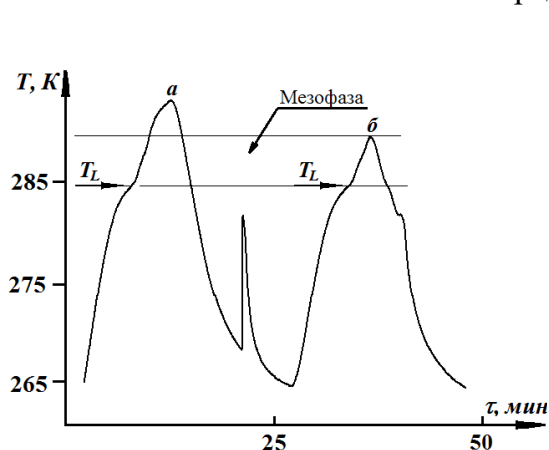


Рисунок 3.

Термограммы сплава 72.2 масс.% дифенилметана – 27.8 масс.% дифенила: *a* – при НРВК, *b* – при КРК.

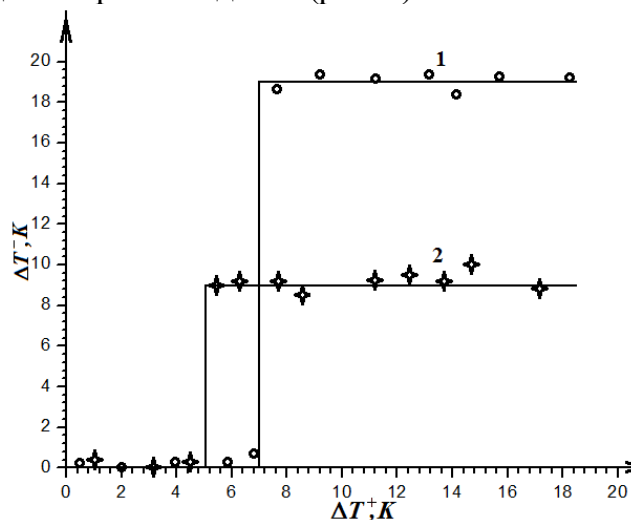


Рисунок 4.

Зависимость физических переохлаждений ΔT^- от перегревов расплавов ΔT^+ для эвтектических сплавов 1 и 2.

Видно, что как нафталин, так и дифенил, имеющие одинаковые средние переохлаждения ~ 10 К, уменьшают переохлаждения дифенилметана соответственно на ~ 13 К и на $\sim 5 \div 6$ К. Обе добавки (*H* и *D*) в *Дм* способствуют также расширению области мезофазы по сравнению с такой областью для дифенилметана.

- [1] Покинтелица Е.А. Теплофизические особенности плавления и кристаллизации органических теплоаккумулирующих материалов группы дифенилов [Диссертация] канд. техн. наук: 05.14.04. – Макеевка. – 2019. – 186 с.
- [2] Чечеткин А.В. // Высокотемпературные теплоносители, М.: Энергия (1971).
- [3] Ищенко Е.Д., Рощина Г.П. До питання про структуру рідких систем з евтектичною діаграмою стану // Український фізичний журнал, 1963. Т. VIII. № 11. С. 1241-1948.

Описание поперечных коллективных возбуждений в жидкости Юкавы в рамках самосогласованной релаксационной теории

И. И. Файрушин¹, А. В. Мокшин¹

¹Казанский (Приволжский) федеральный университет, 420008 Россия, г. Москва, ул. Кремлевская 18

Работа посвящена развитию теоретического описания поперечных коллективных возбуждений в сильно неидеальной плазме Юкавы, находящейся в жидком состоянии [1-3]. Жидкости, как известно, характеризуются постоянным объемом без сохранения формы, они могут течь. Последнее означает, что у жидкости должна отсутствовать сдвиговая жесткость. Однако, как показывают ряд экспериментов, на малых пространственно-временных масштабах жидкостям свойственно наличие сдвиговой жесткости [4]. Это связано, в первую очередь, с наличием ближнего порядка в расположении частиц жидкости, что приводит к проявлению квазитвердотельных свойств. Наиболее ярко эти свойства, очевидно, будут проявляться у жидкостей в состояниях, близких к кристаллизации. В докладе будет представлен теоретический формализм, позволяющий описывать условия возникновения и существования поперечных коллективных возбуждений в модельной жидкости Юкавы. Подход основан на самосогласованной релаксационной теории коллективной динамики многочастичных систем [1, 4, 5]. В рамках предложенного формализма для режимов среднего экранирования и вблизи кривой плавления впервые получены аналитические выражения, описывающие спектры поперечных коллективных возбуждений и соответствующие дисперсионные характеристики. Описаны условия возникновения и затухания квазитвердотельных коллективных возбуждений.

Работа выполнена при поддержке Программы стратегического академического лидерства Казанского федерального университета "ПРИОРИТЕТ-2030".

- [1] Mokshin A.V., Fairushin I.I., Tkachenko I.M. Self-consistent relaxation theory of collective ion dynamics in Yukawa one-component plasmas under intermediate screening regimes // *Phys. Rev. E.*, 2022. Vol. 105. P. 025204.
- [2] Fairushin I.I., Khrapak S.A., Mokshin A.V. Direct evaluation of the physical characteristics of Yukawa fluids based on a simple approximation for the radial distribution function // *Results in Physics*, 2020. Vol. 19. P. 103359.
- [3] Fairushin I.I., Mokshin A.V. Calculation of Thermodynamic Characteristics and Sound Velocity for Two-Dimensional Yukawa Fluids Based on a Two-Step Approximation for the Radial Distribution Function // *Fluids*, 2023. Vol. 8. P. 72.
- [4] Мокшин А.В. и др. Квазитвердотельная микроскопическая динамика в равновесных классических жидкостях. Самосогласованная релаксационная теория // *ТМФ*, 2021. Том 206. С. 245.
- [5] Fairushin I.I., Mokshin A.V. Collective ion dynamics in Coulomb one-component plasmas within the self-consistent relaxation theory // *Phys. Rev. E.*, 2023. Vol. 108. P. 015206.

Нуклеация на ультрадисперсных частицах с учетом размерных эффектов

А. Н. Черепанов¹, В. К. Черепанова^{1,2}

¹Институт теоретической и прикладной механики СО РАН, 630090 Россия, г. Новосибирск, ул. Институтская 4/1

²Новосибирский государственный технический университет, 630073 Россия, г. Новосибирск, пр. К. Маркса 20

В работе на основе классической теории нуклеации исследуется влияние размерных эффектов и смачиваемости на процесс гетерогенного зародышеобразования кристаллической фазы на тугоплавких наночастицах различной формы. Для этого были использованы уточненные выражения для работы образования гетерогенного зародыша и его критического радиуса для двух случаев: зародыш образуется на выпуклой (сферической) подложке либо на плоской. Формулы для энергии образования зародыша были получены с учетом линейного натяжения и влияния кривизны поверхности зародыша на поверхностное натяжение:

$$G = \sigma_{12}^{\infty} \left(1 - \frac{b}{R_c}\right) \cdot S_c + (\sigma_{23} - \sigma_{13})S_s - \Delta\mu V + 2\pi \cdot r \cdot \sigma_l, \quad (1)$$

где S_c, S_s – площади поверхностей зародыша на границе зародыш – расплав и на границе контакта зародыша с подложкой соответственно, V – объем зародыша, σ_{12}^{∞} – поверхностное натяжение большого зародыша на плоской поверхности, $b = 2\delta$, δ – параметр Толмена, σ_{23}, σ_{13} – поверхностные натяжения на границах раздела зародыш – подложка, жидкость – подложка, $\Delta\mu$ – разность термодинамических потенциалов фаз, R_c – радиус капли-зародыша, r – радиус периметра смачивания, $\sigma_l = \sigma_{12} b k(\theta_0)$ – линейная плотность энергии, $k(\theta_0)$ – периферийная энергия. На рисунке 1 приведена схема образования зародыша на сферической подложке.

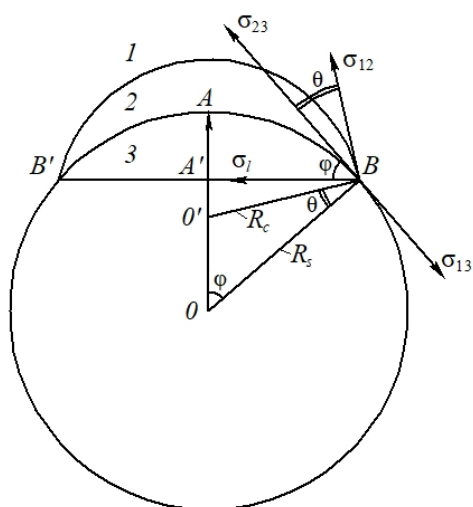


Рисунок 1.

Схема образования зародыша кристалла на сферической частице.

1 – жидкая фаза; 2 – зародыш; 3 – частица.

Пояснение обозначений в тексте.

Всероссийская конференция

Для решения поставленной задачи мы применили метод, при котором краевой угол малого зародыша θ , зависящий от его кривизны, заменяется краевым углом большого зародыша на плоской подложке θ_0 , который не зависит от b/R_c . Тогда из условия равновесия сфероидального зародыша на выпуклой поверхности было получено уравнение, определяющее краевой угол θ через стандартный угол θ_0 , а из условия экстремума энергии зародыша уравнение для его критического радиуса. Для решения этих уравнений использовался метод последовательных приближений по малому параметру $\bar{b} \ll 1$, где $\bar{b} = b/R_0$, $R_0 = 2\sigma_{12}^\infty T_k / (\kappa \rho_s \Delta T)$ – радиус гомогенного зародыша, T_k – температура кристаллизации, $\Delta T = T_k - T$ – переохлаждение, κ – удельная теплота кристаллизации, ρ_s – плотность твёрдой фазы. Принимая в качестве нулевых приближений $R_c = R_0$, $\cos \theta = \cos \theta_0$, мы получили в первом приближении следующие выражения:

$$\cos \theta = \cos \theta_0 + \bar{b} \cdot \frac{\sin \varphi_0 - \sin \theta_0 - k(\theta_0) \cdot \cos \varphi_0}{\sin(\varphi_0 + \theta_0)}, \quad (2)$$

$$R_c = \frac{R_0}{2} \left(1 + \sqrt{1 - \frac{4\bar{b}}{1 - \cos(\theta_0 + \varphi_0)}} \right) \quad (3)$$

$$\sin \varphi_0 = \frac{R_0 \sin \theta_0}{\sqrt{R_s^2 - 2R_s R_0 \cos \theta_0 + R_0^2}}, \quad \cos(\theta_0 + \varphi_0) = \frac{(R_s \cos \theta_0 - R_0)}{\sqrt{R_s^2 - 2R_s R_0 \cos \theta_0 + R_0^2}}, \quad (4)$$

$$k(\theta_0) = 2 \operatorname{ctg} \left(\frac{\theta_0}{2} \right) \left(\cos \theta_0 - \cos \left(\frac{\theta_0}{2} \right) \right). \quad (5)$$

Используя решение (2)–(5), можно записать в явном виде выражение для функции смачивания на криволинейной (сферической) поверхности наночастицы-затравки $f\left(\theta_0, \frac{R_s}{R_n}\right) = \frac{G^*}{G_n}$, где G^* – работа образования гетерогенного зародыша, $G_0 = \frac{4}{3} \pi \sigma_{12}^\infty R_0^2$ – работа образования гомогенного зародыша.

Аналогичный подход был использован нами для случая образования сфероидального зародыша на плоской поверхности. Радиус критического зародыша тогда будет иметь вид:

$$R_c = \frac{R_0}{2} \left\{ 1 + \sqrt{1 + \frac{4\bar{b} \sin \theta_0 k(\theta_0)}{(1 - \cos \theta_0)^2 (2 + \cos \theta_0)}} \right\},$$

а функция смачивания для плоской поверхности $f(\theta_0) = \frac{G^*}{G_n}$ будет зависеть только от угла смачивания θ_0 .

Нами были проведены численные эксперименты для алюминия, модифицированного сферическими наночастицами, радиус кривизны которых варьировался в диапазоне $R_s = 30 \div 100$ нм. Значение малого параметра было выбрано равным $\bar{b} = 0,02$. Зависимости параметра смачивания от стандартного угла с учётом эффекта Толмена и линейного натяжения, а также без учёта указанных эффектов, показаны на рисунке 2 для случая плоской подложки (а) и для выпуклой подложки с большой кривизной ($R_s = 30$ нм) (б). Как видно из приведённых графиков, учёт эффекта Толмена и линейного натяжения капли-зародыша понижает работу образования гетерогенного зародыша и приводит к уменьшению параметра смачивания (кривые 1). Причём при хорошем

Всероссийская конференция

смачивании, то есть при малых углах, параметр может достигать даже отрицательных значений, что равносильно отрицательной работе образования зародыша.

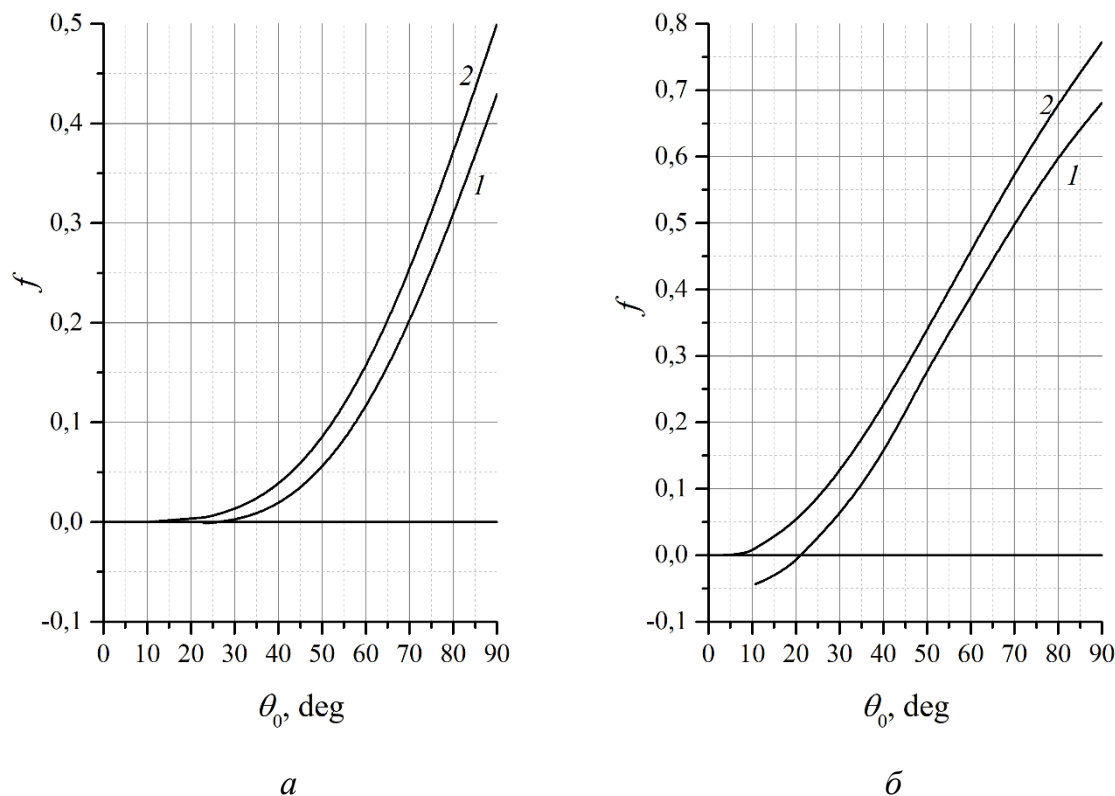


Рисунок 2. Зависимость параметра смачивания $f(\theta_0)$ от угла θ_0 при зарождении твердой фазы на плоской подложке (а) и на сферической наночастице радиусом $R_s = 30$ нм (б) с учетом эффекта Толмена и линейного натяжения ($\bar{b} = 0,02$) (кривая 1) и без учета указанных эффектов ($\bar{b} = k = 0$) (кривая 2).

Отрицательные значения параметра смачивания обусловлены отрицательной энергией гетерогенной нуклеации. Действительно, из общего вида формулы для энергии (1) понятно, что при отрицательном линейном натяжении возможно снижение энергии Гиббса ниже нуля. В рассматриваемом нами случае поверхность подложки является смачиваемой ($0 < \theta < \pi/2$), и линейное натяжение принимает отрицательные значения, что и приводит при малых краевых углах к переходу параметра смачивания в отрицательную область. Как видно из сравнения графиков на рисунках 2а и 2б, такое поведение энергии характерно для выпуклой поверхности подложки.

Таким образом, можно сделать вывод, что влияние размерных эффектов и линейного натяжения на гетерогенную нуклеацию на сфероидальных подложках достаточно существенно, что требует их учета.

Исследование выполнено в рамках базового государственного задания ИТПМ СО РАН.

Моделирование и исследование процессов нуклеации и роста газовых гидратов метана

М. Б. Юнусов¹, А. В. Мокшин^{1,2}

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

²Удмуртский Федеральный Исследовательский Центр УрО РАН, 426068 Россия г. Ижевск, ул. Барышникова 53

Работа посвящена рассмотрению структурных характеристик переохлажденной двухфазной жидкой системы $H_2O + CH_4$ в процессе фазового перехода в кристаллическое или аморфное состояние, то есть, в процессе гидратообразования. Гидраты представляют собой нестехиометрические соединения, образованные кристаллической решеткой молекул воды, связанных водородными связями, и молекул низкомолекулярных газов (H_2 , CO_2 , H_2S , ...), в том числе и природных (CH_4 , C_2H_6 , ...).

На данный момент предложено множество гипотез, описывающих этапы нуклеации и роста гидратов: гипотеза лабильных кластеров (LCH), гипотеза локального структурирования (LSH), гипотеза адсорбции клетками (CAN) [1]. Перспективным представлением о процессе гидратообразования является то, что образовавшееся критическое ядро в растворе H_2O +газ растет за счет адсорбции соседних молекул газа и образования водных клеток вокруг них.

Произведена серия крупномасштабных молекулярно-динамических симуляций процесса кристаллизации системы, включающей 2944 молекул H_2O и 512 молекул CH_4 . Моделирование осуществлялось в NPT-ансамбле при температуре 250К и имело длительность 100 нс. Модель воды описывается потенциалом TIP4P, модель метана описывается потенциалом OPLS-AA.

Произведены расчет и отслеживание эволюции параметра локального структурирования ($F3$), параметра тетраэдрического порядка ($F4$), удельного количества водородных связей, количества образующихся и разрушающихся водородных связей на всем протяжении моделирование. Указанные характеристики позволяют выделить важные этапы нуклеации и роста гидрата.

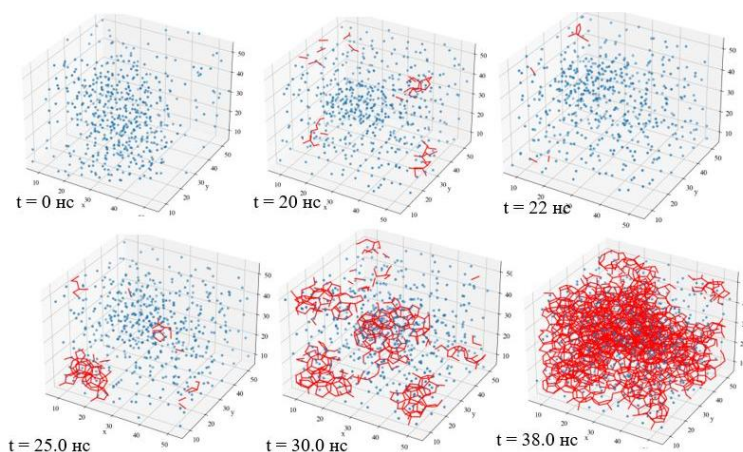


Рисунок 1. Ключевые этапы формирования газового гидрата. Синие точки – молекулы растворенного газа. Красные линии – долгоживущие водородные связи кристаллической решетки гидрата.

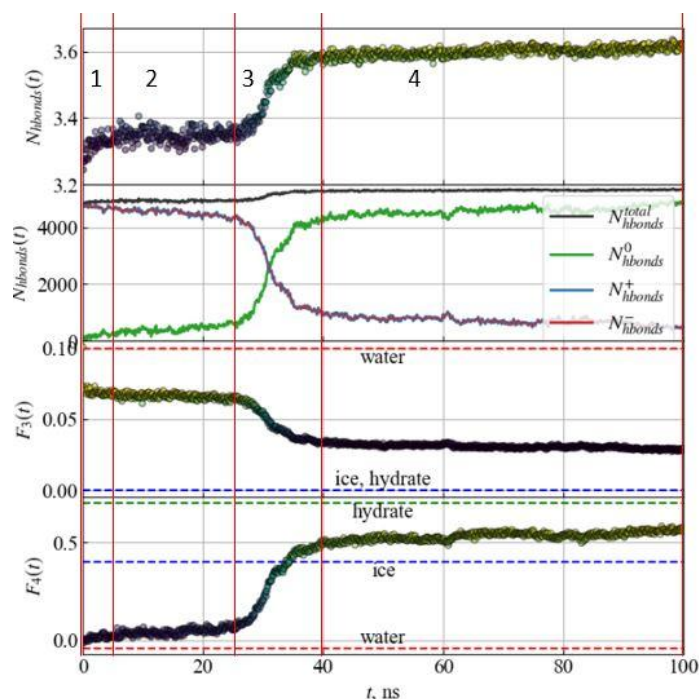


Рисунок 2. Ключевые этапы формирования газового гидрата, отраженные в параметрах порядка F_3 , F_4 , а также в динамике водородных связей:
 1 – растворение газа;
 2 – насыщение раствора, появление и разрушение колец, упорядочение H_2O вокруг CH_4 ;
 3 – появление зародыша критического размера (первой клетки), рост гидрата, адсорбция газа на клетках, рост кол-ва молекул новой фазы;
 4 – завершение формирования гидрата, аморфная фаза.

Конечные значения параметров порядка свидетельствуют об аморфности системы, что предсказано двухступенчатым механизмом роста гидратов [2]. Анализ количества и времен жизни водородных связей и кольцевых структур на всем протяжении моделирования свидетельствует о непрерывной перестройке водной решетки на поверхностном слое ядра

На основе функции радиального распределения молекул растворенного газа $g_{GG}(r)$ произведена оценка потенциала средней силы $PMF(r)$ между гидратной клеткой и растворенным метаном [3]. Данный потенциал характеризуется глубоким минимумом при 6.2 Å и вторым минимумом при 10.2 Å, разделенными потенциальным барьером при 8.8 Å, который должен преодолеть газ, чтобы адсорбироваться на поверхность ядра. Данный барьер преодолевается при достижении критической локальной концентрации газа в 0.044 мольной доли.

Работа выполнена в рамках программы стратегического академического лидерства Казанского (Приволжского) федерального университета («Приоритет- 2030»).

[1] Zhang Z. et al. Molecular simulation studies on natural gas hydrates nucleation and growth: A review // China Geology. – 2022. – Т. 5. – №. 2. – С. 330-344.

[2] Jacobson L. C. et. al. Amorphous precursors in the nucleation of clathrate hydrates // Journal of the American Chemical Society. – 2010. – Т. 132. – №. 33. – С. 11806-11811.

[3] Guo G. J. et al. Why can water cages adsorb aqueous methane? A potential of mean force calculation on hydrate nucleation mechanisms // Physical Chemistry Chemical Physics. – 2009. – Т. 11. – №. 44. – С. 10427-10437.

Электрохимическое осаждение композиционных покрытий никеля с добавлением двумерного карбида титана (MXene)

А.Е. Берёзкина^{1,2}, И. К. Аверкиев²

¹Удмуртский государственный университет, 426034, Россия, г. Ижевск, ул. Университетская, 1.

²Удмуртский федеральный исследовательский центр УрО РАН, 426000, Россия, г. Ижевск, ул. Татьяны Барамзиной, 34.

MXenes – это класс двумерных карбидов, карбонитридов и нитридов переходных металлов, которые имеют гексагональную кристаллическую решетку с общей формулой $M_nX_{n-1}T_x$ (где M – переходный d -элемент, X – атом углерода или азота, T_x – функциональные группы $-F$, $=O$, $-OH$ и др.). MXenes являются перспективными материалами для широкого спектра применений. Свойства двумерных карбидов заметно отличаются от их объемных аналогов, что предоставляет возможность их широкого использования в ряде практического применения: от электрохимического хранения энергии до очистки загрязнений из окружающей среды [1]. Однако несмотря на широкое применение остается вопрос о создании эффективной и безопасной методики получения двумерных карбидов титана и исследовании их физико-химических свойств [2], которые в дальнейшем могли бы применяться в различных областях науки и техники.

Использование наноматериалов в качестве добавок в электролиты для электроосаждения, включая никелирование, становится все более популярным благодаря их способности улучшать качественные характеристики покрытия. Наночастицы могут влиять на различные аспекты осаждения, включая толщину и микротвердость осажденного материала. Одним из основных преимуществ добавления наноматериалов является повышение качества покрытия. Наночастицы способствуют более равномерному распределению металла на поверхности и улучшая адгезию осадка к подложке [3].

В работе обсуждаются результаты электрохимического осаждения никеля с добавлением в электролит двумерного карбида титана. В данном исследовании сравнивается морфология (рис.1) и микротвердость осаждённого никеля с добавочным материалом и без него соответственно, при разных параметрах осаждения.

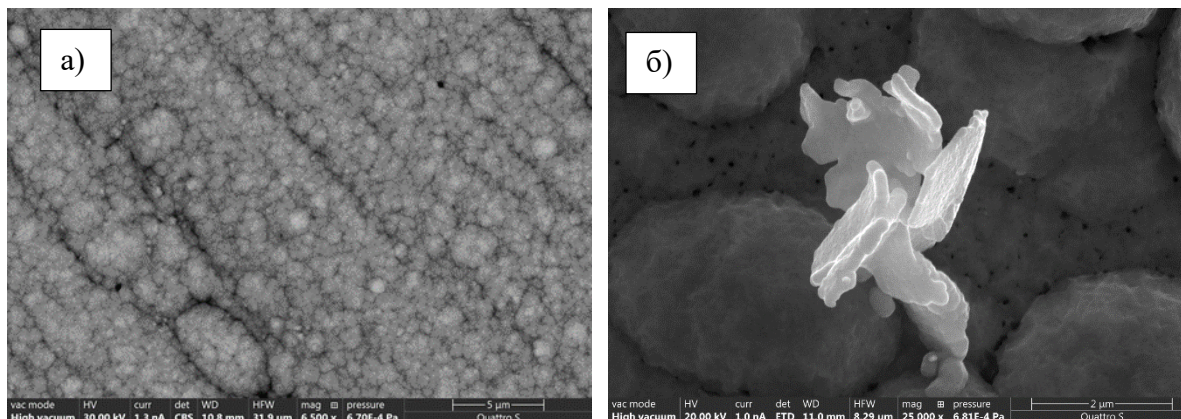


Рисунок 1. Морфология поверхности осажденного никеля: а) без добавления двумерного карбида титана; б) с добавлением двумерного карбида титана.

Работа выполнена в рамках Государственного задания Министерства науки и высшего образования РФ №1022040600207-2. Исследования проводились в центре коллективного пользования «Поверхность и новые материалы» УдмФИЦ УрО РАН.

- [1] Rahman U. U. et al. *Molecules*, 2022, 27, 15, 4909.
- [2] Naguib M., Barsoum M. W., Gogotsi Y. *Advanced Materials*, 2021, 33, 39, 2103393.
- [3] Tseluikin V. et al. Study of Electrodeposition and Properties of Composite Nickel Coatings Modified with Ti₃C₂TX MXene // *Coatings*, 2023. Т. 13. №. 6. С. 1042.

Термический гистерезис в исследовании неравновесных фазовых превращений плавления/кристаллизации благородных металлов под воздействием ультракороткого лазерного излучения

О.Н. Королева, В.И. Мажукин, А.В. Шапранов, М.М. Демин, А.В. Мажукин

Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН, 125047 Россия, Москва, Миусская пл., д.4

Явление плавления/кристаллизации металлов, представляющее фазовое превращение первого рода, играет важнейшую роль в материаловедении и инженерии. Наиболее изучены процессы плавления/кристаллизации, протекающие квазиравновесно [1]. Траектория процессов плавления/кристаллизации в фазовом пространстве проходит через равновесные состояния только в предельном случае бесконечно медленного нагрева/охлаждения. Изменение режимов нагрева мишени может привести к неравновесному течению процессов плавления/кристаллизации, проявляющихся в явлении термического (теплового) гистерезиса. Воздействие мощного ультракороткого лазерного излучения на металлическую мишень является одним из режимов, при котором возникает явление термического гистерезиса.

При таком воздействии процессы плавления-кристаллизации становятся неравновесными, а фазовые переходы, сопровождаются возникновением метастабильных перегретых/переохлаждённых состояний в исходной фазе [2]. Величина термического гистерезиса, являясь характеристикой степени перегрева/переохлаждения конденсированной фазы, связана со скоростью движения фазового фронта [3]. Величины энергетических затрат при разрушении связей дальнего порядка во время плавления и зародышеобразование при кристаллизации дают представление о степени неравновесности процессов плавления/кристаллизации. Поэтому гистерезисные свойства представляют значимый интерес для исследования неравновесного плавления/кристаллизации. Исследование этого явления способствует также решению такой фундаментальной проблемы, как определение предельных значений перегрева твердого тела и переохлаждения жидкости.

Экспериментальный подход исследования термического гистерезиса материалов, являющийся традиционным, имеет ряд ограничений, прежде всего по диапазону условий измерений, особенно в области плавления. Известно, что эксперименты по исследованию переохлаждения металлов хорошо описаны в литературе, в отличие от исследований перегрева. В силу этого актуально использование теоретического подхода [3, 4] в исследовании процессов плавления-кристаллизации, основным инструментом которого является метод молекулярной динамики (МД).

В температурном диапазоне $600 \leq T \leq 2000$ К на основе термического гистерезиса энтальпии и плотности рассматриваются особенности неравновесного плавления и кристаллизации благородных металлов меди (рис. 1a) и золота (рис. 1b).

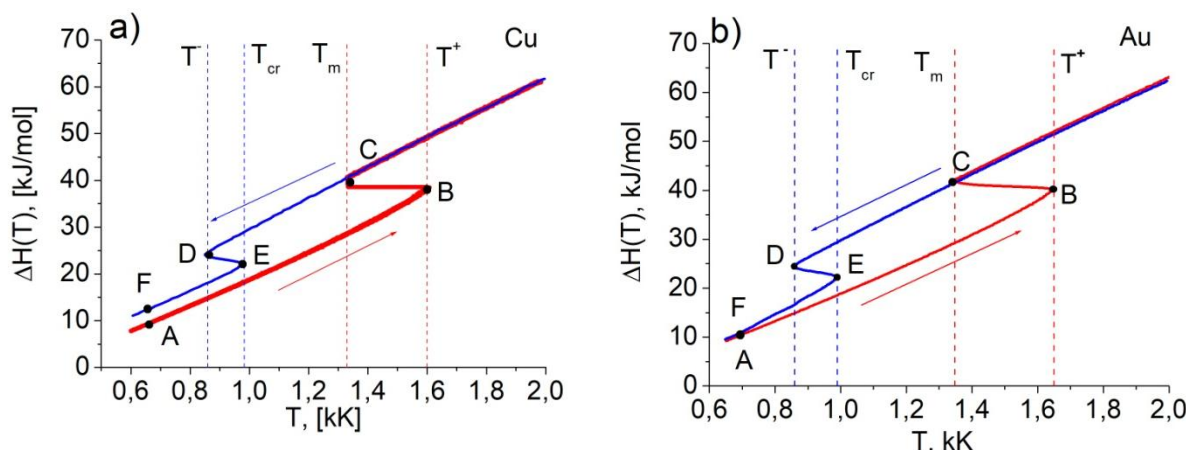


Рис. 1. Тепловой гистерезис энтальпии а) меди, б) золота.

Термический гистерезис, получен для исследуемых металлов из молекулярно-динамического моделирования. В качестве потенциалов межчастичного взаимодействия использовались потенциалы из группы “погруженного атома” ЕАМ разработанные и протестированные в [4] для золота и в [5] для меди.

- [1] Aleksandrov V.D., Aleksandrova V.N., Barannikov A.A., *et al.*, Melting and crystallization of copper, silver, and gold droplets // *Tech. Phys. Lett.*, 2001. Vol. 27, P. 258. Doi:10.1134/1.1359845.
- [2] Luo S.-N., Ahrens T.J., Çağın T., Strachan A., Goddard W.A., Swift D.C. Maximum superheating and undercooling: Systematics, molecular dynamics simulations, and dynamic experiments // *Phys. Rev. B*, 2003. Vol. 68(13), P. 134206. Doi:10.1103/physrevb.68.134206
- [3] Mazhukin V.I., Shapranov A.V., Perezhigin V.E., Koroleva O.N., Mazhukin A.V. Kinetic melting and crystallization stages of strongly superheated and supercooled metals // *Math. Models Comput. Simul.*, 2017. Vol. 9(4), P. 448. Doi: 10.1134/S2070048217040081
- [4] Zhakhovskii V.V., Inogamov N.A., Petrov Yu.V., Ashitkov S.I., Nishihara K. Molecular dynamics simulation of femtosecond ablation and spallation with different interatomic potentials // *Appl. Surf. Sci.*, 2009. Vol. 255, P. 9592.
- [5] Mishin Y., Mehl M. J., Papaconstantopoulos D. A., Voter A. F., Kress J. D. Structural stability and lattice defects in copper: Ab initio, tight-binding, and embedded-atom calculations // *Phys. Rev. B*, 2001. Vol. 63, P. 224106.

О «первичной», «вторичной» и «третичной» макроструктуре отливок из коррозионностойкой стали мартенситного класса микролегированной ниобием

Л. В. Палаткина¹, А. П. Куликов¹, И. А. Щепкин¹, С. В. Новиков¹

¹Институт металлургии и машиностроения, АО «НПО «Центральный научно-исследовательский институт технологии машиностроения» Росатома, 115088, г. Москва, ул. Шарикоподшипниковская, 4.

Литейные коррозионностойкие хромоникелевые стали на основе системы легирования Fe-13Cr-5Ni имеют хорошие технологические свойства, а металлургическое качество металла и физическая однородность полученных из них отливок, при прочих равных условиях, являются основными показателями, определяющими дальнейшее расширение направлений применения данной группы специальных сталей - как альтернативы более дорогостоящих высоколегированных сплавов для тяжелых условий эксплуатации. Последнее основано на развивающемся направлении повышения их эксплуатационной стойкости за счет химико-термической обработки и/или катодной защиты [1, 2, 3]. В работе исследовали коррозионностойкую сталь мартенситного класса микролегированную ниобием химического состава в рамках марки 09X16H4БЛ по ГОСТ 977-88.

При подборе реактива для выявления действительного размера дендритных кристаллов, образующихся в момент кристаллизации использовали классический подход, основанный на микроликвации фосфора (образующийся в начале затвердевания кристаллический скелет дендритов обеднен фосфором, в то время как остальные участки обогащены). В следствие низкой диффузионной подвижности фосфора возникшее после затвердевания распределение сохраняется неизменным. Таким образом, травление реактивом Оберхоффера (состав № 2: 0,1 г SnCl; 0,2 г CuCl; 6 г FeCl; 100 см³ H₂O; 10 см³ HCl; 100 см³ спирт), выявило распределение фосфора, и тем самым охарактеризовало первичную структуру дендритного каркаса. Однако, выполненное травление показало достаточно необычный результат при исследовании металлографических шлифов с разным увеличением (в пределах увеличений соответствующих уровню макроструктуры), так были идентифицированы:

- «вторичная» макроструктура («ложная» [4, 5] не характеризует действительного размера и строения первичных кристаллов, образующихся при затвердевании) имеет транскристаллитное строение и наблюдается при малых увеличениях (рис.1, а) или без использования микроскопа;

- «первичная» макроструктура («действительная» имеет дендритный характер строения) представлена основными двумя зонами, зоной столбчатой кристаллизации - наблюдаемой с внешней поверхности образца и состоящей из дендритов с параллельными осями I порядка, и второй зоны равноосных кристаллов с беспорядочно ориентированными развитыми дендритами (рис.1, б красным выделены искривленные границы зёрен «вторичной» макроструктуры с характерным скоплением первичных карбидных фаз богатых ниобием, см.

Всероссийская конференция

увеличенный фрагмент области с границей рис. 1, з) наблюдаемые при увеличениях 25 – 30 крат;

- «третичная» [1] макроструктура, выявленная в результате ускоренной оценки склонности, исследуемой в работе, стали к межкристаллитной коррозии посредством кратковременного электролитического травления в 10 % щавелевой кислоте (плотность тока 1,0 А/см², температура не более 26,5 °С, время 30 с.) образцов подвергнутых термическому улучшению [6]. Наблюдается при увеличениях от 50 крат; является следствием протекания при термических воздействиях процессов собирательной рекристаллизации в пределах зерен «вторичной» макроструктуры.

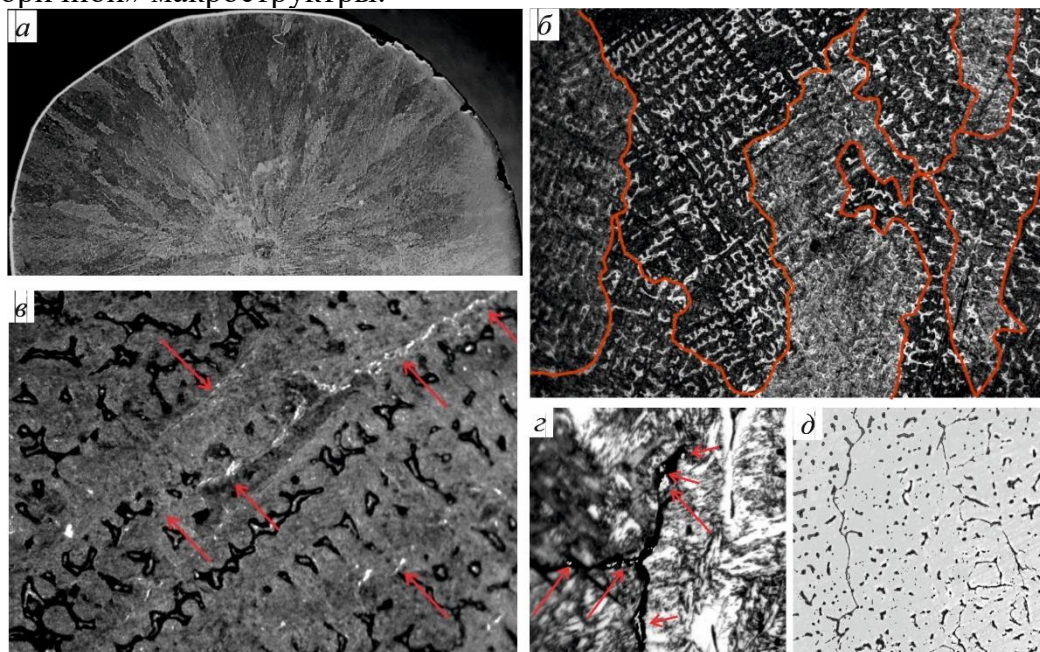


Рисунок 1. Характерные уровни макроструктуры мартенситной стали

Следует отметить, что микроструктура при увеличениях от 100 крат и выше соответствует мартенситу и показана на рис. 1 з) при увеличении 300 крат.

На сегодняшний день для хромоникелевых коррозионностойких сталей мартенситного класса практически отсутствуют данные об особенностях затвердевания расплава с позиции образования уровней макро- и микроструктуры. Целью настоящей работы являлась попытка восполнить этот пробел.

[1] Scheuer C. J., Cardoso R. P., Brunatto S. F. An overview on plasma-assisted thermochemical treatments of martensitic stainless steels //Surface Topography: Metrology and Properties. – 2023. – Т. 11. №. 1. – С. 013001. DOI:10.1088/2051-672X/acb372

[2] Чаттерджи-Фишер, Эйзелл Ф.В., Азотирование и карбонитрирование М.: Металлургия, 1990. – 280 с.

[3] Dalibón E. L., Dalke A., Biermann H., Brühl S. P., Short time nitriding and nitrocarburizing of martensitic stainless steel // Surface and Coatings Technology, V. 485, pp. 1-8, Pub Date : 2024-05-22 , DOI: 10.1016/j.surfcoat.2024.130931

Всероссийская конференция

[4] Попов А.А., Фазовые превращения в металлических сплавах // *Металлургия*. Москва, 1968. – 313 с.[5] Флемингс М. С., Процессы затвердевания / *Мир*. Москва, 1977. – 423 с.

[5] Флемингс М. С., Процессы затвердевания / *Мир*. Москва, 1977. – 423 с.[6] *Металлография железа*. Т. III. Кристаллизация и деформация стали // *Металлургия*. Москва, 1972. – 236 с.

[6] *Металлография железа*. Т. III. Кристаллизация и деформация стали // *Металлургия*. Москва, 1972. – 236 с.

Области легкого стеклования в трехкомпонентных металлических системах Sc-Co-Al и Gd-Co-AlЕ. С. Подкин¹, П. В. Котенков¹, А. В. Майорова¹

¹ Институт металлургии имени академика Н.А. Ватолина Уральского отделения Российской академии наук, 620016 Россия, г. Екатеринбург, ул. Амундсена, 101

В данной работе рассматривается способ решения актуальной проблемы прогнозирования процессов образования аморфных составов в многокомпонентных системах с верификацией. Данное исследование проводится на примере системы Sc-Co-Al-Gd.

Для решения задачи точного прогнозирования составов многокомпонентных соединений могут быть использованы методы, основанные на кластерах, в которых устанавливается прямая связь между составом и атомной структурой, данные методы находят свое применение в проектировании многокомпонентных сплавов [1-2].

Метод, основанный на кластерах, целесообразен на основании того, что является менее затратным по времени за счет снижения числа расчетов в системе Sc-Co-Al-Gd путем разделения данной четырехкомпонентной системы на две трехкомпонентные системы и определения областей легкого стеклования в системах Sc-Co-Al и Gd-Co-Al.

Кластеры, которые выполняют роль основных структурных единиц в конструкции сплава, тесно связаны со способностью образовывать металлические стекла, в определенных условиях. В работе [3] показано идеальное соотношение радиусов R^* атомов (R_i/R_j) для кластеров с различными координационными числами (к.ч., N), для которых характерно образование металлических стекол.

Фактическое отношение атомных радиусов R_a в сплаве можно рассчитать из отношения атомного центрального радиуса к среднему радиусу атомов в кластерной ячейке, окружающих центральный атом:

$$\Delta = (R_a - R^*) / R^* \cdot 100\% \quad (1),$$

где значение Δ в диапазоне $\pm 10\%$ соответствует критерию плотной упаковки атомов, характерной для металлических стекол.

Согласно кластерному подходу четырехкомпонентную систему можно упростить до комбинации бинарных кластеров, которые являются основой тройных систем (Gd, Sc)-Co-Al с коэффициентами α , β представляющими их относительные пропорции:

$$CBMG = \alpha A + \beta B \quad (2),$$

где $A = [C^* \text{ кластер (Al - Gd)} + D^* \text{ кластер (Co - Gd)}]$, $B = [E^* \text{ кластер (Al - Gd)} + F^* \text{ кластер (Co - Gd)}]$.

С использованием разработанного нами геометрического термодинамического метода предсказания было установлено и показано, что

объемно-аморфные составы трехкомпонентных сплавов соответствуют составам $Gd_{49}Co_{28}Al_{23}$, $Sc_{52}Co_{28}Al_{20}$ [4].

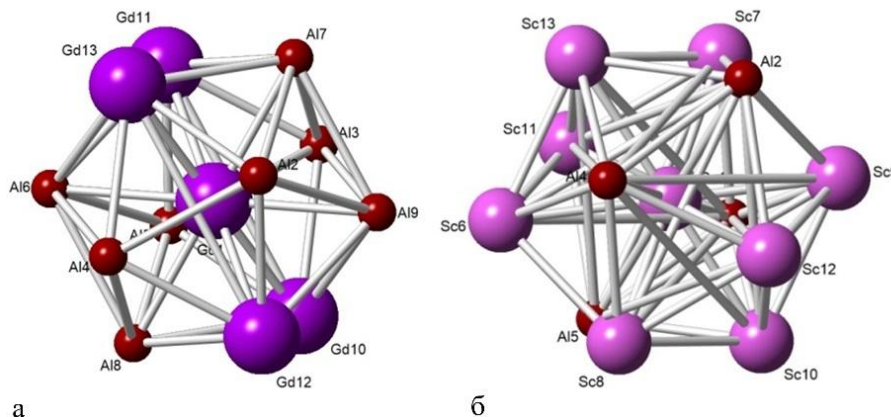


Рисунок 1. Кластеры, содержащие атомы Al:
 а - $Gd-Al_5Gd_7$; б- $Sc-Al_{11}Sc_1$

При выполнении расчетов (уравнения 1 и 2) было установлено, что оптимальными бинарными кластерами обладающими наиболее плотной упаковкой для трехкомпонентных систем с высокой стеклообразующей способностью $Gd_{49}Co_{28}Al_{23}$, $Sc_{52}Co_{28}Al_{20}$ являются (A_3B_4) ; $Al-Al_5Gd_5 = 0.43\text{ат\%}$, $Co-Co_4Gd_5 = 0.57\text{ат\%}$; (AB_2) $Sc-Al_8Sc_2 = 0.33\%$, $Sc-Co_4Sc_6 = 0.67\text{ат\%}$.

Соответствующие для тройных систем коэффициенты α , β взятые в одинаковых соотношениях 0.5 (уравнение 3) должны приводить к образованию четырехкомпонентного состава с высокой стеклообразующей способностью.

$$ABCD = 0.5A + 0.5B. \quad (3)$$

с учетом коэффициента 0.5 : $A = 0.215(Al-Al_5Gd_5) + 0.285(Co-Co_4Gd_5)$, $B = 0.165(Sc-Al_8Sc_2) + 0.335(Sc-Co_4Sc_6)$.

Проведенные расчеты показывают, что соответствующий аморфизирующий четырехкомпонентный состав близок к эквимольному $Sc_{26}Gd_{24}Al_{24}Co_{26}$.

Если соотношение равно AB_2 ($\alpha=1$, $\beta=2$), то соответствует составу $Sc_{35}Gd_{16}Al_{24}Co_{25}$.

Предсказанный нами состав $Sc_{35}Gd_{16}Al_{24}Co_{25}$ близок к полученному в литературе $Sc_{36}Y_{20}Al_{24}Co_{20}$ (радиус $Y = Gd$) [5]. Таким образом, данный подход может быть использован для прогнозирования составов многокомпонентных металлических стекол с высокой стеклообразующей способностью.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (проект № 25-23-00171).

- [1] Y.H. Zhu, W.Z. Wang, Y.Y. Song, S.M. Zhang, H. Li, A.M. Wang, H.F. Zhang, Z. W. Zhu, Atomic-scale Nb heterogeneity induced icosahedral short-range ordering in metallic glasses // *J. Mater. Sci. Technol.*, 2022. Vol.108 (108). P. 73–81.
- [2] Z.R. Wang, R. Chen, J.B. Qiang, S. Zhang, Y. Zhao, Cluster-based composition interpretation of dual-phase glass-crystal alloys via the example of Mg₄₉Cu₄₂Y₉ // *J. Non Cryst. Solids*, 2021. Vol. 566 P. 120886.
- [3] D.B. Miracle, The efficient cluster packing model – an atomic structural model for metallic glasses, *Acta Mater.*, 2006. Vol. 54 (16). P. 4317–4336.
- [4] A.V. Maiorova , V.A. Bykov , P.V. Kotenkov , A.S. Bykov, A new approach to predicting the region of facilitated glass formation in the Sc-Y-Co-Al system // *J. Alloys and Comp.*, 2024. Vol.980. P. 173603
- [5] F. Guo, S.J. Poon, G.J. Shiflet, Metallic glass ingots based on yttrium, *Appl. Phys. Lett.* 83 (2003) 2575–2577, <https://doi.org/10.1063/1.1614420>.

Плотность и электрическое сопротивление сплавов CoFeSiBNb и FeNiBSiNb при высоких температурах

Б. А. Русанов^{1,2}, В. Е. Сидоров^{1,2}, П. С. Попель¹, А. И. Русанова^{2,3}

¹Уральский государственный педагогический университет, 620091 Россия, г. Екатеринбург, пр. Космонавтов 26

²Удмуртский федеральный исследовательский центр Уральского отделения Российской академии наук, 426067 Россия, г. Ижевск, ул. Т. Барамзиной 34

³Институт металлургии УрО РАН, 620016, Россия, г. Екатеринбург, ул. Амундсена, 101

Многокомпонентные сплавы на основе кобальта и железа, особенно составы CoFeSiBNb активно исследуются в последние годы благодаря уникальным свойствам, которые эти материалы демонстрируют в аморфном состоянии. Такие составы получают не только в виде аморфных лент, но также в виде объёмно-аморфных сплавов (bulk metallic glasses – BMG). Однако, вопрос изучения из физических свойств в широком интервале температур остаётся актуальным, так как информация о них может обеспечить создание способов их предварительной подготовки перед быстрой закалкой.

В настоящей работе изучены плотность (методом проникающего гамма-излучения) и электрическое сопротивление (бесконтактным методом во вращающемся магнитном поле) сплавов CoFeSiBNb и FeNiBSiNb. Измерения выполнены на автоматизированных установках в температурном интервале $T = 300 - 1700$ К в режиме нагрева и последующего охлаждения.

Установлено, что температурные зависимости плотности сплавов в кристаллическом состоянии являются нелинейными, а в жидком состоянии хорошо описываются линейными функциями. При перегреве расплавов выше определенной температуры зафиксирован гистерезис плотности (несовпадение значений плотности при нагреве и последующем охлаждении), что может свидетельствовать о структурных превращениях, происходящих в расплавах.

По результатам опытов по измерению электрического сопротивления показано, что в кристаллическом состоянии электросопротивление сплавов растет при нагреве и достигает максимума при температуре солидус. При этом ход кривой электросопротивления нельзя аппроксимировать линейной функцией. Процесс начала плавления сплава характеризуется отсутствием изменений абсолютных значений электросопротивления. В жидком состоянии политемпермы сопротивления можно описать линейными функциями.

На основе экспериментальных данных рассчитаны коэффициенты объёмного расширения и молярные объёмы сплавов. Полученные результаты могут быть использованы при оптимизации процессов быстрозакалённых сплавов CoFeSiBNb и FeNiBSiNb.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Российского научного фонда № 25-23-00049.

Форма дендритного кристалла: геометрико-морфологическая теория в сравнении с экспериментом

Л.В.Торопова¹, П.К.Галенко², Д.В.Александров²

¹Кафедра теоретической и математической физики, ФГАОУ ВО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина», 620000, Россия, г. Екатеринбург, пр. Ленина, 51

²Лаборатория многомасштабного математического моделирования, ФГАОУ ВО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина», 620000, Россия, г. Екатеринбург, пр. Ленина, 51

В работе исследуется форма дендритного кристалла с шестикратной симметрией кристаллической решетки, а именно вершина, первичный ствол, внутренний и внешний конверты, а также выполнено сравнение с экспериментальными данными.

Вершина дендрита находится в начале декартовой системы координат, а ветви кристалла всегда лежат в отрицательной полуплоскости. Дендрит растет вдоль пространственной декартовой z -координаты, как показано на рисунке 1.

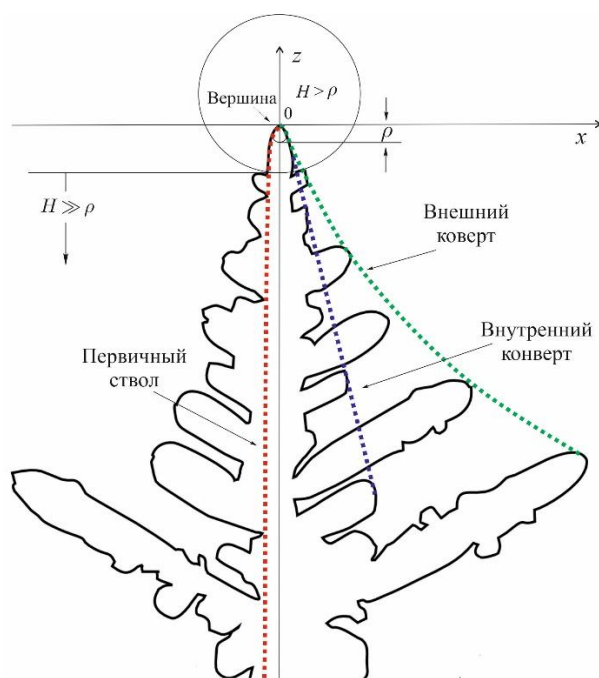


Рисунок 1.

Изображение ветви дендритного кристалла с шестикратной симметрией кристаллической решетки: ρ – диаметр вершины, H – расстояние от вершины дендрита.

Согласно геометрико-морфологической теории [1,2] форму дендритного кристалла можно описать следующими уравнениями:

$$z(x) = \gamma z_{GEN}(x), \quad z_{GEN} = \frac{a_L(x)|x|^n - a_S(x)z_T(x)}{\lambda a_S(x)|x|^{-n} + a_L(x)|x|^n(x)^{-1}}$$

$$z_T(x) = -\alpha \frac{b_S(x)x^2 + b_L(x)|x|^{\frac{3}{2}}}{b_S(x)|x|^{\frac{1}{2}} + b_L(x)|x|^{-\frac{1}{2}}},$$

где $a_L(x)$, $a_S(x)$, $b_L(x)$, $b_S(x)$ – функции шивки, γ представляет собой константу формы, ответственную за растяжение/удлинение дендрита в направлении роста z кристалла, λ^{-1} определяет асимптотический наклон конверта дендрита или первичного ствола при больших $|x|$, α указывает на толщину (крутизну) формы вершины дендрита, n (скейлинг) представляет собой экспоненту функции, отвечающей за описание толщины первичного ствола, а также формы внешней/внутренней конверта вторичных дендритных ветвей [1].

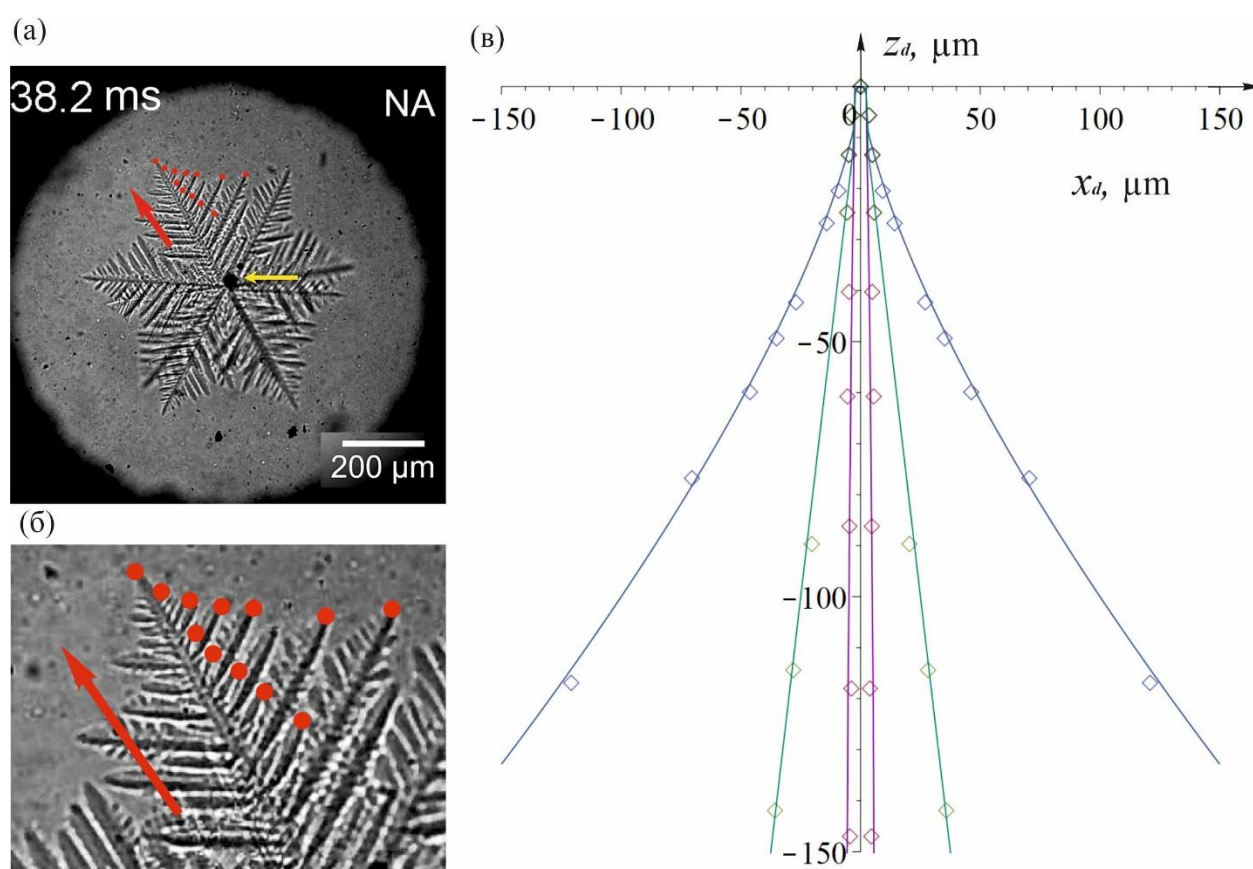


Рисунок 2. (а) Изображение кристалла льда [3]. Красная стрелка указывает направление роста, а красные точки демонстрируют кончики ветвей внешнего и внутреннего конвертов, использованные для расчетов. (б) Увеличенное изображение ветви дендрита, использованное для расчетов. (в) Сравнение теоретической модели (сплошные линии) с кристаллом льда (открытые точки).

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект 24-19-00566).

[1] D. V. Alexandrov, P. K. Galenko, L. V. Toropova, The shape of dendritic tips, primary stems and envelopes, Phys. Lett. A 501 (2024) 129375.

Всероссийская конференция

- [2] L. V. Toropova, D. V. Alexandrov, P. K. Galenko, G. Demange, The shape of dendritic tips, primary stems and envelopes: Morphological theory versus phase-field simulations, *Comp. Mater. Sci.* 244 (2024) 113223.
- [3] H. Takahashi, T. Kono, K. Sawada, S. Kumano, Y. Tsuru, M. Maruyama, M. Yoshimura, D. Takahashi, Y. Kawamura, Y. Uemura, S. Nakabayashi, Y. Mori, Y. Hosokawa, H. Y. Yoshikawa, Spatiotemporal control of ice crystallization in supercooled water via an ultra-short laser impulse, *J. Phys. Chem. Lett.* 14(19) (2023) 4394–4402.

Атомистическое моделирование структуры, термодинамических свойств и фазовых превращений в сплавах Ti-Al с помощью машинно-обучаемых межатомных потенциалов

Е.О. Хазиева¹, Р.Е. Рыльцев¹, И.А. Балякин¹, Д.О. Закирьянов³, М.В. Петрик²

¹Институт металлургии имени академика Н.А. Ватолина УрО РАН, 620016, г. Екатеринбург, ул. Амундсена, 101

²Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, 620108, г. Екатеринбург, ул. Софьи Ковалевской, 18

³Институт высокотемпературной электрохимии УрО РАН, 620066, г. Екатеринбург, ул. Академическая, стр. 20

Для решения проблемы управления структурным состоянием при разработке новых материалов всё более широкое применение находят методы атомистического моделирования. Использование таких методов позволяет с высокой надежностью предсказать структурное состояние и свойства сплавов в зависимости от состава и режимов термообработки. Ключевой проблемой атомистического моделирования является разработка силовых полей, обеспечивающих оптимальный баланс между точностью и вычислительной эффективностью. В настоящее время наиболее эффективным классом силовых полей являются машинно-обучаемые потенциалы (MLIPs). Основная идея такого подхода – аппроксимировать поверхность потенциальной энергии системы с помощью некоторой многочастичной функции общего вида (например, нейронной сети) используя эталонные значения, полученные с помощью *ab initio* расчетов. Полученный потенциал затем используется в рамках классического атомистического моделирования что позволяет достигнуть *ab initio* точности при меньших на порядки меньших вычислительных затратах [1]. В последние годы было показано, что MLIPs на основе нейронных сетей являются эффективным инструментом для расчета физико-химических свойств металлических сплавов [2-5].

Данная работа посвящена разработке и верификации MLIPы для системы Ti-Al. Данные сплавы привлекли внимание своими уникальными свойствами. А также они имеют важное практическое значение как конструкционные материалы с возможностью добавления легирующих элементов. Несмотря на значительные успехи в разработке титановых сплавов, механизмы, определяющие стабильность фаз, кинетику распада в системе, влияние легирующих элементов, таких как Zr, Hf, Si, Mo на эти процессы до сих пор остаются недостаточно изученными. Одна из причин этого заключается в том, что в рассматриваемой системе как многочастичные взаимодействия, так и колебательная энтропия дают существенный вклад в свободную энергию сплава. А традиционные методы моделирования с использованием EAM и MEAM потенциалов взаимодействия не позволяют с достаточной точностью описать многочастичные эффекты в сплавах. Разработанный нами машинно-обученный потенциал (реализация DeePMD) с хорошей точностью воспроизводит широкий спектр термодинамических свойств, а также фазовые превращения сплавов Ti-Al.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ № 25-22-00419.

- [1] Y. Mishin, *Acta Mater.* 2021, 214, 116980.
- [2] R.E. Ryltsev, N.M. Chtchelkatchev, *J. Mol. Liq.* 2022, 349, 118181.
- [3] N. Kondratyuk, R. Ryltsev, V. Ankudinov, N. Chtchelkatchev, *J. Mol. Liq.* 2023, 380, 121751.
- [4] Khazieva, E.O., Shchelkatchev, N.M., Tipeev, A.O. et al. Accuracy, Performance, and Transferability of Interparticle Potentials for Al–Cu Alloys: Comparison of Embedded Atom and Deep Machine Learning Models. *J. Exp. Theor. Phys.* 137, 864–877 (2023).
- [5] Khazieva E. O., Chtchelkatchev N. M., Ryltsev R. E. Transfer learning for accurate description of atomic transport in Al–Cu melts // *The Journal of Chemical Physics.* – 2024. – Т. 161. – №. 17.

Секция II

Металлургические и литейные технологии.

Системы САПР.

Метод фазового поля и расчет микроструктур.

Некоторые актуальные проблемы теории и практики затвердевания конструкционных сталей

В. С. Дуб¹, А. Н. Мальгинов¹, А. Н. Тохтамышев¹, М. С. Соловьёва¹,
И.А. Иванов¹

¹Акционерное общество «Научно-производственное объединение «Центральный научно-исследовательский институт технологии машиностроения», 115088 Россия, г. Москва, ул. Шарикоподшипниковская, д.4, к. 1А.

1. О роли примесных элементов при формировании качества и свойств литых изделий из сплавов на основе железа.

Исходя из кластерного механизма роста, можно для всех участников композиции рассчитать не только коэффициент аккомодации As_i (рисунок 1, уравнение (1)), но и интегральную склонность композиции к формированию химической неоднородности G_s (таблица 1, уравнение (2)).

$$As_i = \exp \frac{-Q_{пл\ i}}{R \cdot T_{пл\ i}}, \quad (1)$$

$$G_s = Mr \sum_i^n \frac{\Delta As_i^{abc} \cdot [i]_0}{Mr_i} \cdot \frac{1}{k_{распр\ i}^{равн\ ср}}, \quad (2)$$

где $Q_{пл\ i}$ – теплота плавления i -го элемента, Дж/атом; R – универсальная газовая постоянная, Дж/(моль·К); $T_{пл\ i}$ – температура плавления i -го элемента, К; Mr – молекулярная масса сплава, г/моль; ΔAs_i^{abc} – разница As матричного (Fe) и примесного (i) элемента, дол. ед.; $[i]_0$ – исходная концентрация i -го элемента в стали, %; Mr_i – молекулярная масса примесного элемента i , г/моль; $k_{распр\ i}^{равн\ ср}$ – усреднённое значение равновесного коэффициента распределения элемента i , дол. ед.

Таблица 1 – критерий склонности к ликвации G_s для некоторых марок стали

Группа стали	Марка стали	Среднее содержание элемента, % масс.										G_s
		C	Si	Mn	P	S	Cr	Ni	Mo	V	Fe	
Валковые	45ХНМ	0,4 5	0,2 5	0,5 6	0,04 0	0,04 0	1,6	1,4	0,1 5	-	95,5	3, 6
Для отливок	20Л	0,2 1	0,3 0	0,5	0,04 0	0,04 5	0,3	0,3	-	-	98,2 9	2, 5
Коррозионно-стойкие	12Х18Н10Т	0,1	0,8 0	1,5	0,03 5	0,02	18	10, 0	-	-	69,5 4	4, 1
Реакторные	15Х2НМФ А	0,1 5	0,2 0	0,5	0,00 4	0,00 3	2,0	1,2	0,6	0,1 0	95,2 4	1, 3
Роторные	38ХНЗМФ А	0,3 6	0,2 7	0,3 8	0,02 5	0,02 5	1,3 5	3,2 5	-	0,1 4	94,2	3, 0

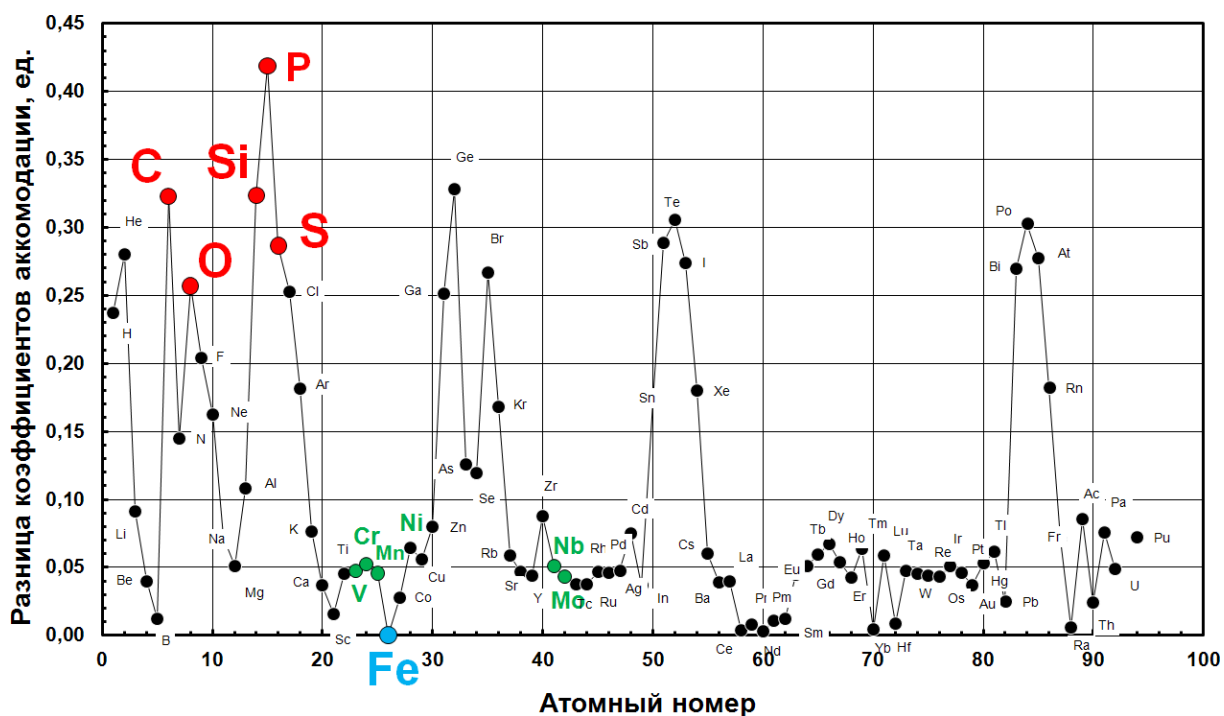


Рисунок 1 – зависимость разности коэффициентов аккомодации железа и примеси от атомного номера

Эти данные показывают, что т. н. технологические примеси (сера, фосфор, остаточные количества цветных металлов, редкоземельные и щелочноземельные металлы – РЗМ и ЩЗМ) имеют значение As_i , значительно отличающееся от коэффициента аккомодации для железа As_{Fe} , и поэтому оказывают очень сильное влияние на литую структуру и свойства литого металла.

Накопление примесей.

Примеси обладают низким коэффициентом распределения, который, однако, зависит от линейной скорости кристаллизации (ЛСК, V) – см. рисунок 2 (Курц У., Фишер Д. Фундаментальные основы затвердевания, 2013).

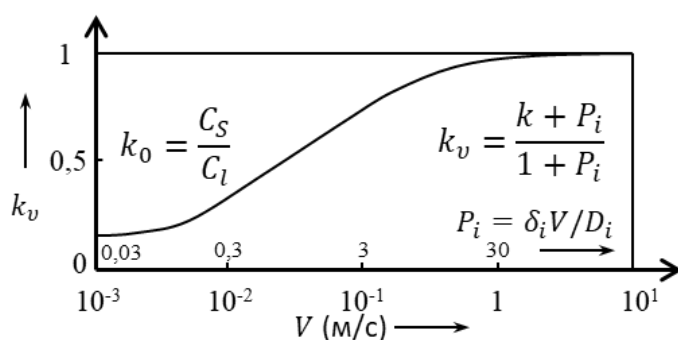


Рисунок 2 – зависимость коэффициента распределения примеси i от ЛСК по уравнению Азиза.
 k_0 – равновесный коэффициент распределения;
 k_v – неравновесный коэффициент распределения;
 P_i – число Пекле.

Примеси могут накапливаться в большом количестве, до процента и более. Накопление примесей приводит к расширению интервала кристаллизации ΔT_{LS} на десятки градусов. Как следствие, увеличивается время локального затвердевания

Всероссийская конференция

($\frac{\Delta T_{LS}}{\varepsilon}$, где ε – скорость охлаждения, °C/c) и увеличивается размер дендритной ячейки, т. е. расстояния между дендритными осями первого и второго порядков: λ_I и λ_{II} соответственно.

Следствием является снижение вязко-пластических и даже прочностных свойств – см. рисунок 3.

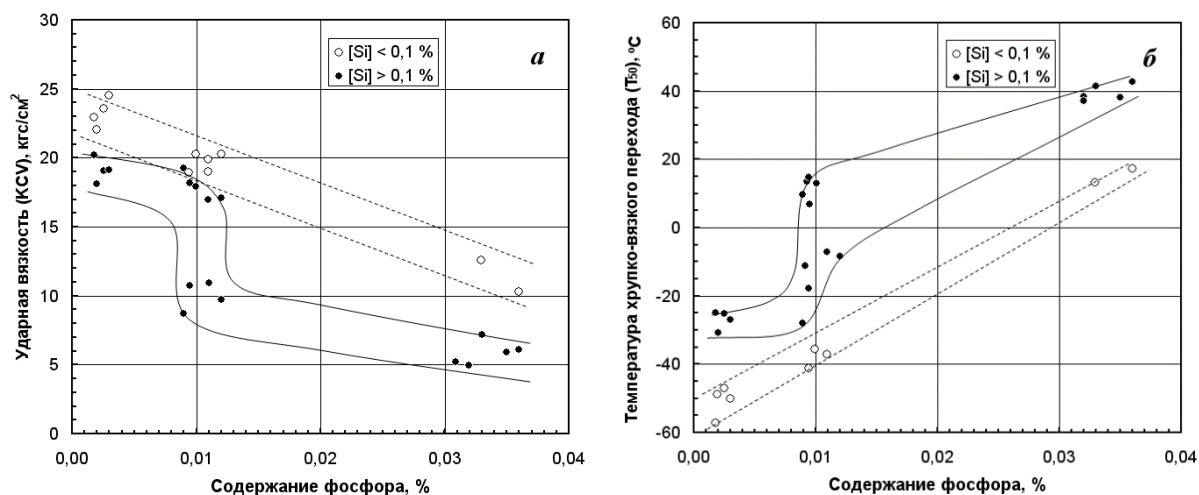


Рисунок 3 – Зависимость ударной вязкости (а) и температуры хрупко-вязкого перехода (б) от содержания фосфора в бескремнистой и раскисленной кремнием стали

Заводы качественной металлургии, в т. ч. металлургические отделения машиностроительных предприятий, добились значимых успехов – см. рисунок 4.

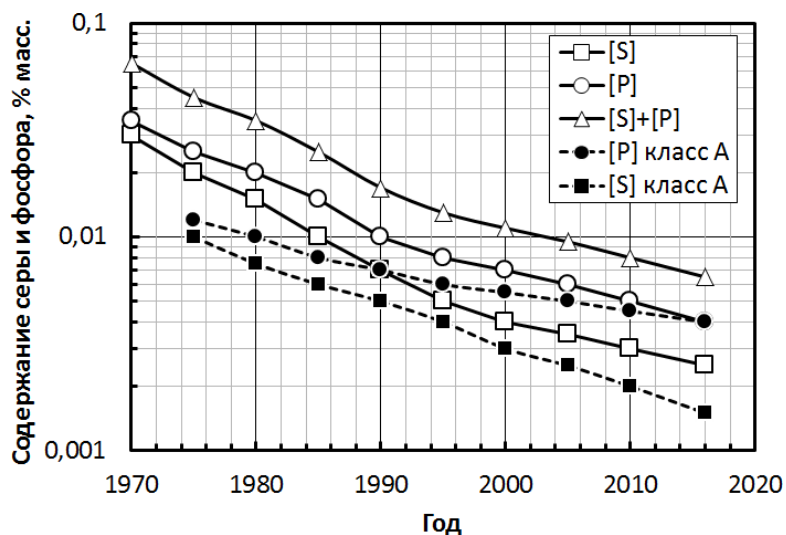


Рисунок 4 – Динамика изменения достигнутого содержания примесей в сталях для энергомашиностроения

Как этого добиться:

- 1) Подбор шихты. Использование металлизированных материалов.
- 2) Активизация окислительного периода (интенсификация подачи кислорода и соблюдение шлакового режима), в первую очередь дефосфорация и декарбюризация.

Всероссийская конференция

3) Активизация восстановительного периода (десульфурация и раскисление в печи и вне печи):

1. - обратный процесс;
2. - пульвер-технологии;
3. - трайп-технологии.

Наиболее эффективным способом является разделение окислительного и восстановительного периодов, с проведением первого в печи, а второго в агрегате внепечной обработки.

Следует обратить внимание на опасность обратных процессов, особенно рефосфорацию.

Итог: что можем достигать – см. рисунок 4. Давно, при разработке теории возникновения шнуров внецентренной ликвации (Λ - и V -образных) был сделан график, представленный на рисунке 5.

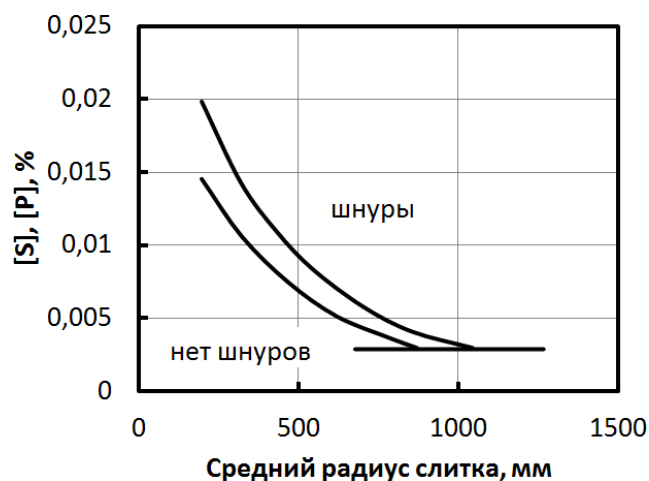


Рисунок 5 – Влияние поперечного сечения слитка на максимальное допустимое содержание серы или фосфора, при котором не возникнут шнуры внецентренной ликвации

Это на сегодняшний день подтвердилось – для устранения зон химической неоднородности целесообразно иметь содержание серы и фосфора:

$$[S] \leq (2 \dots 4) \cdot 10^{-3}, [P] \leq (4 \dots 6) \cdot 10^{-3}$$

$$([S] + [P]) \leq 8 \cdot 10^{-3}.$$

2. Использование макротеплового моделирования для создания паспорта слитка.

Существует три теплофизические величины:

V – линейная скорость кристаллизации (ЛСК), м/с;

G – градиент температуры, °С/м;

ϵ – скорость охлаждения, °С/с;

Для идеального изотропного материала, независимыми являются две из перечисленных величин. Это используется в расчётах.

Реально – для кристаллических систем, все эти величины независимы и являются векторными (тензорными) величинами.

Все три величины могут быть рассчитаны при анализе эволюции двухфазной области (ДФО) в определённых (договоренных) точках: как правило, на

Всероссийская конференция

периферии (край), в середине радиуса критического сечения и в центре критического сечения слитка.

Значения величин V^i , G^i и ε^i определяют в выбранных точках – см. рисунок б.

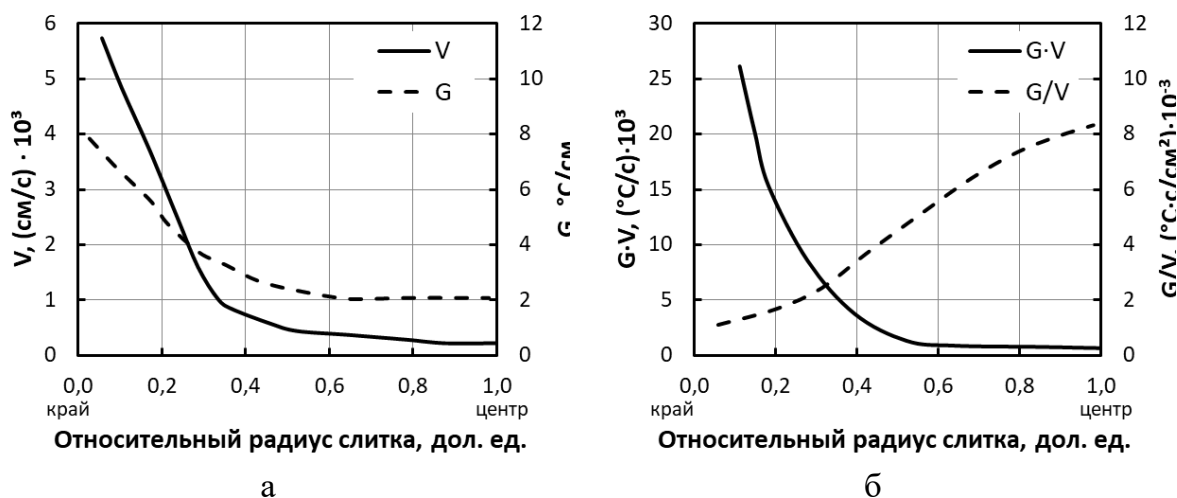


Рисунок б – Изменение значений ЛСК (V), градиента температуры (G) и соответствующих значений $G \cdot V$ и G/V вдоль радиуса критического сечения слитка

Зная эпюру скоростей и начальные содержания элемента можно с помощью программы «Крупный слиток» (АО «НПО «ЦНИИТМАШ») и графика зависимости $k_e = F(V)$, где k_e – эффективный коэффициент распределения, определить содержание всех (необходимых) химических элементов по сечению затвердевшего слитка.

В зависимости от величины отношения $\frac{\Delta T_{L-з.п.}}{\Delta T_{з.п.-S}}$ по сечению слитка (где «з.п.» обозначает температуру затруднённого питания) можно определить зоны вероятности возникновения рассеянной пористости и сконцентрированной пористости (усадочная раковина).

Вычислив дополнительно величину G при затвердевании и построив функцию $\lambda_{м.о.} = F(G \cdot V)$, получаем распределение расстояний между дендритными осями $\lambda_{м.о.}$ по сечению слитка. Учитывая, что размер зерна $r_{зер.} = n \cdot \lambda_{м.о.}$ (где n – коэффициент пропорциональности), получаем распределение структурных (зёрненных) зон в слитке.

Таким образом, на основании расчёта при передаче слитка на ковку одновременно можно передать паспорт его внутреннего строения и оптимизировать процесс деформации фактического изделия.

Эксперимент и термодинамическое моделирование в оксидных системах представляющих интерес для получения направленно закристаллизованных эвтектик

О.Б. Фабричная

Институт Геохимии и Аналитической Химии им. В.И. Вернадского РАН, 119334
Россия, г. Москва, ул. Косыгина 19

Естественные композиционные материалы могут быть получены методом направленной кристаллизации эвтектик (НКЭ). Особенности строения эвтектических микроструктур, границы раздела с минимальной поверхностной энергией определяют термическую стабильность и высокие механические свойства при температурах близких к плавлению. Керамические НКЭ на основе Al_2O_3 и оксидов редкоземельных элементов представляют интерес как высокотемпературные структурные материалы для использования, например, в авиационных газовых турбинах [1]. После кристаллизации эвтектические фазы Al_2O_3 и либо $REAlO_3$ (структура перовскита, $RE=Gd, Eu$) либо $RE_3Al_5O_{12}$ (структура граната $RE=Y, Er, Yb$) образуют непрерывную взаимосвязанную сеть. В случае тройной системы $RE_2O_3-Al_2O_3-ZrO_2$ добавляется кубический ZrO_2 для улучшения механических свойств [1].

Представлены результаты экспериментальных исследований (фазовые равновесия, калориметрические измерения) и рассчитанные фазовые диаграммы на основе термодинамического моделирования $RE_2O_3-Al_2O_3 (+ZrO_2)$ систем. Фазовые равновесия изучены методом уравнивания с последующим изучением образцов методами рентгено-фазового анализа и электронной микроскопии. Температура фазовых превращений и плавления была определена методом дифференциально термического анализа (ДТА). После ДТА микроструктура образцов изучалась методом электронной микроскопии. Примеры микроструктур полученных после ДТА и рассчитанные фазовые диаграммы соответствующих систем представлены на Рис. 1-4 [2]. Теплоемкость соединений измерена методом дифференциально сканирующей калориметрии (ДСК).

На основании экспериментальных данных настоящей работы и данных из литературы получены самосогласованные термодинамические базы данных для систем $ZrO_2-Ln_2O_3-Y_2O_3-Al_2O_3$ (где $Ln = La, Nd, Sm, Gd$), $ZrO_2-La_2O_3-Gd_2O_3$, $ZrO_2-Yb_2O_3-Al_2O_3$ и $ZrO_2-Eu_2O_3-Al_2O_3$ с использованием CALPHAD подхода [3]. В процессе создания баз данных были оптимизированы параметры бинарных и тройных систем с учетом экспериментальной информации о фазовых равновесиях и термодинамических величинах. Полученный набор термодинамических функций позволяет воспроизвести экспериментальные данные с минимальными отклонениями. Важную роль в получении самосогласованных термодинамических баз данных играет выбор модели, описывающей зависимость энергии Гиббса от температуры, давления и состава. Для описания твердых растворов и соединений с областью гомогенности использовалась подрешеточная модель [4]. Подрешеточная модель позволяет привлечь во внимание кристаллическую структуру твердых фаз. Эта модель была успешно применялась

для описания многих оксидных систем. Не все параметры являются независимыми. В оксидных системах учет взаимных реакций и условия электронейтральности позволяет сократить число оптимизируемых параметров. Энергия Гиббса жидкости описывалась частично ионной моделью с двумя подрешетками [4]. Эта модель позволяет одним уравнением описать металлическую, оксидную и полимерную жидкость.

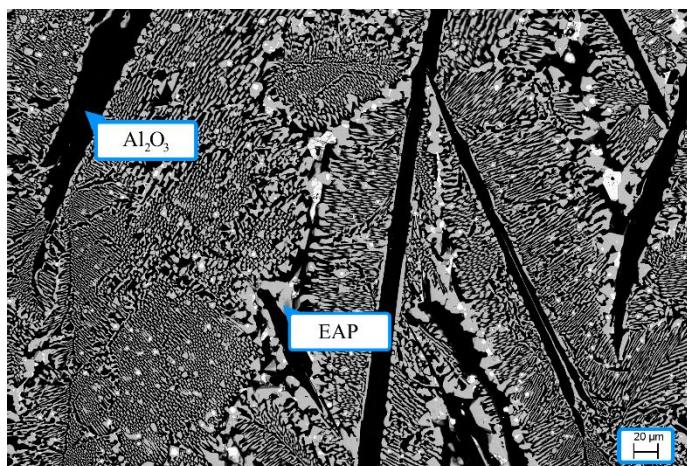


Рисунок 1.
 Микроструктура образца состава (мол.%) 76 Al_2O_3 и 24 Eu_2O_3 после ДТА. Черная фаза Al_2O_3 , светлая EuAlO_3 и область эвтектики $L \rightarrow \text{Al}_2\text{O}_3 + \text{EuAlO}_3$.

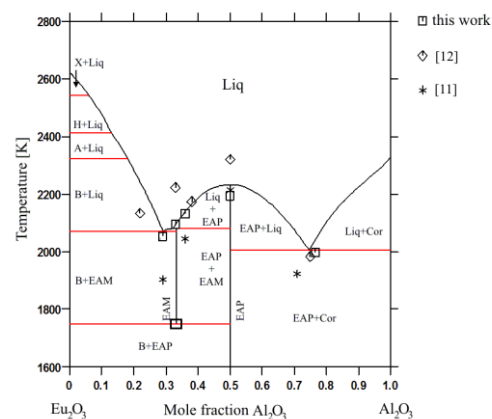


Рисунок 2.
 Рассчитанная фазовая диаграмма системы $\text{Eu}_2\text{O}_3\text{-Al}_2\text{O}_3$.

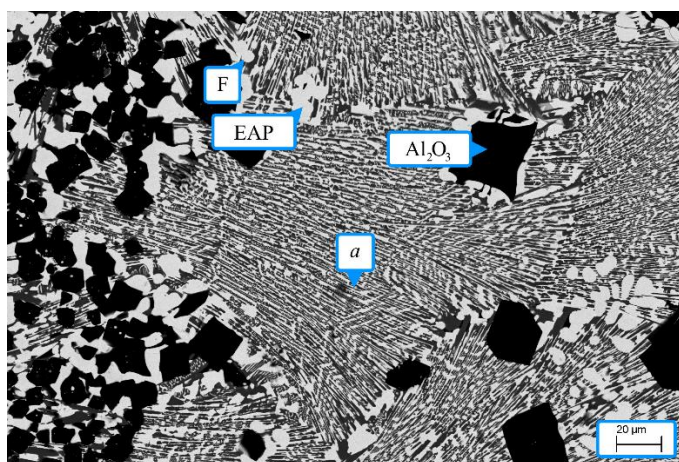


Рисунок 3.
 Микроструктура образца состава (мол.%) 20 ZrO_2 , 68 Al_2O_3 и 12 Eu_2O_3 после ДТА. Светлые фазы $(\text{Zr}_{1-x}\text{Eu}_x)\text{O}_{2-x/2}$ структура флюорита (F) и EuAlO_3 , черная фаза Al_2O_3 и a область эвтектики $L \rightarrow \text{Al}_2\text{O}_3 + \text{F} + \text{EuAlO}_3$.

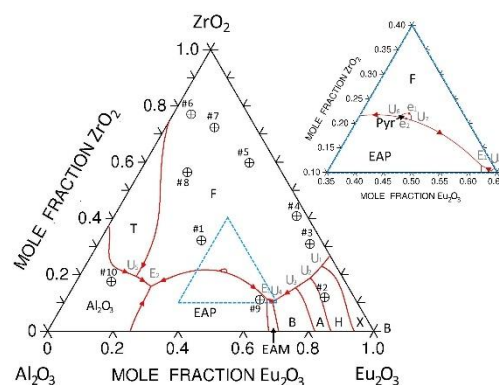


Рисунок 4.
 Поверхность ликвидуса системы $\text{ZrO}_2\text{-Eu}_2\text{O}_3\text{-Al}_2\text{O}_3$.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта DFG SE 647/9-1, 647/9-2.

[1] Parlier M. et al., Potential of directionally solidified eutectic ceramics for high temperature applications // J. Aerospace Lab, 2011. Vol. 3. AL03-07.

Всероссийская конференция

- [2] Fabrichnaya O. et al., Experimental investigation of phase relations and thermodynamic properties in the system ZrO_2 - Eu_2O_3 - Al_2O_3 // J. Eur. Ceram. Soc. 2016. Vol. 36. P. 1455.
- [3] Lukas H.L., Fries S.G., Sundman B. Computational thermodynamics, the Calphad method. Cambridge UK.: Oxford University Press., 2007. 313 с.
- [4] Hillert M. Compound energy formalism // J. Alloys Comp. 2015. V. 320. P. 161.

Электровихревые течения расплавленного металла в цилиндрической ячейке в условиях воздействия внешних магнитных полей

И. В. Колесниченко¹, В. А. Ельтищев¹

¹Институт механики сплошных сред Уральского отделения Российской академии наук, 614018, Россия, г. Пермь, ул. Академика Королева 1

Электровихревые течения (ЭВТ) генерируются в проводящих жидкостях электрическим током, который взаимодействует с собственным магнитным полем. Каноническая задача в исследованиях ЭВТ связана с течением жидкого металла в осесимметричных ячейках с электродом (Рис.1а), локализованным на оси (на твердом конце или на свободной поверхности). ЭВТ существенно влияют на работу многих устройств, таких как дуговые плавильные печи [1], установки для перемешивания расплавов при кристаллизации [2], жидкометаллические батареи [3]. В докладе описываются результаты численных и экспериментальных исследований крупномасштабных вихревых течений в цилиндрических ячейках с локализованным подводом электрического тока во внешних магнитных полях. Математическая модель основана на уравнениях магнитной гидродинамики в электродинамическом приближении. В экспериментальной установке (рис. 1а) ячейка со стенкой из нержавеющей стали была заполнена галлиевой эвтектикой. Ток подводился с помощью коаксиального токоподвода к центру и боковой поверхности ячейки. Для измерения скорости в жидком металле использовалась система датчиков ультразвукового доплеровского анемометра, расположенных снаружи ячейки.

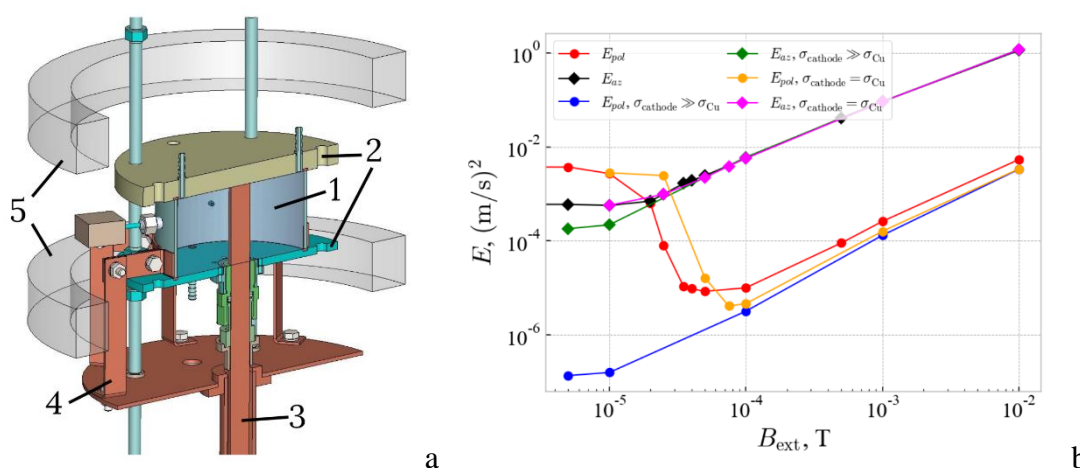


Рисунок 1. (а) – схема экспериментальной установки: 1 – жидкий металл, 2 – торцы ячейки, 3 – катод, 4 – анод, 5 – катушки Гельмгольца. (б) – энергия полоидального (точки) и азимутального (ромбы) течений в равновесном состоянии в зависимости от внешнего магнитного поля; цвета соответствуют: красный и черный – локализованный катод, синий и зеленый – коаксиальный токоподвод с катодом, имеющим высокую электропроводность, оранжевый и розовый – коаксиальный токоподвод с медным катодом

Неоднородность растекания электрического тока приводит к появлению завихренности электромагнитной силы, что вызывает развитие ЭВТ. Действие внешнего магнитного поля, даже такого слабого, как магнитное поле Земли, способно существенно изменить картину течения [4,5]. Причиной является появление азимутальной компоненты электромагнитной силы и дополнительного закрученного течения, что значительно усложняет процесс, вызывая существенные искажения ЭВТ. Действие внешнего магнитного поля приводит к возникновению переходного колебательного режима, после которого течение переходит в стационарное состояние. Исследования показали, что существует интервал значений индукции внешнего поля, при которых кинетическая энергия полоидальной компоненты скорости существенно уменьшается (рис. 1b). Обнаружено, что это происходит и для свободной, и для твердой верхней границы одинаково. Численные исследования позволили найти причину, заключающуюся в формировании дополнительного полоидального течения вследствие аксиального градиента центробежной силы. Поэтому увеличение значения индукции магнитного поля приводит к изменению направления вихревого течения (рис. 3b). Найдены интервалы значений внешнего магнитного поля, при которых полоидальная энергия снижается (рис. 3b). Также экспериментально обнаружено, что в случае свободной границы жидкого металла, возможно возникновение условий появления незатухающих колебаний свободной границы в виде круговой волны [6,7].

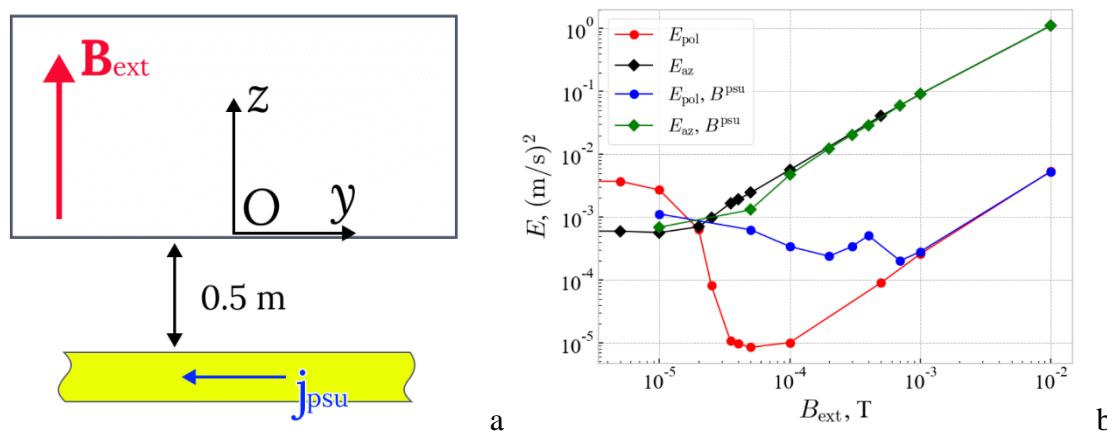


Рисунок 2. (а) – схема ячейки с кабелем питания; (б) – зависимость кинетической энергии течения от внешнего магнитного поля; полоидальная составляющая энергии обозначена точками, азимутальная – ромбами. B^{psu} в подписи обозначает зависимость, если рассматривается моделируемое магнитное поле источника питания.

Численно установлено, что на появление зоны снижения полоидальной энергии никак не влияет ни время, за которое электромагнитные силы достигнут максимального значения, ни последовательность подключения магнитного поля тока или внешнего магнитного поля [8]. В серии расчетов и экспериментов изучено влияние растекания тока на ход процесса. В данном случае центральный стержень-катод полностью пронизывал ячейку по высоте (как показано на рис. 1а). Расчеты и эксперименты показали, что результаты с локализованным катодом

Всероссийская конференция

и коаксиальным токоподводом оказались близки (рис. 1b), несмотря на более чем десятикратную разницу в электропроводности твердой меди и галлиевой эвтектики. Результаты вычислений подтверждают, что при использовании существующих металлов градиент тока всегда возникает. Чтобы этот градиент не возникал, электропроводности коаксиальных токоподводов и жидкого металла должны различаться на несколько порядков. Именно этот случай приводит к чистому вращению жидкого металла с генерацией полоидальных вихрей вследствие экмановской подкачки. В данном случае отсутствуют области снижения полоидальной энергии. Наконец, численные исследования показали [9], что только добавление в систему магнитного поля, которое генерируется подводными токовыми шинами (Рис.2а), способно существенно повлиять на положение и глубину области подавления полоидальной энергии течения (Рис.2b).

Исследованные переходные состояния, связанные с развитием полоидальных ЭВТ и их подавлением вращательным движением, развивающимся в объеме металла, могут быть не менее важны в технологических магнитогидродинамических системах, чем стационарные течения. Поэтому знание особенностей как самих течений, так и переходных режимов и возможных сценариев их развития, может стать ключом к управлению процессами в ваннах расплавов металлургических устройств.

- [1] Kazak O. Modeling of vortex flows in direct current electric arc furnace with different bottom electrode positions // *Metallurgical and Materials Transactions B*, 2013, V. 44, P. 1243-1250.
- [2] Räßiger D., Zhang Y., Galindo V., Franke S., Willers B., Eckert S. The relevance of melt convection to grain refinement in Al-Si alloys solidified under the impact of electric currents // *Acta Materialia*, 2014. V. 79. P. 327-338.
- [3] Kelley D.H., Sadoway D.R. Mixing in a liquid metal electrode // *Physics of Fluids*, 2014. V. 26. P. 057102.
- [4] Kolesnichenko I., Frick P., Eltishchev V., Mandrykin S., Stefani F. Evolution of a strong Electro-vortex flow in a closed cell // *Physical Review Fluid*. 2020. V. 5, no. 12. P. 123703.
- [5] Frick P., Mandrykin S., Eltischev V., Kolesnichenko I. Electro-vortex flows in a cylindrical cell under axial magnetic field // *Journal of Fluid Mechanics*. 2022. V. 949. P. A–20.
- [6] Eltishchev V., Losev G., Kolesnichenko I., Frick P. Circular surface wave in a cylindrical MHD cell // *Experiments in Fluids*, 2022. V. 63. P. 127-135.
- [7] Eltishchev V., Losev G., Frick P. Maintenance mechanism of a circular surface wave in a magnetohydrodynamic cell and limits of its existence // *Physical Review Fluids*, 2024. V. 9. P. 083702.
- [8] Eltishchev V., Mandrykin S., Kolesnichenko I. The influence of a cylindrical cathode on the electro-vortex flow of liquid metal: Numerical simulations and laboratory experiments // *Europhysics Letters*. 2022. V. 137, no. 1. P. 13001.
- [9] Kolesnichenko I., Mandrykin S. Spin-up of electro-vortex flows under external magnetic field // *The European Physical Journal Plus*. 2022. V. 137, no. 8. P. 988.

Особенности микроликвационных процессов и распределения легирующих элементов в слитке конструкционной стали

Тохтамышев А.Н., Иванов И.А., Палаткина Л.В., Мальгинов А.Н., Дуб В.С.

¹Акционерное общество «Научно-производственное объединение «Центральный научно-исследовательский институт технологии машиностроения», 115088 Россия, г. Москва, ул. Шарикоподшипниковская, д.4, к. 1А.

Изучение затвердевания исследуемого состава металла (таблица 1) в равновесных условиях проводили с использованием компьютерного моделирования в программном комплексе «Thermo-Calc» для интервала температур 1540...1380°C – см. рисунок 1.

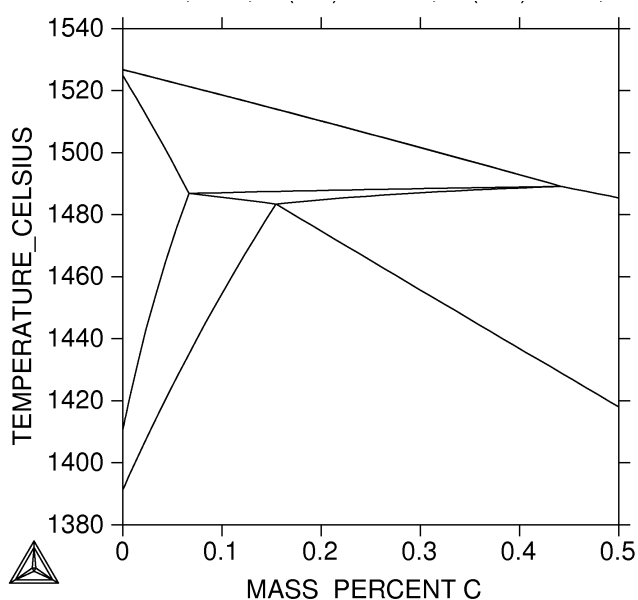


Рисунок 1 – ...

В равновесных условиях согласно линии фигуративной точки (рисунок 1) исследуемого в работе состава заперитектической стали кристаллизация начинается при переохлаждении ниже температуры ликвидус 1510°C. В расплаве (Ж) образуется первичный δ -феррит в виде дендритных кристаллов различной морфологии с развитыми осями первого и второго порядков. Охлаждение до температуры перитектической реакции 1485 °C (в интервале однофазной Ж \rightarrow δ -кристаллизации) характеризуется увеличением доли твердой фазы за счет зарождения новых дендритных кристаллов δ -феррита и (или) за счёт продолжения роста в расплаве ветвей исходных дендритов δ -феррита (в виде дополнительных либо боковых осей) [20].

Во время перитектической реакции γ -аустенит зарождается на поверхности первичных дендритных кристаллов δ -феррита и растет (с огромной скоростью, практически мгновенно вдоль их границы раздела с расплавом. Перитектическая

Всероссийская конференция

реакция завершается образованием сплошной плёнки аустенита (ободка, оболочки) изолирующей от расплава первичные дендриты δ -феррита. Дальнейшее охлаждение в интервале температур сопровождается перитектическим превращением, протекающим по способу ободкового роста: внешняя граница плёнки перитектического аустенита продолжает расти (двигаться) в окружающий расплав, а внутренняя граница растёт в глубь первичных дендритных кристаллов δ -феррита, аустенитизируя их полностью. Как видно на рисунке 2, завершение перитектического превращения не связано с окончанием затвердевания исследуемого состава. Завершение кристаллизации при дальнейшем охлаждении расплава до температуры 1475 °С реализуется за счёт междендритной жидкости, которая путем наслоения достраивает дендриты до полиэдрических кристаллов, внешняя форма которых диктуется столкновением с соседними зёрнами.

...

Таблица 2 – усреднённые значения эффективного коэффициента распределения согласно результатам исследований нижней части лабораторного слитка

Усреднение по всему образцу					
Элемент	C_0 , %	C_d , %	$C_{мд}$, %	$K_{эф}$	Ликвация:
C	0,19	1,96	2,41	10,34	прямая
Si	0,18	0,11	0,12	0,59	прямая
P	0,005	0,01	0,03	2,58	прямая
S	0,005	0,02	0,04	4,92	прямая
V	0,10	0,22	0,21	2,15	обратная
Cr	2,31	1,98	2,07	0,86	прямая
Mn	0,55	0,60	0,61	1,09	прямая
Ni	1,49	1,27	1,37	0,85	прямая

Многофазные модели фазового поля: проблемы и перспективы

В.Г.Лебедев^{1,2}

¹УдмФИЦ УрО РАН, Россия, 426067, г. Ижевск, ул. Т. Барамзиной, 34

²НПО МКМ, Россия, 426034, г. Ижевск, ул. И. Закирова, 26

Работа Штайнбаха и Пеццолы [1] сыграла важную роль в истории развития многофазных моделей фазового поля. Появление их модели привело к созданию коммерческого программного пакета MICRESS, что свидетельствует о практической значимости предложенного подхода. Тем не менее, данный подход вызывает определенные вопросы, так как во многом противоречит устоявшемуся пониманию термодинамики.

Приведем ряд положений, которые, на наш взгляд, являются спорными и заслуживают обсуждения:

1. Равновесие фаз. Согласно термодинамическим принципам, в равновесии две фазы должны быть разделены минимальной поверхностью. В уравнениях MICRESS, например [2], наличие потенциала барьера φ^2 приводит к тому, что равновесное состояние становится периодическим по пространству, с чередующимися фазами, разделенными границами.

2. Для проверки фазово-полевых моделей обычно используется переход к пределу резкой границы, чтобы продемонстрировать соответствие задаче Стефана. Однако в уравнениях MICRESS движущие силы фазового перехода выражены через комбинации фазовых и концентрационных переменных, что делает невозможным их разделение. В результате, Штайнбах рассматривал предел тонкой границы для своей модели, но предел резкой границы для нее не существует, что указывает на несоответствие уравнений MICRESS и задачи Стефана.

3. Задача перераспределения примеси. Для задач с перераспределением примеси из уравнений MICRESS не следует конструкция параллельных Хиллерта, которая определяет условия равновесия в растворах. В частности, непонятно, по какой причине должно выполняться равенство химпотенциалов примеси в разных фазах при их равновесии.

4. Температура в уравнениях. Уравнения MICRESS выводятся с использованием антисимметрии и множителей Лагранжа, однако остается неясным, каким образом в эти уравнения может быть введена температура. Вообще возникает странная ситуация, когда уравнения диссипативной динамики выводят из вариационного подхода.

5. Динамика фаз постоянного состава. Для описания динамики фаз постоянного состава (стехиометрий) в MICRESS применяется приближение узкой потенциальной ямы. Это приводит к существенному произволу для химпотенциалов фаз в модели, что ставит под сомнение прогностическое качество расчетов.

В качестве альтернативы, многофазная модель может быть получена как обобщение работ [3,4], что является основным содержанием данного

Всероссийская конференция

исследования. Полученная модель проверялась с помощью одномерных численных расчетов и демонстрирует ожидаемое качественное поведение. Полученная модель также частично пересекается в отношении термодинамических источников с одной из разновидностью моделей MICRESS [5].

- [1] Steinbach I., Pezolla F. A generalized field method for multiphase transformations using interface fields // *Physica D*, 1999. Vol. 134. P. 358.
- [2] Böttger B., Eiken J., Apel M. Multi-ternary extrapolation scheme for efficient coupling of thermodynamic data to a multi-phase-field model // *Comp. Mater. Sci.* 2015. Vol. 108. P. 283.
- [3] Лебедев В.Г. Динамика перераспределения примеси на границах фаз растворов: фазово-полевой подход // *Письма в ЖЭТФ*, 2022. Т. 115 (4). С. 256.
- [4] Лебедев В.Г. Фазовые превращения в однокомпонентных многофазных системах: фазово-полевой подход // *ЖТФ*, 2022. Т. 92 (2). С. 187.
- [5] Yang C. et al., Phase-field simulation of multi-phase interactions in Fe-C peritectic solidification, // *Comp. Mat. Sci.*, 2020. Vol. 171. P. 109220.

Фазово-полевое описание процесса формирования микроструктуры бинарной системы при неизотермическом затвердевании со взаимодействием фаз переменного и постоянного составов

С. А. Коробейников^{1,2}, В. Г. Лебедев^{1,3}, В. И. Ладьянов¹

¹ФГБУН «Удмуртский федеральный исследовательский центр УрО РАН», 426067 Россия, г. Ижевск, ул. им. Татьяны Барамзиной, 34

²ФГБОУ ВО «Удмуртский государственный университет», 426034 Россия г. Ижевск, ул. Университетская, 1

³АО НПО «МКМ», 426058 г. Ижевск, ул. Героя России Ильфата Закирова, 24

Металлургическое производство, использующее высокотехнологичные сплавы, зачастую ставит перед собой задачу получения материала с заданными свойствами с учётом минимизации затрат на его получение и соответствующие исследования. Очевидно, что процессы структурообразования и конечная микроструктура имеют наибольшее влияние на физические и механические свойства сплавов и поверхностей. Теоретическое описание процессов затвердевания и последующих фазовых превращений приводит не только к расширению понимания физической сущности вопроса, но также позволяет использовать численное моделирование для прогнозирования микроструктуры и, следовательно, физических и механических свойств в заданных макроскопических тепловых и концентрационных условиях.

В рамках представленной работы рассмотрена задача фазово-полевого описания [1] процессов затвердевания и фазовых превращений многофазной бинарной системы в неизотермической постановке. Важным моментом описанной задачи является учёт взаимодействия между собой не только фаз переменного состава (например, жидкий раствор и кристаллиты твёрдых растворов), но и взаимодействие с фазами постоянного состава.

Для получения системы релаксационных термодинамически-согласованных уравнений записывается функционал полной энтропии системы

$$S = \int_V \left[- \left(\frac{\partial G(\boldsymbol{\varphi}, \mathbf{x}, T)}{\partial T} \right)_{\boldsymbol{\varphi}, \mathbf{x}} + \sum_{\alpha} \sum_{\beta > \alpha} \frac{\sigma_{\alpha\beta}^2}{2T_c} \nabla \varphi_{\alpha} \nabla \varphi_{\beta} \right] dV,$$

который представляется в виде суммы равновесного вклада, равного производной по температуре от плотности энергии Гиббса системы с отрицательным знаком, и вклада попарного взаимодействия соприкасающихся поверхностей границ раздела с кинетическим коэффициентом $\sigma_{\alpha\beta}^2$, связанного с удельной поверхностной энергией, здесь T_c - некоторая постоянная температура, требующаяся для соблюдения размерности.

Плотность энергии Гиббса строится в виде интерполяции по фазам и «double-well» потенциала в многофазной форме

$$G = \sum_{\alpha}^S \frac{p(\varphi_{\alpha})}{p_n} G^{\alpha}(x_{\alpha}, T) + \sum_{\alpha}^C \frac{p(\varphi_{\alpha})}{p_n} G^{\alpha}(T) + \sum_{\alpha} \sum_{\beta > \alpha} W_{\alpha\beta} \varphi_{\alpha}^2 \varphi_{\beta}^2,$$

Всероссийская конференция

где $p(\varphi_\alpha)$ – объёмная доля фазы α в двухфазной постановке задачи, p_n – нормирующий множитель, представленный в виде суммы всех объёмных долей фаз $p(\varphi_\alpha)$ в конкретной точке пространства, буквы S и C обозначают суммирование по множествам фаз переменного состава (solutions) и фаз постоянного состава (compounds), $G^\alpha(x_\alpha, T)$ и $G^\alpha(T)$ – объёмные плотности равновесных энергий Гиббса фаз переменного и постоянного состава соответственно, $W_{\alpha\beta}$ – высота потенциального барьера между фазами.

Помимо термодинамической составляющей, для получения набора релаксационных уравнений используется кинетическая составляющая, представляемая в виде закона сохранения теплоты (энтальпии) и количества вещества:

$$\frac{\partial \langle x \rangle}{\partial t} = -\nabla \cdot J_D, \quad \frac{\partial H}{\partial t} = -\nabla \cdot J_T,$$

где J_D и J_T – диффузионный и тепловой потоки соответственно, $\langle x \rangle$ – средняя объёмная мольная доля, H – объёмная плотность энтальпии, которые равны

$$\langle x \rangle = \sum_{\alpha} \frac{p(\varphi_\alpha)}{p_n} x_\alpha, \quad H = G - T \frac{\partial G}{\partial T}.$$

Следуя принципам неравновесной термодинамики [2], требуя положительной определенности производства энтропии в исследуемом объёме, применяя законы сохранения, получена система уравнений для фазовых полей, мольной доли компонента в каждой фазе переменного состава и теплопроводности.

Для полученной системы уравнений проведен переход к предельным ранее известным двухфазным подходам [3], проведено двумерное численное моделирование для изотермической и неизотермической постановки вопроса, а также реализован технический механизм гомогенного зародышеобразования на основе шума Перлина [4]. Непосредственное моделирование проводилось для известных энергий Гиббса бинарных систем [5], в частности для системы Al-Mg.

Результаты численного моделирования показывают, что динамика, описываемая полученной системой уравнений, соответствует общеизвестным физическим принципам процесса.

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

[2] Де Гроот С., Мазур П. // Неравновесная термодинамика, М.: Мир (1964).

[3] Лебедев В. Г. Динамика перераспределения примеси на границах фаз растворов: фазово-полевой подход // Письма в ЖЭТФ, 2022. Т. 115 (4). С. 256.

[4] Perlin K. An image synthesizer // ACM SIG-GRAPH Computer Graphics. 1985. V. 19. № 3. P. 287—296.

[5] NIMS Materials Database (MatNavi) - DICE :: National Institute for Materials Scienc — URL: <https://mits.nims.go.jp/> (датаобр. 18.01.2025).

Показатели качества проката инструментальных легированных сталей, изготовленного из непрерывнолитой заготовки

С. А. Зинченко¹, Н.Н. Васильева², В.С. Клековкин²

¹ПАО «Ижсталь», Лаборатория металловедения и термической обработки, 426006 Россия, г. Ижевск, ул. Новоажимова, 6

²Ижевский государственный технический университет им. М.Т. Калашникова, 426069 Россия, г. Ижевск, ул. Студенческая, 7

Одним из наиболее перспективных направлений развития черной металлургии является производство стали методом непрерывной разливки. Замена разливки в изложницы на непрерывную разливку обеспечивает существенное снижение трудоемкости и себестоимости производства металлопродукции. В то же время пока далеко не все группы сталей могут быть получены методом непрерывной разливки.

В ПАО «Ижсталь» проводится планомерная работа по переводу сложнелегированных марок стали на непрерывную разливку на МНЛЗ радиального типа. Машина предназначена для получения непрерывнолитых заготовок (НЛЗ) сечением 125x125 мм и 140x180 мм.

Марочный сортамент разливаемой на МНЛЗ стали в настоящее время разделен на 13 групп:

1) низкоуглеродистая; 2) перитектическая; 3) Ni-Cr-Mo-жаропрочная; 4) Cr-V-Ti-V-жаропрочная; 5) среднеуглеродистая; 6) Ni-Cr-Mo-улучшаемая; 7) Cr-V-Ti-V-улучшаемая; 8) высокоуглеродистая; 9) пружинная; 10) подшипниковая; 11) повышенной обрабатываемости резанием; 12) коррозионностойкая мартенситная; 13) коррозионностойкая ферритная.

В каждую группу включены марки стали, имеющие одинаковое поведение при разливке и, соответственно, требующие одинаковых настроек оборудования.

В данной работе приводятся результаты опытного опробования возможности реализации схемы разливки на МНЛЗ инструментальных легированных сталей. Методом непрерывной разливки были изготовлены стали марок X12MФ, 1.2379 (немецкий аналог стали X12MФ), 95X18, 4X5MФС, S7.

Для указанных сталей при создании технологического процесса скорректированы параметры выплавки и разливки.

Выплавка производилась в электропечах ДСП40 или ДСП25. Внепечная обработка состояла в доведении по химическому составу на агрегате ковш-печь (АКП) с продувкой металла аргоном, с последующим вакуумированием на установке вакуумирования стали (УВС).

Перегрев металла над точкой ликвидуса в промковше на первой плавке в серии не превышал 50°C.

Давление тянущих роликов устанавливалось на старте 5 атм, после отделения затравки доводилось до 6 атм.

Оптимальная скорость разливки обеспечивает нормальный ход процесса, при котором на выходе из кристаллизатора формируется твердая оболочка заготовки

Всероссийская конференция

необходимой толщины и прочности, исключая прорыв металла. Начальная и минимальная скорость разливки составляла не менее 2,0 м/мин.

Правильный подбор шлакообразующей смеси (ШОС) обеспечивает стабильность процесса разливки и получение качественной непрерывнолитой заготовки. Шлакообразующая смесь для кристаллизатора представляет собой мелкодисперсную многокомпонентную (4-6 компонентов) систему, основными составляющими которой являются С, СаО, SiO₂, В₂О₃, Na(K, Li)₂О и соединения фтора, которыми могут быть СаF₂, NaF и пр. Помимо основных компонентов, в ШОС обычно содержится некоторое количество примесей: Al₂О₃, MgO, ВаО, MnO, Fe₂О₃. Требуемые технологические и эксплуатационные свойства ШОС достигаются правильным выбором соотношения между компонентами, входящими в конкретную по химическому составу и эксплуатационным свойствам ШОС. Путем опытного опробования была подобрана гранулированная ШОС Intoflux GB-1030/Н отечественного производства.

Указанные мероприятия обеспечили получение бездефектной НЛЗ и последующую прокатку на сортовых станах.

Технология изготовления проката из слитка включает прокатку слитков на блюминге, термообработку, зачистку, транспортировку блюмов с блюминга на стан 250 или на стан 450, повторный нагрев блюмов под прокатку и прокатку на стане 250 или на стане 450.

Технология изготовления проката из НЛЗ включает транспортировку НЛЗ из ЭСПЦ непосредственно на сортовой стан 250 или 450, один нагрев и прокатку на конечный размер. За счет исключения передела на блюминге длительность цикла изготовления проката сокращается в среднем на трое суток.

Показатели качества проката, изготовленного из НЛЗ, были сопоставлены с показателями качества проката, изготавливаемого из слитка. Сравнительные результаты приемо-сдаточных испытаний приведены в таблице.

Таблица. Показатели качества проката из НЛЗ и слитка.

Марка стали	Сдаточные характеристики	НЛЗ	Слиток	Требования
		Среднее значение	Среднее значение	
X12MФ	Макроструктура	ЦП 2 балл; ТН 1 балл; Подус.ликв. 1 балл; Ликв. квад. 0,5 балл	ТН 1 балл	Подус.ликв. н.б. 1 балла; ликв. квад. н.б. 1 балла; ЦП н.б. 2 балла; Пятнист.ликв. н.б. 2 балла; ТН н.б. 3 балла
	Карбидная неоднородность	3 балл	3 балл	н.б. 4 балла
	НВ	ОС-1 б, ОТ-1 б, СХ-1 б, СП-0 б, СН-1,5 б, С-1,5 б, НТ _{топ} -0,5, НТ _{стр} -0,5	ОС-0,7 б; ОТ-1,7 б; СХ-1 б; СП-1 б; СН-0,7 б; С-1 б; НТ-0,3 б; НС-0,5б	Оксиды н.б. 3 балла; Сульфиды н.б. 2,5 балла; Нитриды н.б. 3 балла; Силикаты н.б. 3 балла
	Твердость в состоянии поставки	232 НВ	217 НВ	н.б. 255 НВ
	Твердость после закалки	61 HRC	62 HRC	н.м. 60 HRC
1.2379	Макроструктура	ТН 1 балл, ЦП 1 балл, Ликв.квадр. 1 балл	ТН 1 балл, ЦП 1 балл, Ликв.квадр. 0,5 балл	Не должна иметь усадочную раковину, трещины, включения, подсадочную рыхлость, пузыри, расслоения, флокены
	НВ	К4=8,4	К4=10	К4<20
95X18	Макроструктура	Плотная	Плотная	Не должна иметь трещин, расслоений, корочек, инородных металлических и шлаковых включений, флокенов
	Твердость в состоянии поставки	255 НВ	229 НВ	н.б. 269 НВ

Всероссийская конференция

	Твердость после закалки	57 HRC	59 HRC	Н.м. 55 HRC
S7	Макроструктура	ЦП 2 балл, ТН 1 балл	ЦП 1 балл, ТН 1 балл	Не должна иметь усадочную раковину, трещины, включения, подусадочную рыхлость, пузыри, расслоения. ЦП н.б. 2 балла
	НВ	Тонкие (1А,1В,0,1С,0,8D), Утолщенные (1,1А,1В,0,1С,0,8D)	Тонкие (0,6А,0,8В,0,08С,0,5D), Утолщенные (0,5А,1,2В,0,1С,0,5D)	Тонкие (2,5А, 2,5В, 2,0С, 2,5D) Утолщенные (2,0А, 2,0В, 1,0С, 2,0D)
	Твердость после закалки	57 HRC	59 HRC	Н.м. 56 HRC
4Х5МФС	Макроструктура	ЦП 1 балл	ЦП 1 балл, ТН 1 балл, подусад. ливк. 1 балл	Подус. ливк. н.б. 1 балла; Ливк. квадр. н.б. 1 балла; ЦП н.б. 2 балла; Пятнис. ливк. н.б. 2 балла; ТН н.б. 3 балла
	НВ	ОС-1,0 б; С-1,4 б; ОТ-1 б; СН-1,0 б; СХ-1 б; СП-0,88 б	ОС-1,1 б; С-1,1 б; ОТ-1 б; СН-0,76 б; СХ-1 б; СП-1 б	Оксиды н.б. 3 балла; Сульфиды н.б. 2,5 балла; Нитриды н.б. 3 балла; Силикаты н.б. 3 балла
	Твердость в состоянии поставки	207 НВ	203 НВ	Н.б. 255 НВ
	Твердость после закалки	48 HRC	49 HRC	Н.м. 47 HRC

Анализ приведенных результатов свидетельствует, что показатели качества проката из НЛЗ практически не уступают показателям проката, изготовленного из слитка, и соответствуют требованиям соответствующих стандартов на металлопродукцию. В то же время, закаливаемость сталей 4Х5МФС и S7 ниже на одну единицу HRC. Это очевидно связано с недостаточной проработкой структуры при прокатке из НЛЗ. Так, при изготовлении сорта размером Ø 40 мм уков непрерывнолитого металла составляет 12, слиточного – 81.

Расходный коэффициент при производстве проката из НЛЗ по сравнению с изготовлением проката из слитка снижается:

- с 1389,0 до 1102,4 для стали X12МФ (на 21 %);
- с 1301,4 до 1056,6 для стали 95X18 (на 19 %);
- с 1277,4 до 1050,2 для сталей 1.2379, S7 и 4Х5МФС (на 18 %).

Выводы

1. Разработанная технология изготовления проката легированных инструментальных сталей из НЛЗ исключает ряд технологических операций: горячий деформационный передел на блюминге, зачистку поверхности, термообработку, транспортировку с блюминга и повторный нагрев блюмов на станах 250 и 450. Продолжительность цикла изготовления проката сокращается в среднем на трое суток.

2. Расходный коэффициент при производстве проката из НЛЗ по сравнению с изготовлением проката из слитка снижается:

- для стали X12МФ - на 21 %;
- для стали 95X18 - на 19 %;
- для сталей 1.2379, S7 и 4Х5МФС - на 18 %.

3. Металлопродукция из стали марок X12МФ, 1.2379, 95X18, 4Х5МФС, S7, изготовленная на сортовом стане 250 непосредственно из НЛЗ по потребительским характеристикам соответствует требованиям нормативно-технической документации на горячий прокат и практически не уступает характеристикам проката из слитка.

Фазово-полевая модель роста нескольких стехиометрических фаз в бинарном сплаве

В.А.Копытов^{1,2}

¹НПО МКМ, Россия, 426034, г. Ижевск, ул. И. Закирова, 26

²ФГБОУ ВО «Удмуртский государственный университет», Россия, 426034, г. Ижевск, ул. Университетская, 1

В работе предложена многофазная модель, учитывающая наличие нескольких стехиометрий (фаз постоянного состава). Уравнения получены на основе подходов, описанных в работах [1, 2]. Для каждой фазы φ_α сплава динамику кристаллизации (плавления) описывает система из n уравнений:

$$\dot{\varphi}_\alpha = M \sum_{\beta \neq \alpha} (\sigma_{\alpha\beta} \nabla^2 (\varphi_\alpha - \varphi_\beta) - 2W_{\alpha\beta} (\varphi_\alpha - \varphi_\beta) \varphi_\alpha \varphi_\beta - 6G_{\alpha\beta} \varphi_\alpha \varphi_\beta), \quad (1)$$

где M – мобильность, $\sigma_{\alpha\beta} = \varepsilon_{\alpha\beta} \theta(\dot{\varphi}_\alpha) \theta(\dot{\varphi}_\beta)$, $\varepsilon_{\alpha\beta}$ – параметр системы, $\theta(\dot{\varphi}_\alpha)$ – функция Хевисайда, $W_{\alpha\beta}$ – потенциальный барьер между фазами, $G_{\alpha\beta}$ – движущая сила.

Движущая сила кристаллизации жидкой фазы φ_L в стехиометрию φ_S :

$$G_{L \rightarrow S} = G_L - G_S - (x_S - x_L) \mu_L,$$

где G_i – энергия Гиббса i -й фазы, x_i – концентрация i -й фазы, μ_L – химический потенциал жидкой фазы.

Поскольку стехиометрии не имеют химического потенциала, равновесная концентрация жидкой фазы определяется построением общей касательной между энергиями этих фаз [2]. На рис.1 представлен пример таких касательных. Поскольку энергия выпукла вниз, то до тех пор пока $G_L < G_S$ касательных будет 2 (так же возможен вариант, когда устойчивы другие фазы, и одной из касательных не существует), то равновесной концентрацией выбирается та, с чьей стороны от x_S находится состав жидкой фазы.

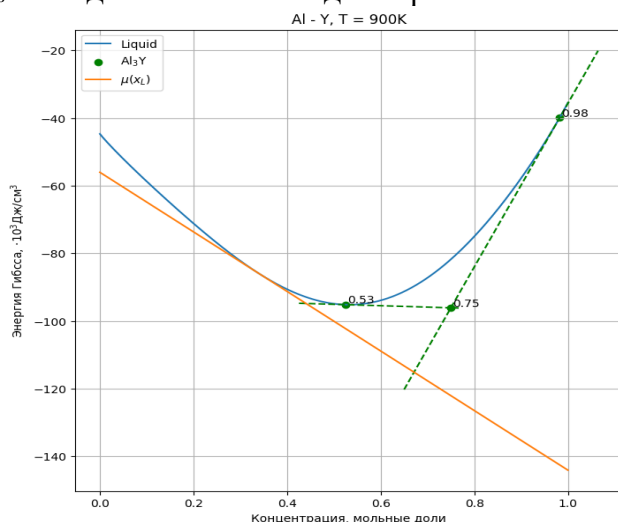


Рисунок 1.

Общие касательные (пунктир) между жидкой фазой AlY [3] и стехиометрией Al₃Y при температуре 900K. Сплошной линией показан хим. потенциал жидкой фазы при концентрации Al 0.3.

В качестве модельной системы выбран сплав AlY (рис. 2). Для него уравнение диффузии в жидкой фазе имеет вид:

$$p_L \dot{x}_L = - \sum_{\alpha \neq L} \dot{p}_\alpha (x_\alpha - x_L) + p_L \nabla (M_L (p_L \nabla \mu_\alpha + \sum (\mu_s - \mu_L) \nabla p_s)), \quad (2)$$

где x – концентрация, $p_\alpha = \varphi_\alpha (1 - \sum_{\beta \neq \alpha} \varphi_\beta (\varphi_\alpha - \varphi_\beta))$ – доля α -фазы, M_L – мобильность, μ – химический потенциал.

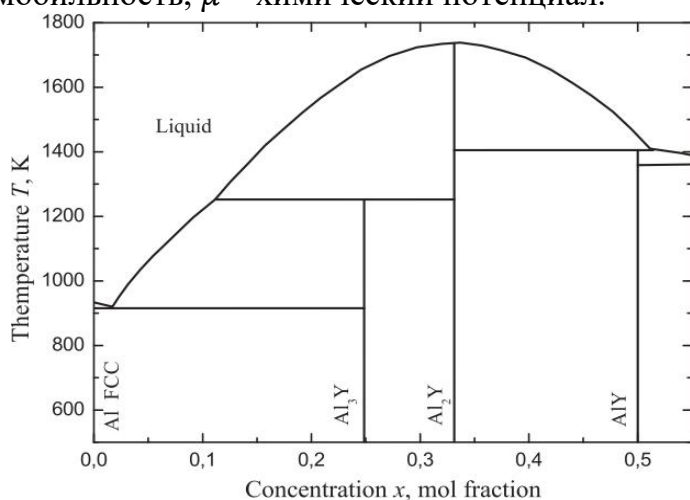


Рисунок 2. Фазовая диаграмма сплава AlY [3]. По горизонтали показана концентрация Y в интервале $x=0 \dots 0,55$.

В качестве тестовой задачи рассмотрена граница контакта стехиометрии Al_3Y и жидкой фазы с начальной концентрацией иттрия 0.2 при температуре 900 К (рис. 3). Уравнения (1), (2) решались явной схемой с граничными условиями второго рода. В качестве «граничного» условия при малых долях жидкой фазы выбиралась равновесная концентрация. Из рис. 3 видно, что излишняя концентрация алюминия вытесняется в жидкую фазу, что соответствует ожидаемому поведению.

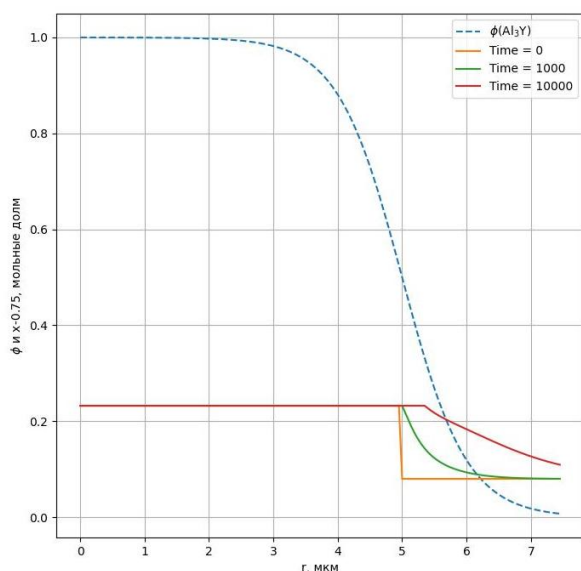


Рисунок 3. Профиль фазового поля (пунктир) и концентрации алюминия в различные моменты времени при температуре 900К.

Данная модель может служить основой для моделирования фазовых переходов и перераспределения состава бинарных сплавов, содержащих стехиометрии.

- [1] Yang C., Li S., Wang X., Wang J., Huang H. Phase-field simulation of multi-phase interactions in Fe-C peritectic solidification // *Comp. Mat. Science*. 2020. V. 171. DOI: 10.1016/j.commatsci.2019.109220.

- [2] Miura H. Phase-field model for growth and dissolution of a stoichiometric compound in a binary liquid // Phys. Rev. E. 2018. V. 98, № 2. С. 023311. DOI: 10.1103/PhysRevE.98.023311.
- [3] Liu X. J., Wen M. Z., Wang C. P., Pan F. S. (2008). Thermodynamic assessment of the Zn–Y and Al–Zn–Y systems. J. of Alloys and Comp., 452(2), 283–290. DOI:10.1016/j.jallcom.2006.11.029.

Применение CALPHAD-метода в пакете LVMFlow

Л. И. Романов^{1,2}

¹Удмуртский государственный университет, 426034, Удмуртская Республика, г. Ижевск, ул. Университетская, 1

²АО НПО "МКМ", 426058, Удмуртская Республика, г. Ижевск, ул. Героя России Ильфата Закирова, 24

Для моделирования процесса кристаллизации многокомпонентных сплавов требуются различные физические характеристики сплава. Некоторые термодинамические параметры можно получить CALPHAD-методом (CALculation of PHase Diagrams) [1]. В вычислительной термодинамике равновесное состояние описывается термодинамическими функциями, зависящими от температуры, давления и состава элементов системы. Термодинамические модели содержат оптимизированные параметры, они воспроизводят хорошо как эксперименты, так и теоретические модели и основы термодинамики. Методы получения параметров термодинамических моделей фаз и техника построения фазовых диаграмм получили название CALPHAD.

В АО НПО "МКМ" есть свой модуль расчёта термодинамических параметров многокомпонентных сплавов. Для вычислений используются модели энергии Гиббса из открытых источников [2]. Полученные результаты служат для корректировки базы данных сплавов, непосредственно используемых в процессе моделирования в пакете LVMFlow.

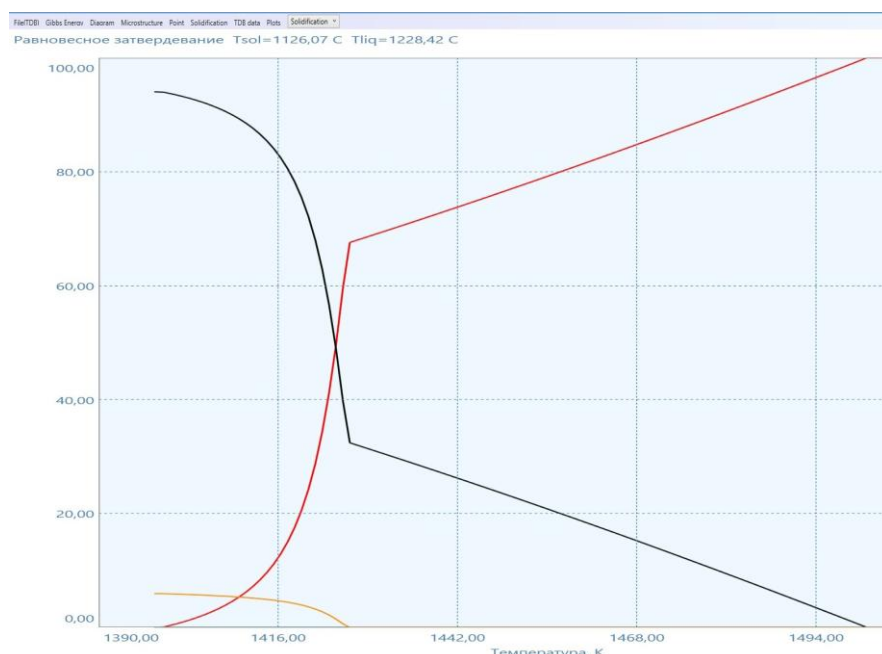


Рисунок 1.
Равновесная кристаллизация сплава (C - 3%, Fe - 94,1%, Mn - 0,7%, P - 0,1%, S - 0,1%, Si - 2%)
Доли фаз: красная - LIQUID, чёрная - FCC_A1, жёлтая - GRAPHITE.

Равновесное состояние вычисляется методом минимизации энергии Гиббса системы. В равновесном состоянии определяются доли фаз, состав фаз, теплоёмкости, энтальпия, температуры ликвидуса и солидуса. Параметры поверхности ликвидуса многокомпонентного сплава используется в

соответствующих алгоритмах равновесной и неравновесной кристаллизации пакета LVMFlow. Фрагмент линии ликвидуса приведён на рис.2.

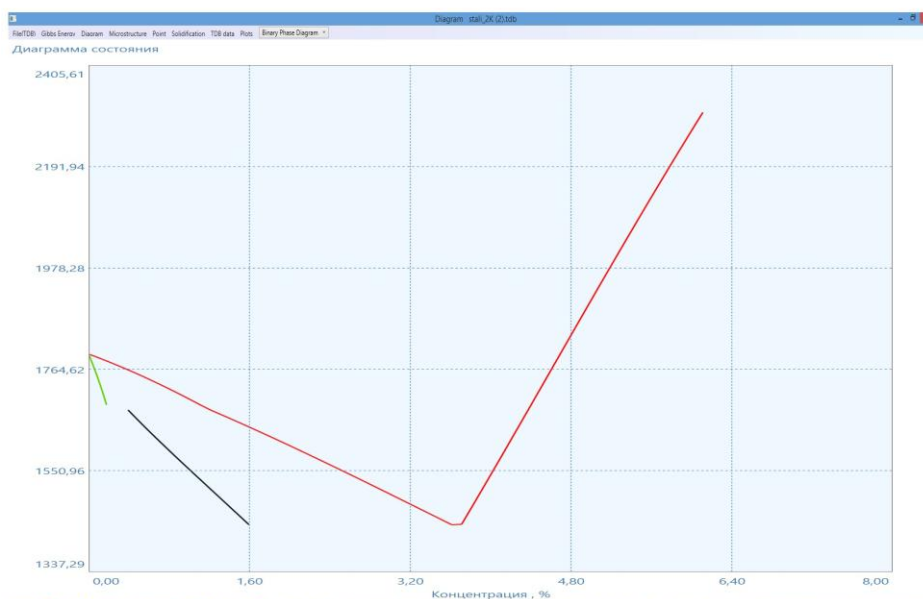


Рисунок 2.
Ликвидус сплава (C - 0 - 7%, Fe - 90,1 - 97,1%, Mn - 0,7%, P - 0,1%, S - 0,1%, Si - 2%)
Красная - LIQUID,
чёрная - FCC_A1,
зелёная - BCC_A2.

Для моделирования хода затвердевания сплава и формирования структуры в неравновесных условиях рассматриваются парные взаимодействия жидкой и твёрдой фаз (рис 3).

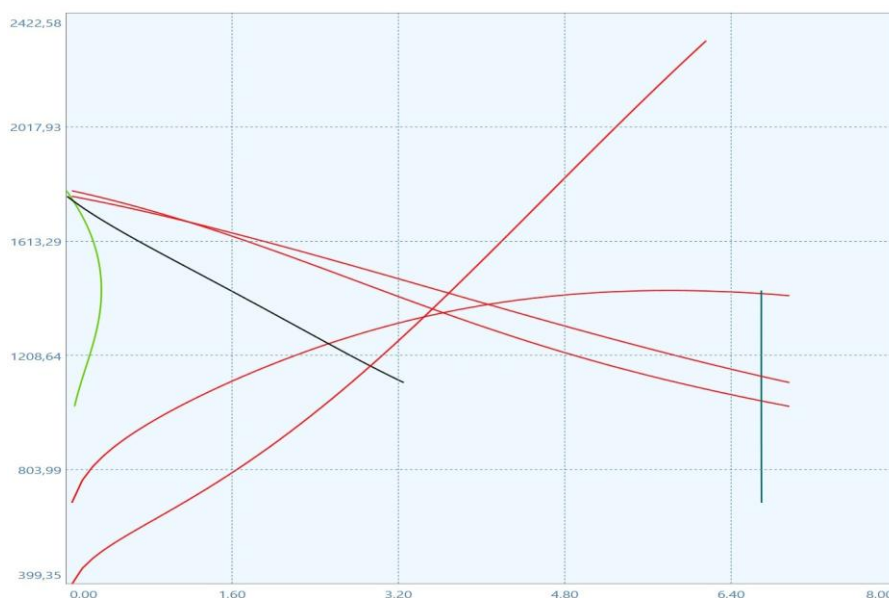


Рисунок 3.
Сплав (C-0-7%, Fe- 90,1-97,1%, Mn-0,7%, P - 0,1%, S - 0,1%, Si - 2%)
BCC_A2(зелёная)
FCC_A1(чёрная)
CEMENTITE(синяя)
Линия ликвидуса - красная.

[1] Lukas H.L., Fries S.G., Sundman B. Computational Thermodynamics. The Calphad Method. - Cambridge University Press, 2007.

[2] <http://www.matcalc-engineering.com>.

Макроскопическое затвердевание бинарных растворов с учетом фазового состава

А.А.Лебедева¹, В.Г.Лебедев², В.В.Лебедев²

¹УдмФИЦ УрО РАН, Россия, 426067, г. Ижевск, ул. Т. Барамзиной, 34

²ФГБОУ ВО «Удмуртский государственный университет», Россия, 426034, г. Ижевск, ул. Университетская, 1

Компьютерное прогнозирование технологических процессов литья [1] в настоящее время во многом опирается на равновесные представления о процессах затвердевания, развиваемых в 80–х годах XX века [2]. Это понятия двухфазной зоны, равновесных диаграмм состояния, коэффициентов распределения и уравнений баланса. Современный язык описания фазовых превращений на мезоскопическом уровне основан на понятии параметра порядка, привнесенном в физику фазовых переходов еще Ландау. Введение параметра порядка фазового перехода (называемого фазовым полем, далее PF) позволяет контролировать изменение фазового состояния, определяемого термодинамическими потенциалами свободной энергии, энергии Гиббса, энтропии. Использование неравновесной термодинамики [3] и развитие баз данных по потенциалам Гиббса [4] для растворов стало основой успеха PF на мезоуровне и позволило достичь значительного прогресса в описании процесса формирования микроструктур при затвердевании расплавов [5]. Но все успехи PF в настоящее время никак не согласованы с феноменологическим квазиравновесным подходом [2], применяемого в технологических пакетах литья [1].

Действительно, обычно PF-моделирование проводится в заданных температурных и концентрационных условиях, прогнозируя возможные виды микроструктур, которые могут возникать в таких условиях. Расчеты микроструктуры не оказывают влияния на отливку в целом. В этом смысле, расчеты фазовых превращений в материалах теряют свою термодинамическую согласованность, поскольку процессы на крупных масштабах влияют на более мелкомасштабные процессы, но не наоборот. В данной работе сделана попытка исправить такую постановку задачи, предполагая, что расширение модели фазового поля на более крупные масштабы, позволит учесть, в первом приближении, на основе потенциалов Гиббса, как фазовый состав твердеющего раствора, так и его вклад в перераспределение примеси и теплот кристаллизации. Но расширение PF на более крупные масштабы имеет ряд особенностей и ограничений, обсуждаемых ниже.

Так, метод PF по своей идеологии нацелен на описание динамики межфазной границы и содержит, как параметр, величину, называемую шириной диффузной границы ($\delta \approx 10^{-9} \dots 10^{-8}$ м). Наличие пространственного масштаба заведомо исключает прямой перенос понятий с мезо- на макро- масштабы. Поскольку ширина диффузной границы появляется как результат конкуренции между диффузионным расплыванием границы между фазами и влиянием межфазного потенциального барьера, из уравнений PF должны исчезнуть оба этих вклада, так что уравнение PF по сути должно свестись к кинетике фазового поля

Всероссийская конференция

за счет термодинамических источников. Последнее будет отличать модель от квазиравновесных моделей, где изменение доли фазы в единице объема определяется отклонением от ликвидуса равновесной диаграммы.

Кроме того, в большинстве моделирующих пакетов, для описания процессов перераспределения примеси используется уравнение Шейла [6]. К сожалению, такой подход плохо согласуется с методом РФ, поскольку при термодинамическом описании источником сегрегации примеси является разность химпотенциалов фаз [7], а не равновесный коэффициент распределения.

И наконец, стоит отметить наличие кинетических параметров, определение которых возможно либо на основе экспериментов, либо более микроскопических моделей. Такие параметры являются проблемой как для квазиравновесных моделей, так и для РФ, хотя в нашем подходе кинетические параметры, по-видимому, могут быть определены на основе не очень сложных экспериментов.

Под макроскопическими масштабами в данном исследовании понимаются пространственные величины порядка $L \approx 1^1 \dots 10^3$ см. Процессы фазовых превращений в растворах на таких пространственных масштабах протекают за времена от минут до часов и заведомо являются неизотермическими. Для простоты ограничимся бинарным раствором с двумя фазами, рассматривая процесс затвердевания на макро- масштабах. В качестве последнего удобно выбрать (с целью дальнейшего расширения модели на многофазные и многокомпонентные системы) неоднократно исследованный процесс затвердевания расплава Fe-C в аустенит. Несмотря на неизотермичность, такой процесс является диффузионно контролируемым, что подразумевает изменение состава примеси (углерода) в расплаве.

Исходя из высказанных ограничений, в представленной работе получены уравнения модели из принципа возрастания энтропии и проведено численное моделирование формирования аустенита из расплава железа при различных концентрациях углерода в расплаве. Численное решение полученных уравнений для затвердевания расплава Fe-C проведено в одномерном случае на макро- масштабах и качественно согласуется с ожидаемым поведением системы.

Функции, которые количественно оценивают пространственную корреляцию движения частиц жидкости и в аморфных системах, подобны рассматриваемым в работе [6]. Данные функции рассчитываются на основе кинетических параметров ЕАМ модели расплавов меди и никеля, моделируемых методом молекулярной динамики. Временное поведение корреляторов движения различно в жидкой стабильной и метастабильной фазе данных веществ и проявляет качественную зависимость от размера диагностического кластера жидкости. Также рассматриваются физическая интерпретация данных долговременных коллективных явлений и связь эффекта с другими параметрами модели.

[1] URL: <https://www.esi-group.com/products/procast> от 22.02.2025

URL: <https://www.magmaflow.de/en/solutions/magmaflow> от 22.02.2025

URL: <https://lvmflow.ru/lvmflowcv> от 22.02.2025

[2] Борисов В. Т. // Теория двухфазной зоны металлического слитка, М. Металлургия (1987).

[3] Де Гроот С., Мазур П. // Неравновесная термодинамика, М.: Мир (1964).

Всероссийская конференция

- [4] URL: <http://cpddb.nims.go.jp/cpddb/periodic.htm> от 20.02.2025.
- [5] Schmitz G. J., Böttger B., Eiken J., Apel M., Viardin A., Carre' A., Laschet G. Phase-field based simulation of microstructure evolution in technical alloy grades // Int J. Adv. Eng. Sci. Appl. Math. 2010, V. 2(4). P. 126.
- [6] URL: https://www.doitpoms.ac.uk/tlplib/solidification_alloys/printall.php от 22.02.2025
- [7] Лебедев В.Г. Динамика перераспределения примеси на границах фаз растворов: фазово-полевой подход // Письма в ЖЭТФ, 2022. Т. 115 (4). С. 256.

Особенности кристаллизации синтетического чугуна в условиях получения полых отливок способом непрерывно-циклического литья намораживанием

М. С. Соловьева¹, В. П. Груша², Л. В. Палаткина¹

¹Институт металлургии и машиностроения, АО «НПО«Центральный научно-исследовательский институт технологии машиностроения» Росатома, 115088, г. Москва, ул. Шарикоподшипниковская, 4.

²Институт технологии металлов Национальной академии наук Беларуси, Беларусь, г. Могилев, ул. Бялыницкого - Бирули, 11.

В настоящее время удельное потребление в машиностроении чугуна остается преобладающим, он по-прежнему является основным конструкционным материалом в производстве корпусных изделий сложной геометрии, изготовление которых экономически целесообразно, а зачастую единственно возможно только из чугуна. Рынок синтетического чугуна наращивает свои приоритеты из-за постоянного роста цен на литейный чугун и наличие большого количества стального лома. Также повышенные прочностные свойства синтетического чугуна делают его востребованным для отливок с повышенными механическими свойствами и повышенной герметичностью, работающих при высоких давлениях в жидких и газообразных средах [1]. При этом метод непрерывно-циклического литья намораживанием разработанный в Институте технологии металлов НАН Беларуси, основанный на направленном затвердевании металла за счет одностороннего теплоотвода и исключения дефицита жидкой фазы в течение всего времени формирования отливки, обеспечивает получение полых чугунных заготовок мерной длины с плотной бездефектной структурой и заданным фазовым составом. А чугунные детали, полученные по данной технологии, находят широкое применение в машиностроении, металлургии, горнодобывающем оборудовании и других отраслях современной промышленности [2, 3, 4].

В работе исследовали полые отливки со средней толщиной стенки 14 мм и высотой 250 мм затвердевшие в кристаллизаторе (металлическая водоохлаждаемая форма) литейной машины ЛЗМ-1 со стальной рабочей втулкой диаметром 104 мм. Выплавку чугуна осуществляли в индукционной печи ИСТ 025 на возврате собственного производства: стальной лом (15 %); серый чугун - кусковой возврат (35 %) и стружка (50 %). Разливку проводили одним ковшем емкостью 150 кг с доливом порции перегретого металла. Графитизирующее модифицирование осуществляли с применением смесового комплексного модификатора (ФС75л; ГЛС-3). Посткристаллизационное охлаждение отливок происходило вне формы (в специальном термосе) путем управления интенсивностью теплоотвода в интервале эвтектоидного превращения.

За одну разливочную кампанию выплавляется 22 отливки, от которых одна отбирается на проведение контроля качества и определение марки чугуна. Для оценки стабильности химического состава по ходу разливочной кампании в отливках № 5, 9, 12 и 22 спектральным методом определили содержание основных элементов, % масс: С (2,83 – 3,06), Si (1,90 – 2,2), Mn (0,64 – 0,68), S (0,03 – 0,05), P (0,06 – 0,08). Полученные результаты оценки химического состава были использованы для компьютерного моделирования процессов структурообразования в программном комплексе «Thermo-Calc», так как известно [5], что понимание процессов структурообразования протекающих в железоуглеродистых сплавах при их затвердевании в реальных (неравновесных) условиях невозможно без исследования, равновесного состояния

Всероссийская конференция

которое является отправной точкой в понимании направлений разработки совершенствования структуры кристаллизации с целью улучшения технологических и эксплуатационных свойств литого металла.

После удаления затравочной части, от верхнего и нижнего торца заготовки были отрезаны кольца для замера твёрдости (по Бринеллю, по Роквеллу HRB) и изучения микроструктуры по толщине стенки. Металлографические шлифы готовились обычным способом. Изучались различия в структуре, предположительно отражающиеся на механических свойствах. Проводилась оценка графита и вторичной структуры в соответствии с требованиями ГОСТ 3443 [7]. Для выявления перлитной структуры металлической основы проводили кратковременное травление в 4 % HNO_3 . Также из средней части отливки были подготовлены пять продольных темплетов для получения разрывных образцов диаметром 10 мм с рабочей длиной 50 мм ГОСТ 1497 [6]. Дендриты первичного аустенита в сером чугуна при исследовании их методами оптической металлографии выявляли многократным травлением в смеси борной и серной кислот.

Количественные металлографические исследования с целью определения объёмной доли дендритных кристаллов первичного аустенита ($f_{\text{ДК}}$) выполняли методом секущих на микроскопе Zeiss Axiovert 40 MAT, при увеличении 100. Из-за высокой дисперсности дендритных кристаллов в поверхностном слое, количество дендритов определяли при увеличении 500 и 1000.

Построенные по исследуемым составам псевдобинарные диаграммы состояния показали классический вариант затвердевания исследуемых составов: выделение первичных дендритных кристаллов, а при достижении расплава эвтектической концентрации - кристаллизация эвтектических ячеек.

Исследование формы, длины, распределения и количества включений графита по толщине стенки верхнего кольца показало наличие различной протяженности зон, не имеющих между собой четких границ:

- 1 зона «поверхностная», шириной 0,5 – 0,9 мм, без включений графита;
- 2 зона «подповерхностная», шириной 0,9 – 1,89 мм, содержит графит гнездообразной формы длиной до 15 мкм с междендритным точечным распределением;
- 3 зона «промежуточная», шириной 1,89 – 4,7 мм, содержит графит пластинчатой прямолинейной формы который распределён в виде колоний междендритного точечного и пластинчатого графита длиной 15 – 30 мкм;
- 4 зона «основная», шириной 10 – 12 мм, содержит по форме пластинчатый, прямолинейный графит длиной от 30 до 120 мкм имеющий междендритное распределение.

Травление на дендритную структуру выявило по толщине стенки зонное строение (по протяженности совпадающее с зонами графита) с присущим изменением в размере кристаллов и степени разветвленности:

- в «поверхностной» зоне объёмная доля дендритов максимальна 59 – 63 %, преобладают кристаллы с развитой осью 1-го порядка среднего размера 2,0 – 4,0 мкм;
- в «подповерхностной» зоне количество дендритов сохраняется практически на том же уровне ($f_{\text{ДК}} \approx 62\%$), но в сечении наблюдаются преимущественно кристаллы с развитыми осями 2-го порядка и средней длиной оси 1-го порядка 0,7 – 0,9 мкм;
- в «промежуточной» зоне объёмная доля дендритов постепенно снижается до 57 % и далее сохраняется по всему сечению «основной» зоны. В плоскости сечения доминируют кристаллы с развитыми осями 1-го и высшего порядков.

Анализ вторичной структуры показал полное отсутствие в структуре феррита, порядка 10 % по площади занимают зерна перлита с дисперсностью 1,8 мкм. Вся остальная металлическая основа представлена высокодисперсным сорбитообразным перлитом с расстоянием между пластинами цементита до 0,3 мкм. Включения цементита

Всероссийская конференция

наблюдаются только в «подповерхностной» и «промежуточной» зонах. Они равномерно распределены и занимают в среднем по площади от 8 % до 12 %, что объясняет повышенные средние значения твердости в этих зонах.

[1] Справочник по чугунному литью / под ред. Н. Г. Гиршовича – Л.: Машиностроение, 1978, - 758 с.

[2] Марукович Е.И. Принципиально новый эффективный процесс литья полых цилиндрических заготовок из чу-гуна методом направленного затвердевания /Е.И. Марукович, В.Ф. Бевза, В.П. Груша// Литье и металлургия. – 2010.-№3. С.21-24.

[3] Груша, В.П. Investigation of Grey Iron Primary Structure Influence on Hollow Castings Strength / В.П. Груша, В.Ф. Бевза, А.А. Барон // Solid State Phenomena. Vol. 299: Materials Engineering and Technologies for Production and Processing V / ed. by A. A. Radionov. – Switzerland : Trans Tech Publications Ltd (Scientific.Net), 2020. – P. 723-728.

[4] Structure and Properties of the Hollow Cast Iron Castings Formed by Continuous Cyclic Freeze Casting / А.А. Барон, В.Ф. Бевза, В.П. Груша, Д.Н. Гурулев, Л.В. Палаткина // Russian Metallurgy (Metally). - 2021. - Vol. 2021, No. 3. - P. 297-301. - DOI: 10.1134/S0036029521030046.

[5] Физическое металловедение: в 3-х т. под ред. Кана Р.У., Хаазена П.Т. Т.2: Фазовые превращения в металлах и сплавах и сплавы с особыми физическими свойствами: - М.: Металлургия, 1987. 624 с.

[6] ГОСТ 1497-84 Металлы. Методы испытаний на растяжение – М.: Стандартиформ, 2008. – 22 с.

[7] ГОСТ 3443–87. Отливки из чугуна с различной формой графита. Методы определения структуры. – М.: Стандартиформ, 2005. – 42 с.

Перемешивание включений при кристаллизации слитков

В. А. Ельтищев¹, Г. Л. Лосев¹, А. Д. Мамыкин¹, И. В. Колесниченко¹

¹Институт механики сплошных сред Уральского отделения Российской академии наук, 614018, Россия, г. Пермь, ул. Академика Королева 1

Кристаллизация расплавленных металлов и полупроводников представляет собой сложный и многофакторный процесс, который охватывает разнообразные физические явления. Эти явления играют ключевую роль в формировании, как структурных особенностей, так и механико-прочностных характеристик финальных изделий. Важным аспектом этого процесса является влияние течений, которые возникают в жидкой фазе слитка во время его затвердевания. Эти потоки в значительной мере влияют на развитие кристаллической фазы. Топология течений оказывают серьезное влияние на динамику процесса кристаллизации, что делает изучение этих факторов необходимым для понимания и оптимизации технологий производства металлических и полупроводниковых изделий [1–3].

В рамках данной работы рассматривается влияние перемешивающих течений, создаваемых различными комбинациями бегущих магнитных полей, на процесс распределения примеси при кристаллизации металла в изложнице. В качестве объекта исследования рассматривается сплав олова и свинца $Pb_{50}Sn_{50}$ (вес.%) с добавлением медного порошка (характерный размер гранул 100 мкм) массовой долей 3%. Распределение примеси в слитках после затвердевания металла изучается посредством анализа локальной проводимости металла. Измерения электрических свойств осуществляется кондуктометром Константа К6.

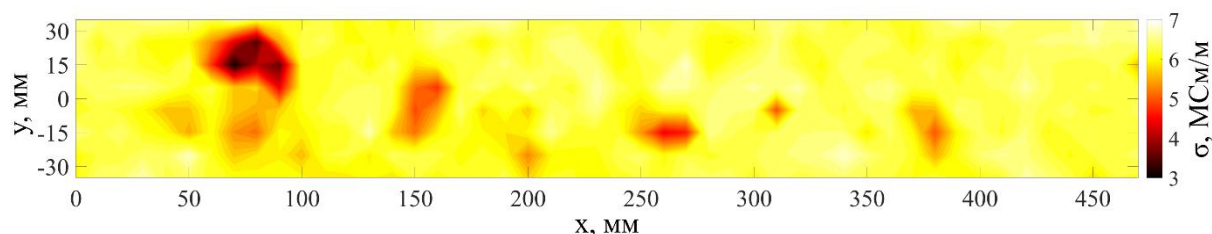


Рисунок 1. Пример поля электрической проводимости сплава $PbSn$ с примесью медного порошка, измеренное после кристаллизации слитка с перемешиванием.

Изучение структуры перемешивающих течений выполнено на легкоплавком сплаве $GaZnSn$ (температура плавления $+18^{\circ}C$). Изложница заполнялась сплавом, верхняя свободная поверхность которого, покрывалась раствором соляной кислоты, что обеспечивало образование пузырьков-трекеров, увлекаемых движением жидкого металла при электромагнитном перемешивании. Расположенная над изложницей камера фиксировала движение пузырьков-трекеров. Дальнейший корреляционный анализ изображений позволяет восстановить двумерную структуру течения в приповерхностном слое металла. В силу малости высоты слоя жидкости в изложнице по сравнению с планарными масштабами, течения является преимущественно двумерным. Таким образом,

Всероссийская конференция

описанный метод позволяет фиксировать ключевые свойства перемешивающих потоков.

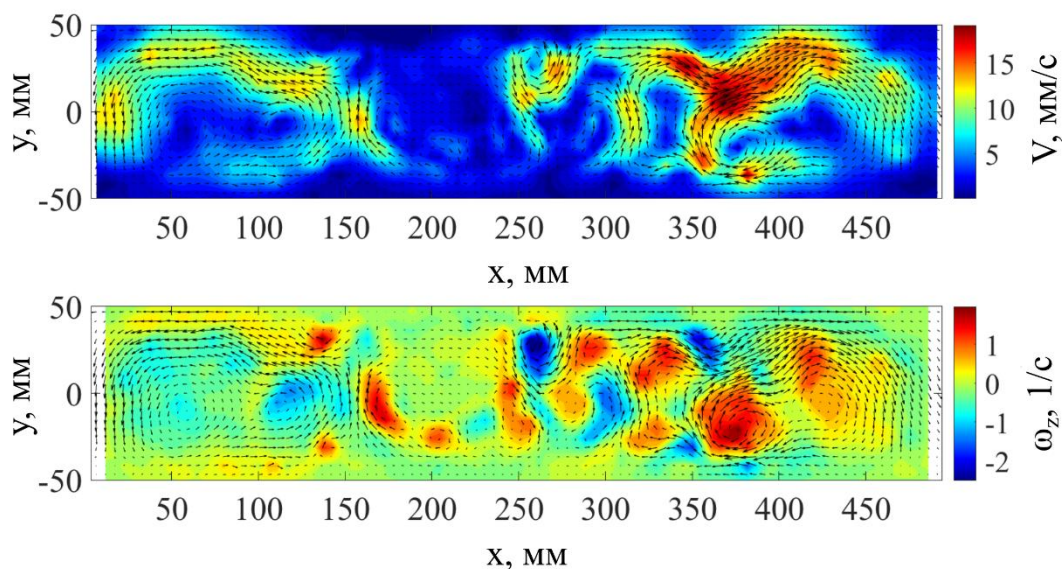


Рисунок 2. Поля скорости (сверху) и завихренности (снизу), полученные корреляционным анализом движения пузырьков-трекеров на поверхности жидкого металла.

Получены характеристики интенсивности перемешивающих течений и однородности распределения примеси после кристаллизации слитков в изложнице для нескольких режимов внешних силовых воздействий.

[1] O. Adigun, A. A. Aribisala, A. R. Adigun, S. O. Olusunle, O. O. Ajibola, A. F. Owa, A. D. Isadaro, C. I. Madueke, I. E. Abegunde, and K. B. Omonubi, Mechanical properties of aluminum alloys produced using different stir-cast stirring rates // Nigerian Journal of Technolog, 2024. Vol. 43.

[2] Протоковиллов И.В. МГД технологии в металлургии (обзор) // Общие вопросы металлургии, 2011. Т. 32 (4). С. 32–41.

[3] Дубоделов В.И. Состояние и перспективы развития исследований и разработок в области металлургической магнитной гидродинамики // Процессы литья, 1998. Т. 36 (3). С. 36–43.

Влияние способа разливки на формирование качества кузнечных слитковА.Н. Мальгинов¹, В.С. Дуб¹, И.А. Иванов¹, А.Н. Тохтамышев¹, М.А. Стрижов¹

¹Акционерное общество «Научно-производственное объединение «Центральный научно-исследовательский институт технологии и машиностроения», 115088, Россия, г. Москва, ул. Шарикоподшипниковская, д. 4

Сифонный способ разливки основан на принципе сообщающихся сосудов: струя металла через систему вертикального и горизонтального каналов попадает в изложницу снизу. Основное преимущество данного способа разливки над разливкой сверху – существенное повышение качества поверхности слитка.

В работе на основании компьютерного моделирования затвердевания промышленного слитка массой 70 т, применяемого при производстве ответственного машиностроительного оборудования, было изучено влияние нижнего (сифонного) подвода металла на теплофизические параметры кристаллизации.

Определено, что применение качественной схемы утепления прибыльной части слитка, включающей в себя утепление боковых стенок, зеркала металла, а также использование крышки, и современных технологических приемов позволяет обеспечить необходимую направленность затвердевания, позволяющую получить плотный сифонный слиток (рисунок 1).

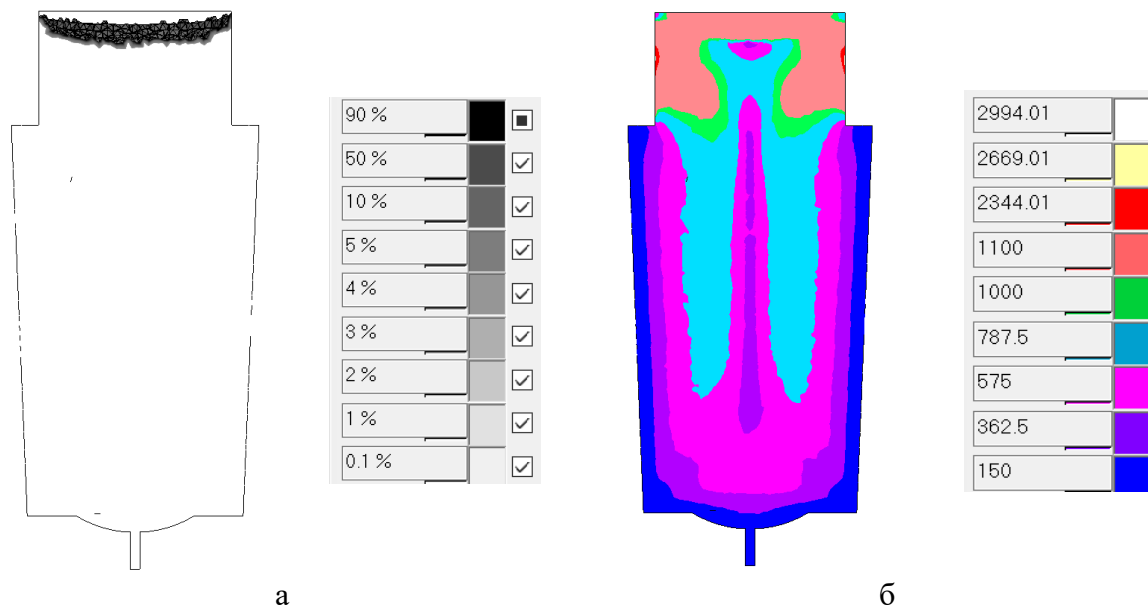


Рисунок 1 – Результаты компьютерного моделирования затвердевания сифонного слитка массой 70 т: а) пористость, %; б) расстояния между дендритными осями второго порядка, мкм

В настоящее время на заводах, производящих металлургические заготовки для энергетического и тяжёлого машиностроения, увеличивают как долю в общей номенклатуре производства, так и единичную массу кузнечных слитков,

Всероссийская конференция

отливаемых сифонным методом. В частности, в 2008 году на чешском заводе Pilsen Steel с помощью данного метода был отлит слиток массой 170 т из стали P285 для производства транспортировочного контейнера отработавшего ядерного топлива [1]. Слитки массой 435 т были отлиты в Германии из стали NiCrMoV для производства ротора турбины массой 200 т на заводе Thyssen Heinrichshütte и из стали 20MnMoNi55 для производства фланцевой обечайки корпуса реактора массой 135 т в условиях Siemens AG [2, 3].

Качество стального слитка зависит от распределения циркуляционных потоков жидкой стали внутри отливаемого слитка и места нахождения теплового центра. При сифонной разливке стали зона интенсивной циркуляции металла находится в нижней части слитка на протяжении всего процесса разливки, здесь же расположен тепловой центр. Это вызывает уменьшение толщины корочки затвердевающего слитка в тех местах, где ферростатическое давление достигает максимальной величины. Такое распределение потоков способствует задержке образования зазора между затвердевшей коркой и изложницей в нижней части слитка и создает торможение усадки стали по высоте слитка, которое может привести к образованию поперечных трещин на поверхности слитка. Расположение теплового центра в нижней части слитка к концу разливки затрудняет последовательную кристаллизацию, что может привести к развитию центральной пористости и неоднородности слитка.

При разливке сверху зона циркуляции стали перемещается последовательно снизу вверх. Максимальное ферростатическое давление воспринимается уже вполне затвердевшей, прочной оболочкой слитка. Нижняя часть слитка в этом случае кристаллизуется в условиях относительно спокойного состояния стали, то есть с большей скоростью, что приводит к более быстрому образованию зазора между слитком и стенкой изложницы. Торможение усадки по высоте слитка уменьшается. По этой причине при разливке стали сверху возможно разливать сталь с большей скоростью, чем при разливке сифонным способом (таблица 1). Из производственного опыта также известно, что для нормального процесса сифонной разливки стали необходимый перегрев металла над температурой ликвидуса должен составлять 40...60°C в зависимости от скорости разливки и массы слитка (таблица 1) [4].

Таблица 1 – Рекомендуемые параметры при разливке металла в слитки

Параметры		Тип разливки	
		Сифонная	Сверху
Скорость разливки	линейная, мм/мин	$V_{\text{лин}} = 420 \cdot M^{-0,2}$	$V_{\text{лин}} = 470 \cdot M^{-0,2}$
	массовая, т/мин	$V_{\text{масс}} = 0,3 \cdot M^{0,5}$	$V_{\text{масс}} = 0,5 \cdot M^{0,5}$
Температура начала разливки, °C		$T_{\text{пл}} + 90 \dots 120$	$T_{\text{пл}} + 70 \dots 110$

Примечания:

1. Температура стали определяет скорость разливки: горячую сталь необходимо разливать медленно, холодную – быстро.
2. М – масса слитка, т

Учитывая результаты проведенных исследований, в том числе промышленного металла, можно рекомендовать использование крупных

Всероссийская конференция

сифонных слитков (массой более 100 т) для производства изделий ответственного назначения.

- [1] Novak Martin, Gorcik Zdenek. Production Aspects and Materials Evaluation of the Forged Nuclear Cask from 170 Tons Bottom Poured Ingot. 17th International Forgemasters Meeting, Conference Proceedings, 2008.
- [2] Haverkamp K.D., Fisher K., Forch K., Piehl K.H. Production and Properties of a 200 t Generator Shaft Made from a 435 t Ingot. Ironmaking and Steelmaking, 1986, Vol. 13, No 5, pp. 276...280
- [3] Erve M., Schmidt J. Modern Manufacturing Techniques in Fabrication of Components for Advanced Water Cooled Reactors. Materials for Advanced Water Cooled Reactors. Proceedings of a Technical Committee, 1992, pp. 133...142.
- [4] Ромашкин А.Н., Мальгинов А.Н., Дуб В.С., Колпишон Э.Ю. Особенности технологии сифонной отливки слитков. Электрометаллургия, №1, 2013, с. 18...23.

Численное моделирование процесса МГД-перемешивания примеси в цилиндрической ячейке

Р. С. Окатьев¹, Г. Л. Лосев¹, И. В. Колесниченко¹

¹Институт механики сплошных сред УрО РАН, 614013 Россия, г. Пермь, ул. Академика Королёва 1

Создание перемешивающего течения в процессе кристаллизации позволяет существенно улучшить свойства получаемых слитков, в частности повысить степень однородности зеренной структуры [1] и распределения примесей [2]. При этом в силу высокой химической агрессивности жидких металлов наиболее предпочтительными оказываются методики бесконтактного перемешивания, которые основываются на воздействии на объем жидкого металла переменным электромагнитным полем [3].

Традиционные способы бесконтактного перемешивания подразумевают создание бегущего и вращающегося магнитных полей, а также их комбинации. Получающиеся в результате таких воздействий течения оказываются крупномасштабными. Это приводит к появлению застойных зон, в которых может накапливаться примесь, в результате чего снижается эффективность процесса гомогенизации [4].

Существует также другой подход к перемешиванию, который основывается на создании вращающихся магнитных полей, неоднородных по высоте ячейки с жидким металлом [5]. Неоднородность достигается использованием составного индуктора, который представляет собой совокупность шести кольцевых сегментов, каждый из которых способен независимо генерировать вращающееся магнитное поле. Путем чередования направлений вращения магнитных полей можно генерировать различные конфигурации течения.

В работе рассматриваются три конфигурации магнитного поля. Первая конфигурация соответствует сонаправленному вращению всех магнитных полей и совпадает со случаем обычного вращающегося магнитного поля. Во второй конфигурации три верхних кольцевых индуктора генерируют поле, вращающееся в одном направлении, а нижние три – в противоположном. В третьей конфигурации направления вращения магнитных полей чередуются по высоте. Схематическое представление рассмотренных конфигураций приведено на рисунке 1.

Для оценки эффективности перемешивания указанных конфигураций используется численное моделирование. Задача решается в рамках электродинамического приближения, что позволяет решать электродинамическую и гидродинамическую составляющие задачи последовательно. Электродинамическая задача решалась методом конечных элементов с использованием модуля ANSYS Emag. Гидродинамическая подзадача решалась методом конечных объемов с использованием пакета ANSYS Fluent.

Расчетная область гидродинамической задачи представляла собой цилиндрическую ячейку высотой 30 см. В начальный момент времени примесь

Всероссийская конференция

занимала верхние 3 см и имела однородное распределение объемной доли 0.1. Для моделирования динамики примеси использовался двухжидкостный подход (Euler-Euler) с подмоделями для дисперсной гранулярной среды. Электромагнитная сила, действующая на дисперсную фазу, определялась обобщением модели Леенова-Колина [6]. Плотность примеси на 10% отличалась от плотности основной жидкости. Размер частиц дисперсной фазы составлял 50 мкм. В качестве меры однородности распределения примеси рассматривался коэффициент гомогенизации, который высчитывался как среднее по объему среднеквадратичное отклонение объемной доли от значения, соответствующего полностью однородному распределению примеси.

Результаты расчетов показали, что наиболее эффективное перемешивание достигается в конфигурации двойного вращающегося магнитного поля. Это объясняется тем, что генерируемое полоидальное течение оказывается пульсирующим, что приводит к интенсивному перемешиванию примеси. При этом полоидальное течение в третьей конфигурации оказывается более сложным, однако характеризуется большей интенсивностью вихрей среднего масштаба, которые аккумулируют примесь. В случае однородного вращающегося магнитного поля полоидальное течение является слабым и перемешивание примеси оказывается наименее эффективным. Зависимость коэффициента гомогенизации от времени для трех рассмотренных конфигураций приведена на рисунке 2.

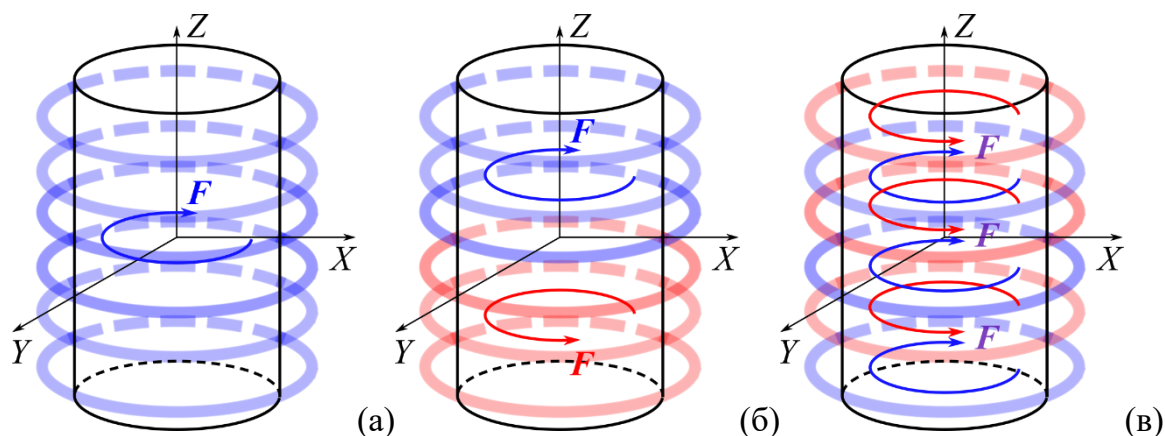


Рисунок 1. Схематичное представление рассмотренных конфигураций магнитного поля и электромагнитной силы: (а) – однородное вращающееся магнитное поле (ОВМП), (б) – двойное вращающееся магнитное поле (ДВМП), (в) – «торсионное» вращающееся магнитное поле (ТВМП)

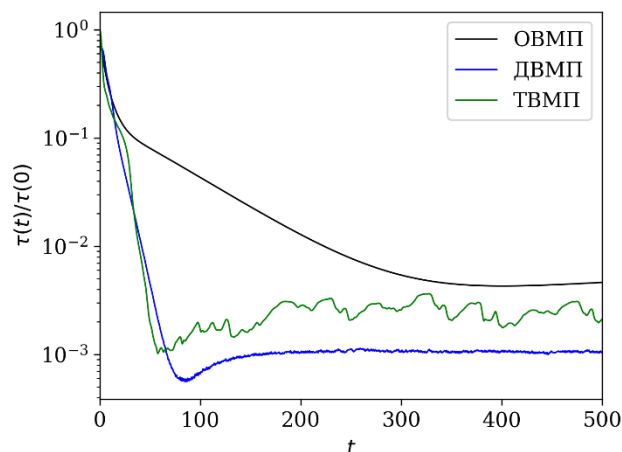


Рисунок 2. Зависимость коэффициента гомогенизации от времени для трех рассмотренных конфигураций магнитного поля

- [1] B. Murty, S. Kori, M. Chakraborty. Grain refinement of aluminium and its alloys by heterogeneous nucleation and alloying // *Int. Mater. Rev.*, 2002. Vol. 47(1). P. 3.
- [2] V. Timofeev, M. Pervukhin, E. Vinter, N. Sergeev. Behavior of non-conductive particles in molten aluminium cast into electromagnetic molds // *Magnetohydrodynamics*, 2020. Vol. 56(4). P. 459.
- [3] Y. Gelfgat, J. Priede. MHD flows in a rotating magnetic field (a review) // *Magnetohydrodynamics*, 1995. Vol. 32(2). P. 214.
- [4] E. Shvydkiy, E. Baake, D. Köppen, Liquid metal flow under traveling magnetic field-solidification simulation and pulsating flow analysis // *Metals*, 2020. Vol. 10(4). P. 532.
- [5] I. Kolesnichenko, R. Okatev. Equalisation the toroidal and poloidal kinetic energies of liquid metal stirring flow // *Eur. Phys. J. Plus*, 2024. Vol. 139. P. 846.
- [6] D. Leenov, A. Kolin. Theory of Electromagnetophoresis. I. Magnetohydrodynamic forces experienced by spherical and symmetrically oriented cylindrical particles // *J. Chem. Phys.*, 1954. Vol. 22(4). P. 683.

Влияние формы углерода на волновое горение системы Ti-Si-C

Н.С. Ларионова¹, Р.М. Никонова¹, В.И. Ладьянов¹

¹ Удмуртский федеральный исследовательский центр УрО РАН, 426067 Россия, г. Ижевск, ул. им. Татьяны Барамзиной 34

Интерес к исследованию тройной системы Ti-Si-C обусловлен возможностью получения на ее основе соединений семейства MAX-фаз (фазы $M_{n+1}AX_n$, где $n = 1, 2, 3, \dots$; M – переходный d-металл; A – p-элемент; X – углерод). MAX-фазы представляют собой тройные слоистые на уровне кристаллической решетки карбиды и нитриды d- и p-элементов, которые характеризуются уникальным сочетанием свойств металлов и керамики. В системе Ti-Si-C установлено существование MAX-фаз Ti_2SiC , Ti_3SiC_2 и Ti_4SiC_3 . Фаза Ti_3SiC_2 является типичным представителем данного класса соединений. Низкая вязкость разрушения и твердость в некоторых случаях ограничивают её практическое применение. Для решения данной проблемы в литературе предлагается введение в материалы на основе Ti_3SiC_2 упрочняющих фаз, например, TiB_2 , c-BN, Al_2O_3 , ZrO_2 , коротких углеродных волокон и углеродных нанотрубок. Одним из методов получения MAX-фаз является самораспространяющийся высокотемпературный синтез (СВС).

В настоящей работе исследованы особенности СВС MAX-фазы Ti_3SiC_2 в режиме волнового горения с использованием в качестве углерода различных его наноструктурных форм. Исследования выполнены в сравнении с традиционно используемой для синтеза Ti_3SiC_2 сажей. Для приготовления исходных шихтовых заготовок 3Ti-1.24Si-2C использовали смесь порошков титана марки ПТМ-1 (99%), кремния марки Кр-00 (99%) и углерода. В качестве последнего использовали сажу (П803), графеновые нанопластины (RG-S1), многослойные углеродные нанотрубки (МУНТ) (производитель УНМ “Таунит”, ТГТУ, г. Тамбов) и фуллерит $C_{60/70}$ (получен в НЦ МФМ УдмФИЦ УрО РАН методом электродугового испарения графитовых стержней). Избыток кремния по отношению к стехиометрии MAX-фазы Ti_3SiC_2 добавляли для компенсации его потерь в связи с возможным испарением. Реакцию СВС проводили в кварцевой колбе в условиях проточного аргона. Волну послойного горения реакционной смеси инициировали раскаленной вольфрамовой спиралью. Закономерности формирования структурно-фазового состава в сравниваемых системах изучены методами рентгеноструктурного и термического анализа, растровой электронной микроскопии, КР-спектроскопии.

На рис.1 приведены термограммы горения, отображающие различия в характере протекания реакций СВС в образцах 3Ti-1.24Si-2C в зависимости от используемой формы углерода. При горении образцов 3Ti-1.24Si-2C с использованием фуллерита $C_{60/70}$ и графеновых нанопластин так же, как с сажей, развивается температура выше 2000 °С. Согласно [1], механизм реакции СВС в этом случае заключается в образовании карбида TiC, который затем вступает в реакцию с расплавом Ti-Si с формированием Ti_3SiC_2 . Полученные материалы представляют собой композиты Ti_3SiC_2/TiC , количество MAX-фазы в которых

Всероссийская конференция

составляет 94, 85 и 67 вес.% соответственно для образцов с сажей, фуллеритом $C_{60/70}$ и графеновыми нанопластинами. Показано, что в случае с графеновыми нанопластинами содержание Ti_3SiC_2 неоднородно по объему образца (по краю цилиндрического слитка достигает до ~ 90 вес. %). Исходная форма частиц фуллерита $C_{60/70}$ влияет на характер реакции горения и качественный и количественный фазовый состав продуктов СВС.

Использование МУНТ приводит к существенному снижению температуры горения до 1240-1510 °С и изменению кинетики превращений (рис.1).

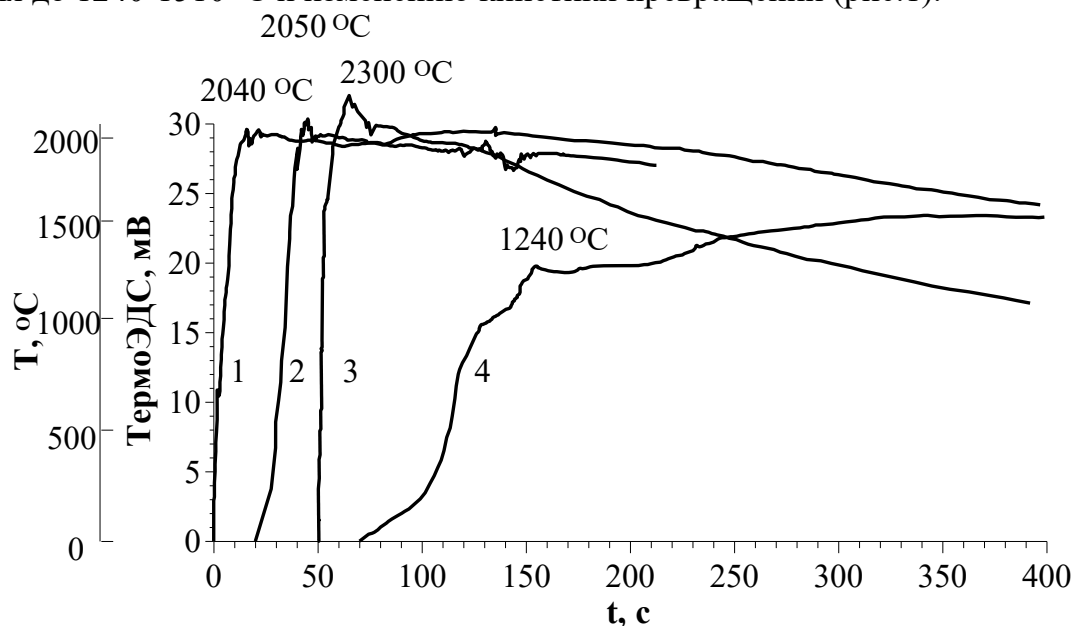


Рис. 1. Термограммы горения образцов $3Ti-1.24Si-2C$, полученных с использованием в качестве углерода:

1 – сажи, 2 – фуллерита, 3 – графеновых нанопластин, 4 – МУНТ.

Реакция синтеза карбида TiC_x (до температуры 1240°C) происходит в твердом состоянии по механизму реакционной диффузии. При этом последовательно или параллельно происходит формирование фаз $TiSi_2$ и $Ti_5Si_3C_x$. При достижении температуры значений 1330-1510 °С образуется эвтектика Ti-Si, способствующая формированию Ti_3SiC_2 (13 вес.%). Полученный образец состоит из фаз $Ti_3SiC_2/TiC_x/Ti_5Si_3C_x/C$. Его последующий нагрев приводит к формированию двухфазного материала Ti_3SiC_2/TiC_x с содержанием МАХ-фазы ~ 87 вес.%. Наблюдаемые отличия обусловлены высокой теплопроводностью МУНТ и, соответственно, потерями тепла в процессе синтеза.

Исследование выполнено в рамках госзадания (№ 1022040701106-8-2.5.1;2.5.3;2.5.4).

[1] Meng F., Liang B., Wang M. Investigation of formation mechanism of Ti_3SiC_2 by self-propagating high-temperature synthesis // Int. Journal of Refractory Metals and Hard Materials. 41. 2013. P. 152–161. <http://dx.doi.org/10.1016/j.ijrmhm.2013.03.005>.

О структурных особенностях быстрозакаленных лент промышленного сплава системы Fe-Si-B-Nb-Cu и их влиянии на кристаллизацию и магнитные свойства

Коновалов М.С.¹, Ладьянов В.И.¹, Тумаков Н.Ю.², Суслов А.А.¹, Бабкин С.Э.¹,
Ардашева Д.П.¹

¹Удмуртский федеральный исследовательский центр УрО РАН, 426067, Россия, г. Ижевск, ул. Т. Барамзиной, 34

²ООО «Научно-производственный комплекс «Автоприбор», 600016, Россия, Владимир, ул. Большая Нижегородская, 94

Аморфные сплавы системы Fe-Si-B-Nb-Cu широко используются в качестве прекурсоров для формирования магнитомягких аморфно-нанокристаллических сплавов [1-4]. При этом в [5] отмечается, что для сплавов такой системы оптимальное сочетание магнитомягких свойств достигается в результате термообработки при температуре, соответствующей примерно середине первого интервала кристаллизации. Химический состав и исходное структурное состояние быстрозакаленных лент сплавов системы Fe-Si-B-Nb-Cu могут оказывать значительное влияние как в целом на процесс их кристаллизации, так, в частности, и на параметры их первой стадии кристаллизации [6-8]. Не смотря на это, имеется недостаточно экспериментальных данных о влиянии на процесс кристаллизации исходного структурного состояния лент промышленного сплава на основе железа с соотношением массовых долей легирующих элементов Si:B:Nb:Cu, равным 6,5:1,1:4,1:1. При этом известно, что различия в исходном структурном состоянии лент могут приводить к появлению различий в их магнитных свойствах как в исходном состоянии, так и после термической обработки [5, 9].

В связи с этим целью данной работы является исследование влияния структурных особенностей быстрозакаленных лент промышленного сплава на основе железа с соотношением массовых долей легирующих элементов Si:B:Nb:Cu, равным 6,5:1,1:4,1:1, на их кристаллизацию и магнитные свойства как в исходном состоянии, так и на первой стадии кристаллизации.

В рамках настоящей работы исследованию подвергались ленты быстрозакаленного сплава системы Fe-Si-B-Nb-Cu изготовленные методом спиннингования расплава на вращающемся водоохлаждаемом медном диске в условиях ООО «НПК «Автоприбор». Процесс кристаллизации быстрозакаленных лент исследовался методом дифференциальной сканирующей калориметрии (ДСК) на установке NETZSCH DSC 404 C/1/3/G Pegasus. Структура и фазовый состав лент исследовались при использовании дифрактометра D8 Advance (Bruker AXS) с обработкой данных при помощи компьютерной программы TOPAS 4.2 (кристаллическая фаза моделировалась методами Ритвельда, а профиль аморфной составляющей задавался функцией псевдо-Войта). Измерение магнитных свойств проводили на установке открытой цепи УИМС (включает в себя веберметр Ф191) в квазистатическом магнитном поле ($H_{\max} = \pm 18$ А/см). Для анализа магнитной

Всероссийская конференция

анизотропии лент сплава в исходном состоянии проводили измерения при помощи вибрационного магнитометра NUVO-VSM МК-2. Термическую обработку образцов для измерения магнитных свойств, рентгеноструктурного анализа и исследования методом ДСК проводили в вакуумированной камере (до 10^{-2} Па) при нагреве образцов со скоростью 10 – 15 °С/мин и охлаждении со скоростью 20 – 25 °С/мин.

Анализ структуры контактной и свободной сторон исходных лент, показал наличие рефлексов на фоне аморфного галло, относящихся наиболее вероятно к фазе Fe_3Si с кристаллографическим типом структуры $D0_3$. При этом со свободной стороны ленты в исходном состоянии обнаружена периодичность интенсивности отражений от кристаллической фазы: приблизительно через каждые 20 м ленты появляются участки, рентгенограммы которых показывают на фоне аморфного гало всплеск интенсивности кристаллических рефлексов. При этом установлено, что кристаллическая фаза (наиболее вероятно кристаллы Fe_3Si) со свободной стороны лент в исходном состоянии присутствует в приповерхностном слое на глубине не более 2 мкм, а внутренние слои являются аморфными. При этом измерение магнитных свойств ленты в исходном состоянии показало, что образцы, обладающие в исходном состоянии разной степенью кристалличности со свободной стороны ленты, имеют близкие значения коэрцитивной силы (наблюдаемые различия находятся в пределах погрешности измерения), а значения магнитной индукции насыщения образцов с большей кристалличностью в приповерхностном слое незначительно превышают значения, полученные на образцах с меньшей кристалличностью. При этом для образцов ленты обнаружена магнитная анизотропия.

В результате проведенных исследований процесса кристаллизации установлено, что образцы лент, в исходном состоянии отличающиеся степенью кристалличности приповерхностных слоев со свободной стороны, кристаллизуются в одних и тех же температурных интервалах: от 493 до 554 °С протекает первая стадия кристаллизации, а от 653 до 698 °С – вторая. Аморфная составляющая всех образцов в результате нагрева до температур первого интервала кристаллизации кристаллизовалась с образованием фаз $\alpha\text{-Fe}(\text{Si})$ и Fe_3Si . Уровень магнитных свойств, определенный для всех образцов после отжига при 530, 540, 550 °С (вторая половина первого температурного интервала кристаллизации) в течение времени от 0 до 30 мин, по значениям магнитной индукции насыщения B_s и остаточной магнитной индукции B_r можно считать одинаковым: $B_s = 1,009 \pm 0,005 \dots 1,020 \pm 0,005$ Тл, $B_r = 0,008 \pm 0,005$ Тл. При этом значения коэрцитивной силы H_c , после термообработки при 530 и 540 °С составило $1,2 \pm 1$ А/м, а после термообработки при 550 °С – $2,3 \pm 1$ А/м.

Таким образом, разная степень кристалличности в исходном состоянии приповерхностных слоев со свободной стороны быстрозакаленных лент не оказывает значимого влияния на процесс кристаллизации и на магнитные свойства ленты после отжига при температуре, соответствующей первой стадии кристаллизации. Для ленты сплава на основе железа с соотношением массовых долей легирующих элементов Si:B:Nb:Cu, равным 6,5:1,1:4,1:1, оптимальное сочетание магнитомягких свойств достигается при формировании аморфно-нанокристаллической структуры с долей кристаллической фазы ($\alpha\text{-Fe}(\text{Si})$, Fe_3Si)

Всероссийская конференция

от 67 до 69 % и размерами кристаллитов $\sim 16,6 \pm 2,0$ нм в результате термообработки по режиму: нагрев в вакууме со скоростью 10 – 15 °С/мин до температуры 530 ... 540 °С, выдержка при этой температуре в течение времени t_i ($t_i = 0, 10, 20, 30$ мин), охлаждение до комнатной температуры со скоростью 20 – 25 °С/мин.

Работа выполнена по теме НИР (№ 121030100001-3) и в рамках реализуемого ООО «НПК «АВТОПРИБОР» проекта «Технология производства трансформаторов тока, фильтров и катушек индуктивности для радиоэлектронной промышленности из российского аморфного кольцевого магнитопровода» ИГК № 0000000002023QMQ0002 с использованием оборудования ЦКП «Поверхность и новые материалы» при УдмФИЦ УрО РАН.

- [1] Hossain M.K., Ferdous J., Haque M.M., Hakim M. Study and Characterization of Soft Magnetic Properties of $Fe_{73.5}Cu_1Nb_3Si_{13.5}B_9$ Magnetic Ribbon Prepared by Rapid Quenching Method // Mater. Sci. Appl., 2015. Vol. 6 (12). P. 1089.
- [2] Köster U., Schünemann U., Blank-Bewersdorff M., Brauer S., Sutton M., Stephenson G.B. Nanocrystalline materials by crystallization of metal-metalloid glasses // Mater. Sci. Eng. A, 1991. Vol. 133. P. 611.
- [3] Кекало И.Б., Самарин Б.А. // Физическое металловедение прецизионных сплавов. Сплавы с особыми магнитными свойствами, Москва (1989).
- [4] Knobel M., Sato Turtelli R., Reichenberg H.R. Compositional evolution and magnetic properties of nanocrystalline $Fe_{73.5}Cu_1Nb_3Si_{13.5}B_9$ // J. Appl. Phys., 1992. Vol. 71 (12). P. 6008.
- [5] Гойхенберг Ю.Н., Рошин В.Е., Ильин С.И. Структура и магнитные свойства аморфных сплавов в зависимости от степени кристаллизации // Вестник ЮУрГУ. Серия: Metallurgy, 2011. № 14 (231). С. 24.
- [6] Hono K., Ping D.H., Ohnuma M., Onodera H. Cu clustering and Si partitioning in the early crystallization stage of an $Fe_{73.5}Si_{13.5}B_9Nb_3Cu_1$ amorphous alloy // Acta Mater., 1999. Vol. 47 (3). P. 997.
- [7] Ohta M., Yoshizawa Y. Improvement of Soft Magnetic Properties in $(Fe_{0.85}B_{0.15})_{100-x}Cu_x$ Melt-Spun Alloys // Mater. Trans., 2007. Vol. 48 (9). P. 2378.
- [8] Ohta M., Yoshizawa Y. Cu addition effect on soft magnetic properties in Fe-Si-B alloy system // J. Appl. Phys., 2008. Vol. 103. 07E722.
- [9] Гойхенберг Ю.Н., Рошин В.Е., Ильин С.И. Особенности кристаллизации и формирования магнитных свойств аморфных сплавов при нагреве // Вестник ЮУрГУ. Серия: Metallurgy, 2016. Т. 16 (3). С. 134.

Влияние состояния расплава на структуру и свойства литого металла

Е.Е. Барышев, А.Г. Тягунов, И.В. Вандышева, Г.В. Тягунов

Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, 620062, Россия, г. Екатеринбург, ул. Мира 19

Для совершенствования качества литых изделий необходимо глубокое понимание процессов, протекающих на различных этапах их создания и производства. Известно, что высокими эксплуатационными свойствами обладают детали с дисперсной микроструктурой различного уровня. На эволюцию образования такой структуры в процессе затвердевания преимущественное влияние оказывает состояние расплава.

Существующая, динамически развивающаяся, наука о затвердевании металлических жидкостей опирается на основные положения классической термодинамической теории образования кристаллов из жидкой фазы путем возникновения устойчивого кристаллического зародыша. Но, не отрицает возможность реализации и других механизмов процесса кристаллизации. В частности, термодинамика предполагает образование кристаллического зародыша и его последующий рост по схеме случайного присоединения единичных частиц жидкой фазы. Однако многочисленные результаты физических экспериментов и машинного моделирования свидетельствуют о возможности изменения структуры дозародышей по мере их роста на стадии нано- и микро размеров в виде кооперации ассоциированных атомов или микрогруппировок.

Существование атомных ассоциаций в расплаве – это естественное явление и, с термодинамических позиций, энергетически выгодное. В связанных системах, к которым относятся металлы, масса объединенных атомов меньше суммы масс, составляющих ее отдельных атомов, а разность между ними Δm позволяет рассчитать энергию связи системы $E_{св} = \Delta m \cdot c^2$.

Предположение о существовании в расплавах атомных ассоциаций в виде микрогруппировок принадлежит Дж. Берналу, а их размеры впервые удалось определить Г. Стюарту и В.М. Данилову. В процессе эволюции теории конденсированного состояния наиболее популярным стал термин «кластер», в различных авторских трактовках. Последнее является не только предметом научных дискуссий, но и основанием для проведения новых экспериментов и построения моделей структурообразования веществ.

По мнению представителей научной школы профессора Б.А. Баума кластер – это единственный природный элемент конденсированного состояния, представляющий ассоциацию атомов, связанных межчастичным взаимодействием и совершающих согласованные тепловые колебания. В приведенной формулировке, обращаем внимание читателей на ведущую роль неравенства энергии взаимодействия различных атомов в структурообразовании веществ, в частности, в формировании структурных единиц твердого металла (кристаллическая ячейка) и расплава (кластер).

Всероссийская конференция

В соответствии с термодинамическим законом Гиббса любая система должна состоять, как минимум из двух составляющих. Однако в одном расплаве не могут одновременно существовать несколько фаз, не имеющих границ раздела и состоящих из одних и тех же элементов, если это не суспензионные или коллоидные системы. Отдельные атомы, характеризующие химическую сущность вещества, так же не рассматриваются в виде самостоятельной структурной единицы поскольку, невозможно различить атомы, принадлежащие веществу в твердом, жидком или газообразном состоянии.

По мнению академика Я.И. Френкеля, наряду с кластерами второй структурной составляющей вещества являются естественные вакансии. В процессе нагрева объем вакансий возрастает и перед плавлением составляет около 1,5 %.

Профессору И.В. Гаврилину удалось объединить идею Я.И. Френкеля и методики термодинамического анализа. Разработанная им модель и математический аппарат позволяют рассчитать параметры кластерной структуры расплава, включая размеры кластеров, объемы структурных зон, величину границ их раздела и количество активированных атомов, участвующих в процессах взаимодействия фаз и формирования физико-химических свойств.

При плавлении не происходит существенных структурных изменений, о чем свидетельствуют незначительное уменьшение плотности, теплоемкости, энтальпии и увеличение энтропии. В структуре расплава сохраняются атомное энергетическое поле, а также характерные особенности шихтовых материалов, что влияет на формирование неоднородного и неравновесного структурного состояния жидкого металла. Поэтому при производстве литой металлопродукции важное значение имеет не только параметры фазового перехода «твердое-жидкое», но и создание условий, при которых возможен переход от наследственной микронеоднородности к более равновесной, создаваемой только неравноценностью межатомных связей, а также устранение влияния структурного многообразия исходных шихтовых материалов.

Известны различные методы энергетического воздействия на состояние расплава. Одним из наиболее обоснованных и технологически приемлемых является выплавка сталей и сплавов с использованием термовременной обработки жидкого металла. Температуры и продолжительность различных этапов нормируются по результатам анализа отклонений политерма физических свойств от классических закономерностей, корреляционного анализа данных о структурной взаимосвязи конденсированных состояний, позитивной информации о качестве изделий и коммерческих показателей процесса.

Отличительная особенность рассматриваемой технологии состоит в создании необходимых условий структурного перехода «жидкость-жидкость» (LLD). При этом происходит минимизация радиусов кластеров до $r \leq 1$ нм, и они становятся соизмеримы с характерными длинами волн электрона и другими фундаментальными параметрами. Существование понятия «размерный фактор» предсказаны в работах П. Дебая, А. Эйнштейна и С.И. Попеля.

Следствием минимизации структурных элементов расплава является более равновесное и однородное их распределение по фронту затвердевания, что способствует снижению концентрационного градиента и локального

Всероссийская конференция

энергетического напряжения, повышению на порядок и более коэффициентов диффузии. Отмеченные и другие особенности свойств и строения расплавов благоприятствуют менее дефектному структурообразованию литых изделий. В частности, повышению частоты и интенсивности перехода округлых куполов к ячеистой структуре, а при дальнейшей потере устойчивости фронта затвердевания к появлению более дисперсных дендритов.

Многолетняя практика проведения плавок с термовременной обработкой расплава в агрегатах емкостью 0,5–30 тонн свидетельствует о том, что такая технология не требует дополнительного оборудования и специального подбора шихты. Отметим некоторые результаты ее использования:

4. - повышается склонность жидкого металла к переохлаждению и это позволяет снизить температуру разливки на 50–90 °С, повысить стойкость футеровки, литниковых систем, изложниц, форм, уменьшить прибыльную часть и использовать недорогие утеплители. При этом струя металла формируется без разрывов и разбрызгивания, что непосредственно отражается на качестве поверхности отливок;
5. - формируется макросостояние с меньшей химической и структурной неоднородностью. Отсутствует ликвационный квадрат. Сокращается отбраковка по поверхностным дефектам, в частности по высокотемпературным турбинным лопаткам в 5–8 раз;
6. - повышается дисперсность микроструктуры, плотность литья и уменьшаются параметры элементарных кристаллических ячеек;
7. - удается повысить, не изменяя марочный химический состав сталей и сплавов, характеристики пластичности при растяжении и кручении на 15–20 % без потери прочностных показателей, что создает перспективы для термообработки твердого металла;
8. - сокращается объем отбраковки на передлах, что способствует увеличению сквозного выхода годного и росту эффективности производства.

9. Итогом работы по разработке и оптимизации режимов термовременной обработки металлических жидкостей, осуществляемой при производстве сталей и сплавов, чугунов, аморфных и порошковых материалов, стало формирование представителями науки и специалистами предприятий неформальных творческих коллективов, способных создавать перспективные технологии, публиковать научные статьи и доклады, а также представлять к обсуждению необычайно интересные и оригинальные диссертационные работы.

Моделирование жаропрочности и структурно-фазовой стабильности сплавов на основе никеля

А.Г. Тягунов, Е. Е. Барышев, О.Б. Мильдер, Д.А. Тарасов

Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, 620062, Россия, г. Екатеринбург, ул. Мира 19

По имеющимся в открытой литературе данным создана база данных по жаропрочности 350 химических составов жаропрочных никелевых сплавов. Жаропрочность никелевых сплавов в промышленности оценивается пределом прочности на разрыв, в условиях длительной изотермической выдержки из интервала (100...10000) часов, при заданной температуре из диапазона (400...1150)°С. Всего может быть назначено порядка 55 различных режимов, но на практике для испытаний используется от 1 до 15 режимов и отсутствующие данные промышленных испытаний не дают полной возможности сравнения сплавов. В связи с этим поставлена задача дополнить полученную базу, недостающими данными на основании расчетов, для чего разработать и апробировать вычислительную методику, учитывающую роль каждого легирующего элемента и влияние технологии получения отливок на образование литой структуры жаропрочных никелевых сплавов, что позволило использовать в математических экспериментах всю имеющуюся выборку плавочных составов и свойств жаропрочных никелевых составов.

Основными в разработке модели выбраны методы статистического анализа и искусственных нейронных сетей (ИНС), позволяющие получить полную базу данных о химических составах и пределах длительной прочности жаропрочных никелевых сплавов. Методика вычислительного эксперимента заключается в определении закономерностей между плавочными составами жаропрочных никелевых сплавов и результатами их испытаний на предел длительной прочности.

Для моделирования изменения свойств сплавов на основе никеля применена глубокая неполносвязная искусственная нейронная сеть прямого распространения с байесовской регуляризацией, состоящая из 27 нейронов на входном слое, 13 скрытых слоев и 1 нейроном в выходном слое. Сеть реализована в среде MatLab. Обучение сети проводилось по алгоритму обратного распространения ошибки, который был дополнен бутстрепа алгоритмом, предотвращающим переобучение.

Для повышения точности предсказаний предложена новая методика подготовки данных. Для этого содержание легирующих элементов переведено в формат отношения количества их атомов на сто атомов никеля – т.н. нормализация к концентрации никеля. Температурно-временные режимы испытаний аппроксимированы комплексным параметром Ларсона-Миллера (PLM). С целью сохранения размерности параметров Ларсона-Миллера и концентрации легирующих элементов PLM преобразован путем деления на 105 и прологарифмирован для трансформации ошибок моделирования в относительные. Примененные преобразования понизили погрешность

Всероссийская конференция

вычислений до 15%, что соизмеримо с точностью экспериментального определения предела длительной прочности, значит выбрана адекватная модель.

С целью подтверждения точности моделирования подготовлена группа плавочных составов жаропрочных никелевых сплавов с максимальным числом результатов механических испытаний на предел длительной прочности. Параметры этих сплавов не использовались в тренировке нейронной сети. После подготовки и обучения ИНС произведен расчет жаропрочности этой группы сплавов по плавочным химическим составам и произведено сравнение полученных результатов с заранее известными экспериментальными. В результате получено определенное совпадение экспериментальных и расчетных данных, что подтверждает точность примененной модели.

Разработана и реализована математическая компьютерная модель влияния параметров испытания на изменение предела длительной прочности жаропрочных никелевых сплавов. Методом искусственных нейронных сетей с использованием имеющихся результатов физических испытаний смоделированы недостающие значения пределов длительной прочности, что позволило для каждого плавочного состава получить зависимости $\sigma=f(P_{LM})$. Результаты моделирования являются справочными и могут представлять интерес для разработчиков жаропрочных никелевых сплавов и конструкторов специальной техники.

Морфология зависимостей $\sigma=f(P_{LM})$ имеет сигма-образный вид, характерный для большинства жаропрочных никелевых сплавов (рис.1). Такое изменение предела прочности на разрыв объясняется процессами разупрочнения структуры. Изменение динамики структурной деградации сплавов на кривой зависимости $\sigma=f(P_{LM})$, отмечено как 1 и 2. Координаты этих границ структурных изменений индивидуальны для каждого состава сплава. Наиболее интересен средний участок, поскольку именно его наклон к оси абсцисс, а также координаты точки 2, отражают структурно-фазовую стабильность сплава.

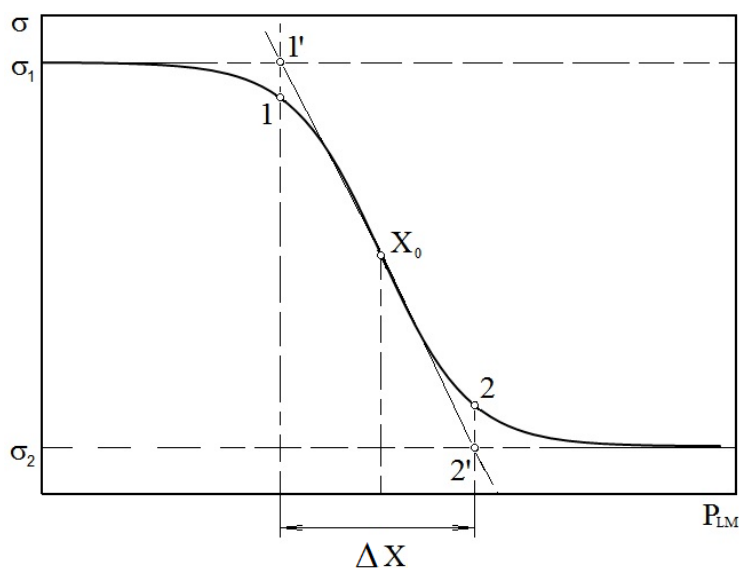


Рисунок 1.
Обобщенный вид зависимости предела длительной прочности от параметра Ларсона-Миллера, характерный для всех изученных сплавов на основе никеля

Зависимость жаропрочности от температурно-временных параметров испытаний $\sigma=f(P_{LM})$ описывается следующим аналитическим выражением:

Всероссийская конференция

$$\sigma(x) = \sigma_2 + \frac{\sigma_1 - \sigma_2}{1 + \exp\left(\frac{x - x_0}{p}\right)},$$

а для вычисления коэффициента изменения структурной деградации предложено следующее выражение

$$p = \frac{\Delta x}{4}$$

где σ_1 , σ_2 , x_0 и Δx параметры, устанавливаемые в ходе аппроксимации зависимости $\sigma=f(P_{LM})$ для конкретного состава сплава. Данные аналитические функции могут применяться для расчетов жаропрочности и фазовой стабильности без применения метода ИНС.

Предложенный метод может успешно использоваться для предсказания значений длительного предела прочности жаропрочного никелевого сплава и его структурной стабильности по заданному химическому составу с различным содержанием следующих химических элементов: Cr, Co, Mo, W, Al, Ti, Nb, V, Fe, Y, Zr, Ta, Re, Ru, V, Ce, La, Si, Mn, Mg, Hf, Cu, Bi, Pb, Ir. Использование в составе сплавов других элементов предусматривает получение новой модели аналогичным способом.

Разработан новый метод определения структурно-фазовой стабильности жаропрочных никелевых сплавов PS (Phase Stability), сочетающий в себе зависимость динамики деградации структуры и точку привязки этой динамики к наиболее характерному значению в терминах параметра Ларсона-Миллера, описываемый выражением:

$$PS = p \cdot \sigma(30)$$

Показано, что температура полного растворения γ' -фазы, которая традиционно использовалась для численной оценки структурно-фазовой стабильности жаропрочных никелевых сплавов первого поколения, не может корректно применяться для сплавов, легированных рением и рутением. Сравнение классического и вновь предложенного методов оценки структурной стабильности жаропрочных никелевых сплавов свидетельствует о их частичной корреляции. Совпадение оценки обоих методов фиксируется у сплавов первого поколения. Усложнение химического состава жаропрочных никелевых сплавов элементами, подавляющими диффузионные процессы, не приводит к значительному повышению температуры полного растворения γ' -фазы, но существенно улучшает структурную стабильность, что отлично отражает параметр PS. Таким образом, предложенная новая методика более адекватна при оценке структурной стабильности жаропрочных никелевых сплавов.

Сопоставление предела длительной прочности и параметра структурнофазовой стабильности жаропрочных никелевых сплавов по диаграммам в координатах $\sigma_{1000} - PS$ позволило ранжировать сплавы по распределению их основных свойств.

Анализ диаграммы сравнения жаропрочных никелевых сплавов позволяет заключить - применение высокотемпературной обработки расплава к жаропрочным никелевым сплавам позволяет получить изделия с максимальными значениями жаропрочности и структурно-фазовой стабильности.

Разработка конструктивного исполнения корпуса авиационного шестеренного насоса

В.С. Вишняков^{1,2}, А.А. Леонов¹, Е.А. Гапшев²

¹ «ОДК-СТАР», Пермь, Россия

² ПНИПУ, Пермь, Россия

Технический уровень всех отраслей промышленности и хозяйства в значительной степени определяется уровнем развития систем перекачки жидкостей. Проектируемые гидравлические машины должны иметь высокие эксплуатационные и технологические показатели: производительность, КПД, экономичность изготовления и эксплуатации, безопасность, надежность, высокие уровень стандартизации и кавитационный предел [1].

Внешний вид исходного корпуса и распределение напряжений от давления топлива представлены на рисунке 1. Масса корпуса составляет 6 кг.

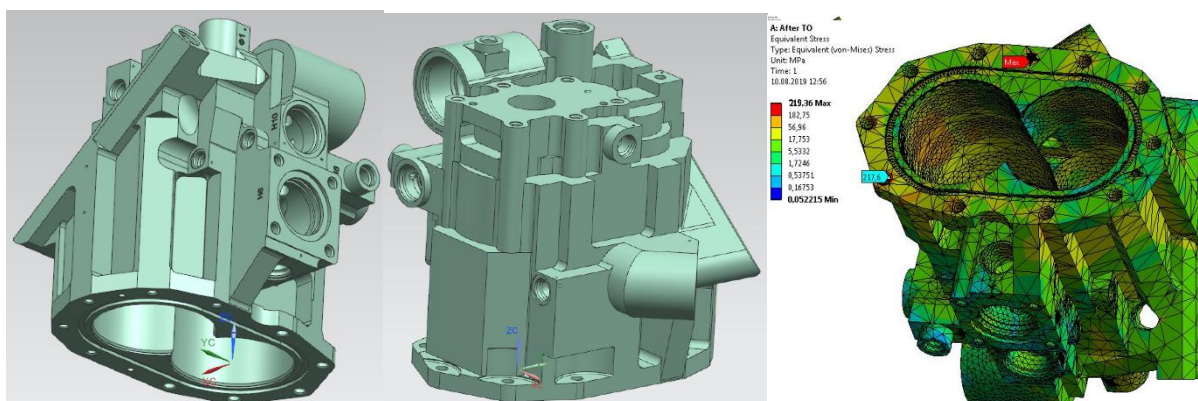


Рисунок 1 – Корпус авиационного насоса до оптимизации конструкции

Недостатки конструкции: избыточная толщина стенки; сообщение узлов в корпусе обеспечивается сверлением, а технологические отверстия закрываются пробкой; общая трудоемкость изготовления [2]. Все это сказывалось на весе, габаритах, надежности и стоимости агрегата и стало причиной для оптимизации конструкции под изготовление на промышленном 3D-принтере системы прямого лазерного сплавления металла 3DSystems ProX DMP320 [3].

При создании нового конструктивного исполнения корпуса для материала АК4-1 подобран аналог с лучшими прочностными показателями – AlSi10Mg. Сообщение узлов без «вредных» технологических элементов обеспечено технологией DLMS [4]. Корпус изготовлен с минимальным количеством поддержек благодаря проработке топологии под возможности принтера [5]. Исключена разделка предохранительного клапана – его функция выполняется

новой конструкцией клапана постоянного давления. Фильтр, клапан предохранительный и магнитная ловушка перенесены на сторону выхода из насоса – таким образом влияние магнитной ловушки распространено на выходящий поток топлива и уменьшен дисбаланс массы. Для перепуска топлива с клапана постоянного давления на вход насоса использован канал между колодцами – это позволило избавиться от массивного габаритного канала вокруг корпуса. Для увеличения жесткости добавлены пояс и ребра

Масса оптимизированного корпуса снижена на 38,5% и составила 3,7 кг. На рисунке 2 представлены трехмерные сборки агрегата шестеренного насоса до и после оптимизации конструкции.

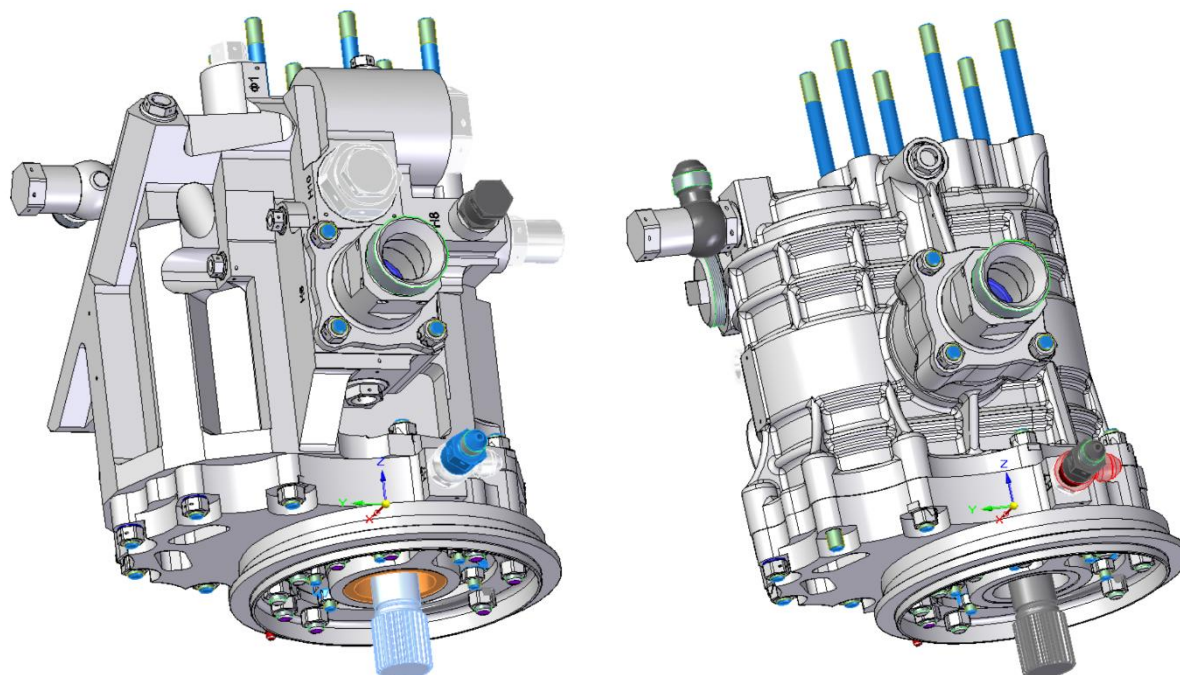


Рисунок 2 – Шестеренный насос до и после оптимизации

По результатам моделирования МКЭ получено эквивалентное по Мизесу распределение напряжений и деформации при рабочих давлениях (Рис. 3).

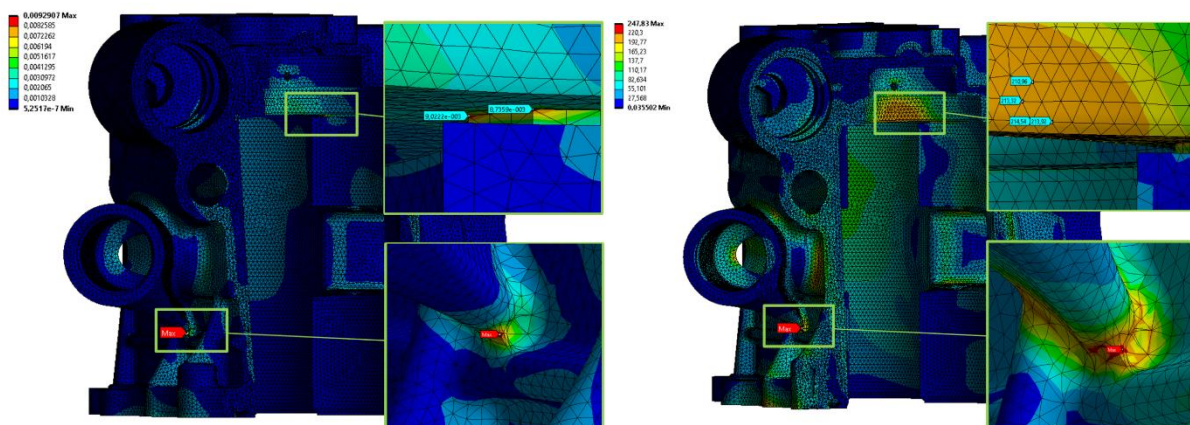


Рисунок 3 – Деформации и напряжения в корпусе при рабочих давлениях

Максимальное эквивалентное напряжение составило 247 МПа, а максимальная относительная деформация – 0,93%. Значения находятся в пределах допустимых. Коэффициент запаса прочности по предельным нагрузкам составил 2,2. Прочность корпуса насоса обеспечивается.

Перепроектирование позволило снизить массу агрегата на 17% с сохранением достаточной прочности корпуса. Также повысилась надежность насоса, снизились трудоемкость и цикл изготовления.

- [1] Экономическая эффективность технических решений. Учебное пособие. Под редакцией проф. И.В. Ершовой. Екатеринбург, 2016
- [2] Бим-Бад Б. М., Кабаков М. Г., Прокофьев и др., Атлас конструкций гидромашин и гидропередат. М., «Машиностроение», 1990.
- [3] ProX DMP320: Production printer. User guide: original instruction.
- [4] Слюсар С. Д. Аддитивные технологии // Конструктор 2016. № 8. С. 102-105.
- [5] Floudas C.A., Pardalos P.M., eds. Encyclopedia of optimization. New York, Springer, 2009.

Математическое моделирование заполнения заливочной чаши при заливке из шиберного ковша

Удод П.А.¹, Кадочников С.В.¹, Нуралиев Ф.А.¹, Ковалевич Е.В.¹

¹Акционерное общество «Научно-производственное объединение «Центральный научно-исследовательский институт технологии машиностроения», 115088 Россия, г. Москва, ул. Шарикоподшипниковская, д.4, к. 1А.

Целью работы является определение высоты заливочной чаши для заливки крупногабаритных отливок из чугуна. Исходными данными являются масса заливаемого жидкого металла, габаритные размеры заливочного шиберного ковша, количество и размеры шиберов и диаметр чаши. Так, на примере заливки формы отливки массой 120 тонн чугуном из шиберного ковша с двумя отверстиями диаметром 100 мм было промоделировано, что масса жидкого металла имеет свойство «накопления» в чаше (рисунок 1) до момента равенства расходов заливаемого чугуна в чашу и чугуна, заливаемого в стояк (рисунок 2), что позже было подтверждено экспериментально.

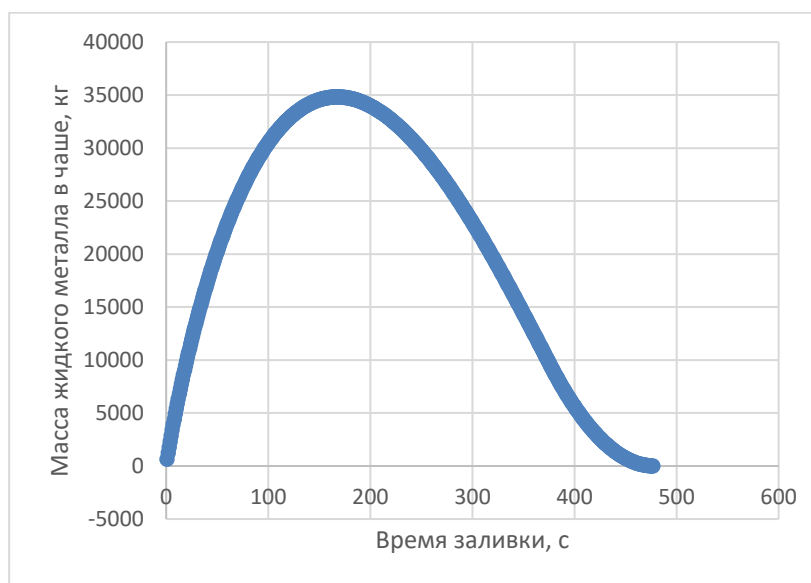
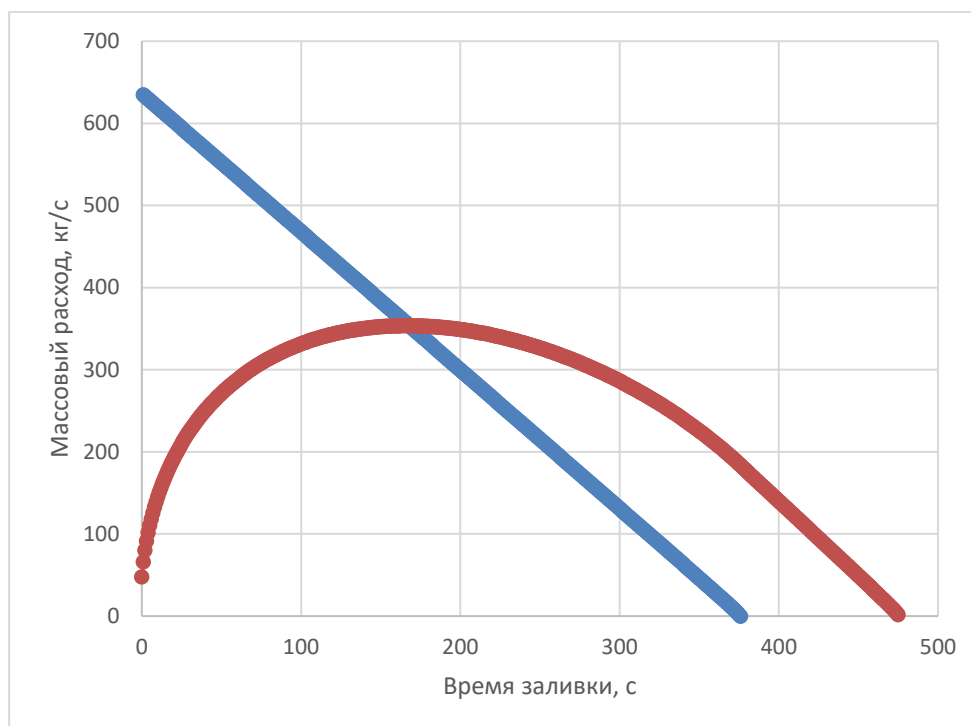


Рисунок 1 — Изменение массы жидкого чугуна в заливочной чаше



Синий — расход, поступающий в чашу, оранжевый — расход, поступающий в стояк

Рисунок 2 — График массовых расходов

Таким образом, зная диаметр чаши и рассчитав максимальную массу жидкого металла, можно рассчитать высоту необходимую для недопущения перелива металла из чаши.

Технологический подход к предотвращению азотной пористости слитков из супердуплексной стали

К.Н. Уткина¹, Л.Я. Левков¹, Е.Л. Корзун¹, А.В. Монастырский¹,
Тохтамышев А.Н.¹, Е.И. Ярополова¹, Климов Д.А.², Калмыков А.А.²

¹АО «НПО «ЦНИИТМАШ», 115088, г. Москва, ул. Шарикоподшипниковская, д.4

²АО «Русполимет» 607011, Нижегородская обл., Кулебаки, ул. Восстания, д. 1

В работе представлены результаты цифрового моделирования при исследовании затвердевания заготовок из супердуплексной стали (СДС) и практического опробования предложенного технологического подхода к предотвращению азотной пористости при затвердевании двухфазной стали.

Рассматриваемый подкласс сталей характеризуется повышенным содержанием азота, а его низкая растворимость в феррите, первоначально образующемся при кристаллизации, способствует образованию пор по телу слитка, что делает технологию уязвимой [1,2].

Согласно теории затвердевания металлов и сплавов, равномерность распределения элемента будет тем выше, чем выше будет скорость роста твердой фазы или скорость кристаллизации [3-5]. Проведенная в системе компьютерного моделирования литейных процессов «ПолигонСофт» оценка теплофизических условий формирования кузнечного слитка и слитка электрошлакового переплава (ЭШП) наглядно демонстрирует (рис. 1) обеспечение наиболее благоприятных условий кристаллизации (незначительные изменения линейной скорости кристаллизации $V_{кр}$ и градиента температуры G по сечению слитка) при последовательном наплавлении слитка. Малая глубина металлической ванны, характерная для ЭШП, обеспечивает высокий градиент температуры в двухфазной области, что, в свою очередь, способствует локальному увеличению коэффициента распределения [6].

В развитие технологического подхода опробовано две схемы с применением методов, воздействующих на кинетику затвердевания: ЭШП в подвижном кристаллизаторе в сочетании с принудительным охлаждением поверхности вытягиваемого слитка и принудительное охлаждение стенки изложницы кузнечного слитка. Установлено, что принудительное воздушное охлаждение поверхности слитка при ЭШП, распространяя воздействие на двухфазную зону, обеспечивает снижение профиля температурного поля примерно на 30 °С (рис. 2б). Это приводит к сокращению времени пребывания стали в интервале ликвидус-солидус. При кристаллизации в изложницы подобный эффект не обеспечивается, ввиду наличия воздушного зазора между стенкой изложницы и корочкой слитка (рис. 2а).

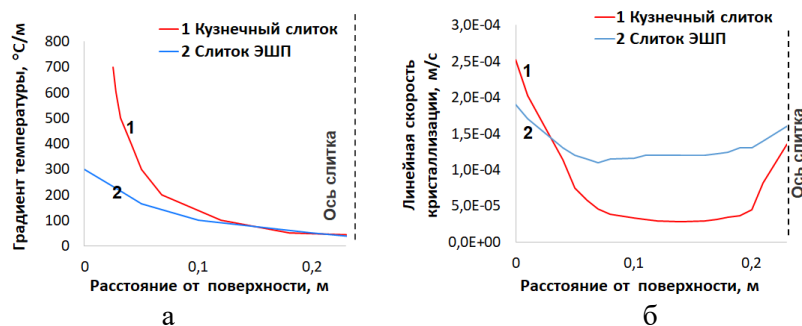


Рисунок 1 – Теплофизические условия формирования 3 т наливного слитка (1) и слитка ЭШП Ø450 мм (2) стали UNS S32750: а – радиальное распределение градиента температуры G , б – радиальное распределение линейной скорости кристаллизации $V_{кр}$

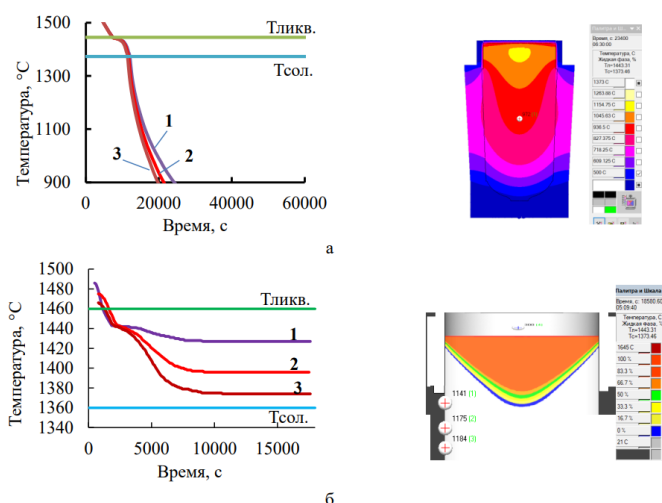


Рисунок 2 – Изменение температуры при охлаждении 3т наливного кузнечного слитка (а) и слитка ЭШП Ø450 мм в квазистационарных условиях (б) во времени: 1 - без принудительного охлаждения, 2, 3 - с принудительным воздушным охлаждением поверхности

Учет влияния скорости роста твердой фазы позволил обосновать применение технологических способов управления качеством СДС, позволяющих обеспечивать ускоренную кристаллизацию и сокращение времени пребывания металла в жидко-твердой области [7].

В промышленных условиях продемонстрирована эффективность применения технологического подхода: осуществлен пережар расходуемых электродов с содержанием азота 0,34 % масс., пораженных порами, с применением подвижного кристаллизатора Ø460 мм и принудительного охлаждения поверхности слитка ЭШП вне кристаллизатора. Это позволило повысить физическую однородность слитка ЭШП (рис. 3).

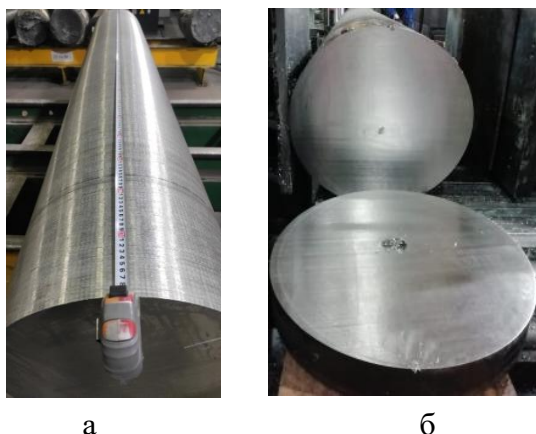


Рисунок 3 – Поверхность слитка из стали UNS S32750 (а), головная обреза (б) [7]

- [1] Свяжин, А.Г. Фазы и дефекты при кристаллизации легированных азотом нержавеющей сталей / А.Г. Свяжин, Л.М. Капуткина, В.Е. Баженов и др. // Физика металлов и металловедение - 2015, т. 116, №6 - С. 585-594.
- [2] Уткина, К.Н. Исследование особенностей формирования и эволюции фазового состава и структуры супердуплексных сталей / К.Н. Уткина, Е.Л. Корзун, Ж.К. Каширина и др. // Тяжелое машиностроение - 2023, №9. – С.2-10.
- [3] Пфанн, В.Д. Перераспределение растворимой примеси при кристаллизации//Зонная плавка – М.: Metallurgizdat, 1962 – с. 248-272
- [4] Тиллер, В. Сегрегация растворенной примеси при затвердевании слитка// Зонная плавка – М.: Metallurgizdat, 1962 – с. 307-354
- [5] Лакомский, В.И. Взаимодействие диатомных газов с жидкими металлами при высоких температурах / В.И. Лакомский – Киев, Наукова думка, 1992. – 232с.
- [6] Дуб В.С. Исследование внецентренной ликвации и разработка методов подавления ее развития в крупных слитках: дисс. на соиск. учен. ст. д-ра. техн. наук: 05.16.02/Дуб Владимир Семенович. - М.,1980, 310 с.
- [7] Уткина К.Н. Разработка технологических и композиционных способов управления качеством супердуплексных сталей // дисс. на соиск. учен. ст. канд. техн. н., 2024, Москва, 143 с.

Влияние легирующих элементов Nb и Mo на вязкость расплавов Co-Cr-Fe-Si-B

Д.С. Коробейникова¹, И.В. Стерхова², Л.В. Камаева², В.И. Ладьянов², Молоканов В.В.³

¹Удмуртский государственный университет, 426034 Россия, г. Ижевск, ул. Университетская 1

²Удмуртский федеральный исследовательский центр УрО РАН, 426067 Россия, г. Ижевск, ул. Т. Барамзиной 34

³Институт металлургии и материаловедения им. А.А. Байкова РАН, 119334, Россия, Москва, Ленинский проспект 49.

Сплавы системы Co-B-Si обладают высокой аморфизирующей способностью и являются основой для получения аморфных и нанокристаллических магнитомягких материалов с высокими механическими свойствами. Дополнительно легированные Fe и Cr сплавы на основе кобальта 84КХСР (Co-Fe-Cr-B-Si) широко используются в аморфном состоянии в устройствах электромагнитного экранирования в широкой полосе частот от 0 Гц до 1 МГц, а также являются перспективным сплавом для электроискровой обработки материалов [1]. Полученные электроискровые покрытия из аморфного сплава 84КХСР показали высокие трибологические свойства и стойкость к изнашиванию. Кроме того этот сплав является основой для получения аморфных микропроводов методом Улитовского-Тейлора [2, 3], которые обладают эффектом сверхупругости: упругая деформация при растяжении провода достигает рекордного значения 3% и сопровождается линейным ростом электросопротивления [4, 5]. Такие сплавы имеют перспективы практического использования для изготовления новых стресс чувствительных композитов, новых видов медицинских имплантатов и инструментов для эндоваскулярных вмешательств, ударопрочных и жаропрочных изделий для новой техники [6]. При этом весьма актуальна задача увеличения диаметра аморфного провода при сохранении пластичности, что позволит расширить области применения сплава. Дополнительное легирование малыми добавками Nb и Mo позволило увеличить толщину микропроводов практически на 30%. Кроме того, важными параметрами при выборе оптимальных условий получения микропроводов являются температура расплава и скорость вытяжки. Как известно, при выборе температуры закалки перспективным является анализ температурного и концентрационного поведения вязкости металлических расплавов, как одного из наиболее структурно-чувствительных свойств жидкого состояния. В связи с этим в данной работе было проведено исследования влияние легирующих элементов Nb и Mo (до 3мас.%) на температурное и концентрационное поведение кинематической вязкости расплава на основе Co 84КХСР.

Измерения кинематической вязкости исследованных расплавов проводили методом затухающих крутильных колебаний цилиндрического корундового тигля с расплавом в варианте Швидковского на автоматизированном вискозиметре. Исследования проводили в режимах ступенчатого нагрева от температуры на 10-

Всероссийская конференция

15 °С превосходящую температуру плавления до 1600 °С и последующего охлаждения. Шаг по температуре составлял 20 – 40 °С. Время выдержки при заданной температуре 10 минут. Для предотвращения неконтролируемого влияния оксидной пленки в качестве второй торцевой поверхности использовали цилиндрическую крышку из Al_2O_3 . Регистрацию параметров подвесной системы осуществляли оптическим способом с помощью лазера и прецизионного фотодатчика. Для доверительной вероятности 0,95 в интервале 1100 – 1600 °С наиболее вероятная ошибка определения абсолютных значений вязкости не превышала 4% при ошибке единичного измерения не более 1,5%.

Исследования кинематической вязкости расплавов Co-Cr-Fe-Si-B легированных до 3мас.% Nb или Mo показали, что температурные зависимости вязкости хорошо описываются уравнением Аррениуса и не имеют никаких особенностей во всем исследованном интервале температур. По полученным политермам ν были определены значения вязкости расплавов при фиксированных температурах и построены соответствующие зависимости ν от концентрации Nb и Mo. Анализ полученных изотерм ν показал, что легирование ниобием и молибденом оказывает различное влияние на вязкость сплавов Co-Cr-Fe-Si-B. Легирование базового расплава 1мас.% ниобия приводит к повышению его вязкости на 7%, а последующее увеличение концентрации Nb в расплаве сопровождается дальнейшим ее ростом. И для сплава с 3мас.% Nb увеличение вязкости составляет 20%. В отличие от Nb при легировании молибденом изменение значений вязкости расплава Co-Cr-Fe-Si-B определяется концентрацией Mo. При начальном легировании 1мас.% Mo также наблюдается увеличение вязкости на 7%. Тогда как последующее повышение концентрации молибдена в расплаве приводит к снижению вязкости до значений базового расплава. А при 3мас.% Mo наблюдается повышение вязкости, но ее значение ниже, чем для расплава с 1 мас.% Mo. Наблюдаемые эффекты на изотермах вязкости ярко выражены при небольшом перегреве над температурой ликвидус, а с повышением температуры расплавов концентрационное влияние легирующих элементов снижается. Такая особенность является следствием высокой энергии активации вязкого течения этих расплавов (от 45 до 49 кДж/моль), что характерно для легко аморфизирующихся систем. С повышением температуры влияние легирующих элементов, особенно Nb, сильно нивелируется. Выявленное концентрационное влияние Nb и Mo на вязкость расплава на основе Co 84КХСР отражается и на концентрационных зависимостях энергии активации вязкого течения. Анализ изотерм вышеописанных результатов позволяет сделать практические рекомендации для составов микропроводов и температур их закалки.

- [1] Grabchikov S. S. Materials of electromagnetic and radiation protection for electronic products // Proceedings of the National Academy of Sciences of Belarus. Physical-technical series, 2018. Vol. 63 (1). P. 7–14.
- [2] Молоканов В. В., Шалыгин А. Н., Умнов П. П., Чуева Т. Р., Умнова Н. В., Симаков С. В. Анализ факторов, определяющих условия получения «толстых» проводов методом Улитовского-Тейлора // Перспективные материалы, 2018. № 10. С. 47 – 53.

Всероссийская конференция

- [3] Молоканов В. В., Чуева Т. Р., Умнов У. П. П., Шалыгина Е. Е., Симаков С. В. «Толстые» аморфные провода в системе $Fe_{75}Si_{10}B_{15}-Co_{75}Si_{10}B_{15}-Ni_{75}Si_{10}B_{15}$: получение, структура, свойства // Перспективные материалы, 2016. № 2. С. 5 – 11.
- [4] Молоканов В. В., Палий Н. А., Каплан М. А., Крутилин А. В., Алпатов А. А. Эффект сверхупругости в структурно-упрочненном Co-сплаве // Материалы LXVI Международной конференции «Актуальные проблемы прочности», 2023, Зеленогорск, Санкт-Петербург. С. 82.
- [5] Алпатов А. А., Молоканов В. В., Крутилин А. В., Палий Н. А. Протяженные тензорезистивные датчики на основе аморфных микропроводов для контроля состояния конструкций и сооружений // Сб. тез.: VIII Всероссийская конференция с международным участием «Безопасность и мониторинг природных и техногенных систем», 2023, Красноярск. 95-98.
- [6] Патент RU 2804788.МПК:F17D5/00. Способ мониторинга напряженно-деформированного состояния трубопроводов / А.А. Алпатов, В.В. Молоканов, А.В. Крутилин, Н.А. Палий

Секция III

**Междисциплинарные вопросы.
Высокоскоростное затвердевание
Аддитивные технологии**

Многоматериальное прямое лазерное выращивание: механизмы трещинообразования на границах сталь - бронза и их многоуровневый анализ

К. И. Макаренко^{1,2}, М. М. Мурашев³, И. В. Шишковский¹

¹Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН, Самарский филиал, 443011 г. Самара, ул. Ново-Садовая, д. 221

²Сколковский институт науки и технологий, 121205 Россия, г. Москва, ИЦ Сколково, Большой бульвар 30, стр. 1

³Национальный исследовательский центр “Курчатовский институт”, 123182 Россия, г. Москва, пл. Ак. Курчатова, д.1

Многоматериальное аддитивное производство изделий из разнородных материалов, таких как система Fe-Cu (например, SS316L и бронза), методом прямого лазерного выращивания (ПЛВ, англ. термин - DED) открывает широкие перспективы для создания гибридных структур с индивидуальными и контролируемыми свойствами, востребованных в точном машиностроении (авиация, ядерная энергетика, робототехника). Однако образование трещин остается серьезной проблемой, нарушающей структурную целостность конструкций и ограничивающей возможности практического применения [1]. В докладе рассматриваются условия, при которых образуются трещины на поверхности раздела Fe-Cu в процессе ПЛВ, с акцентом на взаимодействие температурных градиентов, несовместимости материалов и параметров процесса.

Передовые методы исследования - компьютерная томография, фрактография трещин, нейтронная рентгенография и цифровая корреляция изображений (DIC), позволяют провести всесторонний анализ возникновения и распространения трещин.

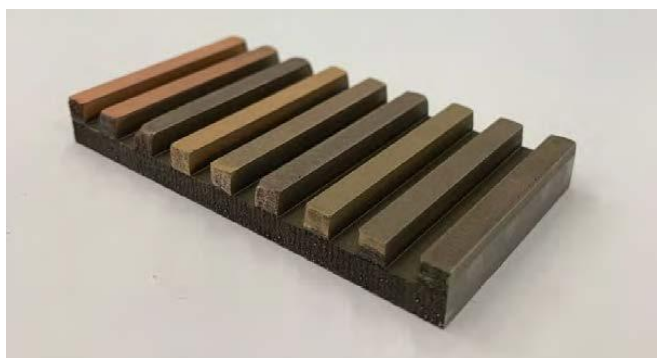


Рисунок 1.

ПЛВ корпуса теплоотводящей сборки: платформа - нержавеющая сталь, ребра - алюминиевая, оловянная и хромистая марки бронзы. Первые три ребра выполнены методом ПЛВ наз. марки бронзы; три следующих - градиентным способом; последние три - методом чередования слоев. Все ребра имеют хороший металлургический контакт в месте соединения бронзы и стали, без видимых дефектов, как трещины или поры.

КТ выявляет подповерхностные дефекты и концентрацию напряжений, фрактография трещин детализирует морфологию трещин и механизмы разрушения, а DIC количественно оценивает поверхностную деформацию и ее эволюцию в процессе обработки. Нейтронная рентгенография дополняет эти результаты, чтобы выявить характер распределения внутренних напряжений при высокоскоростной кристаллизации. Обсуждаются ключевые факторы, такие как несоответствие температурного расширения, образование интерметаллидных фаз и затраты энергии на наплавку, которые влияют на вероятность образования трещин. В докладе обобщены последние наши результаты [2, 3], чтобы предложить стратегии по минимизации образования трещин и повышению надежности многоматериальных 3Д печатных изделий для промышленного использования. Такие конструкции перспективны (Рис. 1) для применения в аэрокосмических приложениях, теплообменниках и износостойкой оснастке, где важно сочетание прочности, эффективной теплопроводности и долговечности.

- [1] Shishkovsky I., Missemer F., Smurov I. Metal matrix composites with ternary intermetallic inclusions fabricated by laser direct energy deposition. // *Composite Structures*, 2018, Vol. 183. P. 663.
- [2] Makarenko K.I., Konev S.D., Dubinin O.N., Shishkovsky I.V. Mechanical characteristics of laser-deposited sandwich structures and quasi-homogeneous alloys of Fe-Cu system // *Materials & Design*. 2022. Vol. 224. P. 111313.
- [3] Мурашев М.М., Эм В.Т., Глазков В. П., Шишковский И.В., Макаренко К.И., Сульянова. Е.А. Исследование металлических изделий аддитивных производств методами нейтронной визуализации. // *Дефектоскопия*, 2024, вып. 1, стр. 26.

Трансферное обучение и дизайн многокомпонентных металлических сплавов

Н. М. Щелкачев^{1,2}, Р. Е. Рыльцев²

¹Институт физики высоких давлений РАН, 108840 Россия, г. Москва, г. Троицк

¹Институт металлургии УрО РАН, 620016 Россия, г. Екатеринбург

Большинство современных функциональных материалов на основе металлических сплавов — это многокомпонентные материалы, приобретающие свои физико-химические свойства за счет комплексного легирования большим числом элементов. Большое количество степеней свободы делает чисто экспериментальный процесс поиска оптимальных составов сплавов крайне трудоемким и энергозатратным. Традиционный метод исследования таких систем в значительной степени исчерпал свой ресурс и не отвечает современным требованиям. Поэтому важной задачей является разработка новых подходов к дизайну материалов с использованием передовых открытий, новых установленных закономерностей, новейших методик исследования вещества.

Один из перспективных методов — многомасштабное моделирование, основанное на применении алгоритмов искусственного интеллекта. Полезная особенность этих подходов — это возможность детально исследовать широкие области термодинамических параметров, что важно для промышленности. Однако недавние исследования показали, что даже этот перспективный подход может быть крайне трудоемким и неточным для расчета транспортных свойств или фазовых диаграмм некоторых металлических сплавов.

С ростом числа химических элементов в материале быстро увеличивается количество возможных структур, так что тренировочные датасеты для построения потенциалов машинного обучения (MLIP) по идее должны содержать десятки или даже сотни тысяч конфигураций. Создание таких баз данных чрезвычайно трудоемкий и энергозатратный процесс. Кроме того, повышается вычислительная сложность *ab initio* расчетов, необходимых для формирования эталонных значений энергий и сил для данных конфигураций. Все это делает стандартные процедуры создания MLIP для многокомпонентных систем неэффективными.

Вычислительные затраты можно снизить на порядки, используя многоступенчатое трансферное обучение. Идея состоит в применении «универсальных» MLIP на основе сверхточных, но «медленных» графовых нейросетей, предобученных на больших квантовохимических базах данных, которые далее дообучаются на относительно малом числе *ab initio* конфигураций (finetuning). Далее на основе такой модели создается уже специализированный MLIP, основанный на более «быстрых» полносвязных нейронных сетях, позволяющих проводить расчеты с миллионами частиц на больших пространственно-временных масштабах. Такой подход позволяет совершить качественный скачок в создании MLIP и перейти от относительно простых модельных систем к многокомпонентным сплавам, по сложности сопоставимым с реально используемыми в промышленности функциональными материалами. Реализация описанной схемы требует применения прорывных методов

Всероссийская конференция

машинного обучения, таких как особые алгоритмы сэмпинга обучающих структур, алгоритмы компрессии нейросетей, новейшие «механизмы внимания» в глубоком машинном обучении.

Model ①	F1 ↑	DAF ↑	Prec ↑	Acc ↑	MAE ↓	R ² ↑	K _{SRME} ↓	Training Set
eqV2 M	0.917	6.047	0.924	0.975	0.02	0.848	1.771	3.37M (102M) (OMat24+MPtrj)
DPA3-v1-OpenLAM	0.883	5.754	0.88	0.963	0.023	0.869	0.741	6.6M (113M) (OMat24+MPtrj+sAlex)
GRACE-2L-OAM	0.88	5.774	0.883	0.963	0.023	0.862	0.294	6.6M (113M) (OMat24+sAlex+MPtrj)
ORB	0.88	6.041	0.924	0.965	0.028	0.824	1.732	3.25M (32.1M) (MPtrj+Alex)
MatterSim v1 5M	0.862	5.852	0.895	0.959	0.024	0.863	0.574	17M (MatterSim)
MACE-MPA-0	0.852	5.582	0.853	0.954	0.028	0.842	0.412	3.37M (12M) (MPtrj+sAlex)
GNoME	0.829	5.523	0.844	0.955	0.035	0.785	n/a	6M (89M) (GNoME)
GRACE-1L-OAM	0.824	5.255	0.803	0.944	0.031	0.842	0.516	6.6M (113M) (OMat24+sAlex+MPtrj)

Рисунок 1. Универсальные графовые нейросети, появившиеся в открытом доступе в последние полгода (взято с <https://matbench-discovery.materialsproject.org/>).

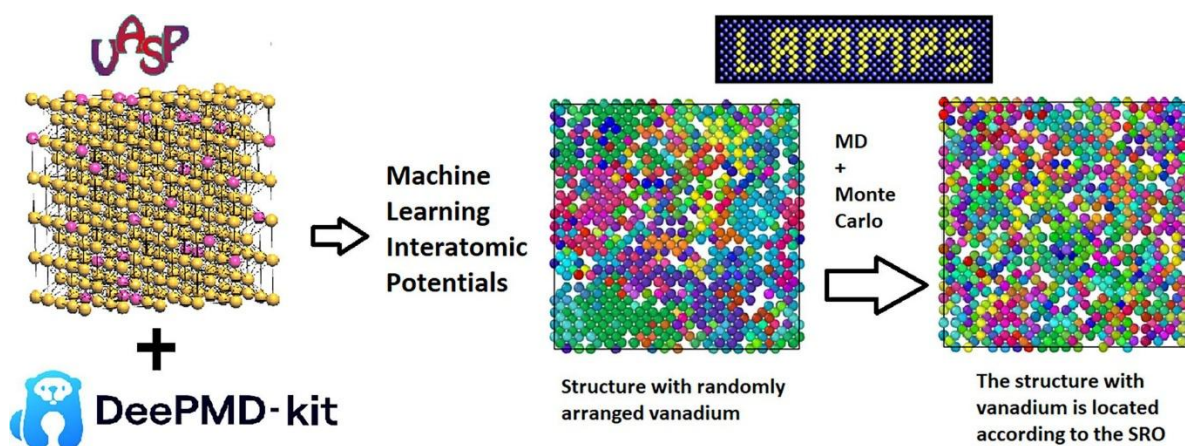


Рисунок 2 Изучение ближнего химического и магнитного порядка (SRO) в объемноцентрированных кубических сплавах Fe-V [1].

Стратегия с использованием трансферного обучения и графовых нейросетей позволяет на порядок сократить объем обучающих данных по сравнению со стандартным подходом и с низкими затратами переобучить межатомный нейросетевой потенциал на нестандартные обменно-корреляционные функционалы, такие как r^2 SCAN и PBEsol. Например, расчет вязкости в многокомпонентных металлических расплавах представляет собой сложную задачу как для классических, так и для *ab initio* методов. Мы провели моделирование кинематической вязкости в тройных расплавах Al-Cu-Ni с использованием потенциалов глубоких нейронных сетей; отклонение от экспериментальных данных не превышает 12% и близко к интервалу неопределенности экспериментальных данных [2, 3].

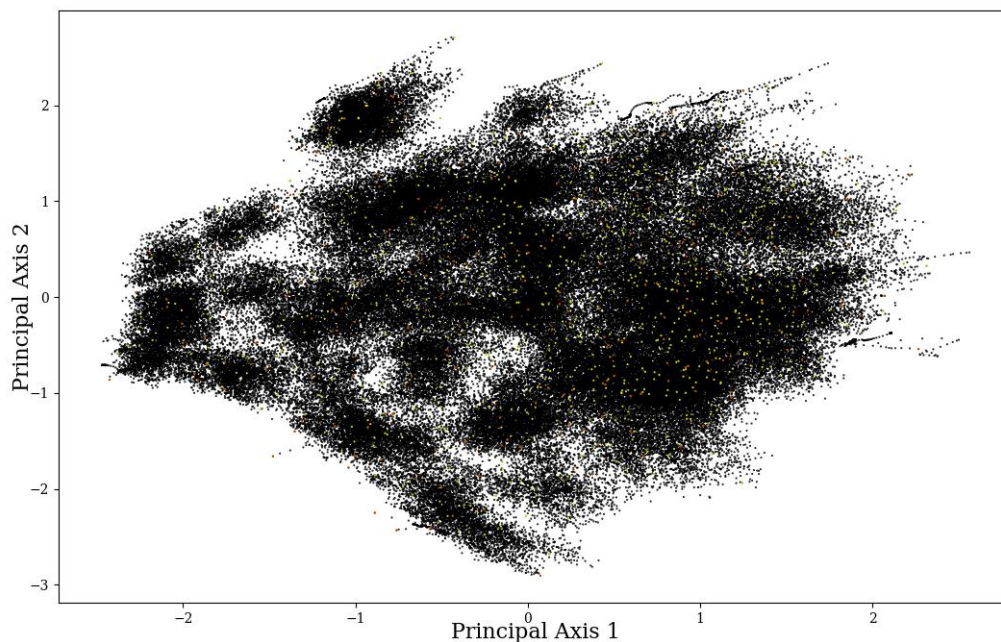


Рисунок 3. Анализ методом главных компонент (PCA) тренировочной базы данных сплава Fe–Cr–V–С. Для характеристики локальной структуры использовались SOAP дескрипторы. База данных содержит порядка 200 тыс. структур, полученных универсальной графовой нейросетью масе-тра с помощью классической молекулярной динамики и методов Монте-Карло.

Что еще более важно, наше моделирование воспроизводит минимальную концентрационную зависимость вязкости эвтектического состава. Мы построили трансферным методом межатомные потенциалы для высокоэнтропийных сплавов и рассчитали их термодинамические и механические свойства [4].

Разработка новых вычислительных подходов на основе графовых нейросетей и трансферного подхода является перспективным методом дизайна современных конструкционных материалов. Это алюминиевые сплавы, МАХ-фазы, высокоэнтропийные сплавы, объемно-аморфные сплавы и ряд материалов, интересных для атомной энергетики, исследования которых проводятся нами в сотрудничестве с промышленными предприятиями.

Работа выполнена при частичной поддержке гранта Российского научного фонда (№ 23-13-00162).

1. Verkhoviykh A.V., Chtchelkatchev N.M., Mirzoev A.A., Chernovol P.I. // *Comput. Mater. Sci.* 2025. Vol. 246. P. 113402.
2. Khazieva E.O., Chtchelkatchev N.M., Ryltsev R.E. // *J. Chem. Phys.* 2024. Vol. 161. P. 174101.
3. Kondratyuk N., Ryltsev R., Ankudinov V., Chtchelkatchev N. // *J. Mol. Liq.* 2023. Vol. 380. P. 121751.
4. Uporov S.A., Evdokimov I.V., Sidorov V.A. et al. // *Intermetallics* 2025. Vol. 177. P. 108575.

Многоуровневая конститутивная модель для описания механических свойств образцов стали 308LSi, полученных методом дуговой наплавки

Н. С. Кондратьев, Э.Р. Шарифуллина, А.Н. Подседерцев, А.А. Вшивкова,
К.А. Романов, Д.С. Безверхий, К.А. Курмоярцева

Пермский национальный исследовательский политехнический университет, 614990
Россия, г. Пермь, Комсомольский проспект 29

Аддитивное производство (АП) с использованием металлической проволоки является перспективным и экономически эффективным методом производства крупногабаритных и геометрически сложных металлических конструкций, деталей и изделий [1]. Применение и совершенствование данных технологий требует подбора параметров процесса изготовления конструкции: интенсивность плавления, тип сварки, температура подложки, скорость движения печатающей головки и другие [2]. Формируемая в результате АП материальная структура существенно зависит от этих параметров, и обладает свойством анизотропии: механические свойства, включая прочностные и усталостные свойства в различных направлениях, могут отличаться на десятки процентов. Следовательно, целесообразно управление процессом АП с целью адаптации микроструктуры получаемых изделий к условиям характерных воздействий, соответствующим условиям эксплуатации. Это позволит улучшить эксплуатационные характеристики деталей [3], позволит организовать высокоточный контроль условий процесса производства [2].

Для решения обозначенной задачи в первую очередь необходимо детально исследовать взаимосвязь микроструктуры и свойств получаемого материала-изделия. Для исследования свойств материалов испытываются стандартные образцы, вырезаемые из простых выращенных конструкций (стенок, балок, и др.). Механические испытания таких образцов показывают существенную анизотропию свойств, зависящих от ориентации образца относительно направления наплавки, что подтверждает существенное влияние микроструктуры на свойства [4, 5].

Для комплексного описания взаимосвязи структуры материала, полученного методами АП, и его свойствами необходимо построить математическую модель. Для решения данной задачи, а также для решения задачи создания функциональных материалов-изделий с необходимыми характеристиками, наиболее перспективными представляются многоуровневые математические модели, явным образом учитывающие текущее состояние структуры [6]. В таких моделях вводятся внутренние переменные, которые позволяют описывать эволюцию структуры материала и физические механизмы неупругого деформирования. В силу универсальности физических механизмов, закладываемых в такие модели, описание анизотропных свойств получаемых материалов, а также физически обоснованное предсказание неупругого отклика и ресурса материалов, полученных методами АП при различных режимах техпроцессов, происходит естественным образом.

Всероссийская конференция

В рамках выполнения работы проведен анализ структуры образцов стали 308LSi, полученных методами дуговой наплавки с проковкой и без проковки. Разработано представление этой структуры, которое было внедрено в созданные конститутивные модели (КМ) материала, связывающую ее с основными механическими характеристиками.

На основе литературного анализа определены основные механизмы неупругого деформирования, упрочнения, квазистатической и циклической прочности образцов стали 308LSi. Предложено их математическое описание в рамках предложенных КМ материала. Разработаны алгоритмы, осуществлена их численная реализация для созданных многоуровневых физически-ориентированных КМ образцов аустенитной стали 308LSi, полученных послойной наплавкой. Проведена идентификация и верификация моделей с использованием экспериментальных данных для образцов сплава 308LSi.

В результате проведенных расчетов установлено влияние структуры на эксплуатационные свойства материала на макроуровне. Разработанные модели позволили описать анизотропный механический отклик образцов в зависимости от начального состояния зеренной и дефектной структуры. Представлены и проанализированы результаты моделирования для исследуемых механических свойств образца – упругих модулей, условного предела текучести, квазистатического и циклических пределов прочности. Предложенные в рамках многоуровневого подхода модели в перспективе могут быть применены для решения оптимизационных задач по рационализации структуры для получения оптимальных эффективных свойств и проектирования функциональных конструкций, адаптированных под условия эксплуатации.

Создание методологической базы многоуровневого моделирования выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках реализации национального проекта «Наука и университеты» (в рамках выполнения государственного задания в лаборатории многоуровневого моделирования конструкционных и функциональных материалов, проект № FSNM-2024-0002).

- [1] Badoo N.R. Stainless steel in construction: a review of research, applications, challenges and opportunities // *Journal of Constructional Steel Research*, 2008. Vol. 64. P. 1199.
- [2] Olshanskaya T., Trushnikov D., Dushina A., Ganeev A., Polyakov A., Semenova I. Microstructure and Properties of the 308LSi Austenitic Steel Produced by Plasma-MIG Deposition Welding with Layer-by-Layer Peening // *Metals*, 2022. Vol. 12 (1). P. 82.
- [3] Laghi V., Palermo M., Tonelli L., Gasparini G., Ceschini L., Trombetti T. Tensile properties and microstructural features of 304L austenitic stainless steel produced by wire-and-arc additive manufacturing // *The International Journal of Advanced Manufacturing Technology*, 2020. V.106(7). P. 3693.
- [4] Tonelli L. et. al. Influence of interlayer forced air cooling on microstructure and mechanical properties of wire arc additively manufactured 304L austenitic stainless steel // *Steel Research International*, 2021. 2100175.

- [5] Laghi V. et. al. Experimental results for structural design of wire-and-arc additive manufactured stainless steel members // Journal of Constructional Steel Research, 2020. V.167. 105858.
- [6] Трусов П. В. и др. Многоуровневые модели в физической мезомеханике металлов и сплавов: результаты и перспективы //Физическая мезомеханика, 2020. Т. 23 (6). С. 33.

Исследование механизма спекания порошка карбида кремния под воздействием лазерного излучения

Бубнёнков Б.Б.^{1,2}, Жармухамбетов А.С.^{1,2}, Иванов И.А.^{1,2}, Нарзуллоев У.У.^{1,2}

¹АО «НПО «Центральный научно-исследовательский институт технологии машиностроения (ЦНИИТМАШ)»

²ФГАОУ ВО «НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ «МИСИС»

Актуальным является применение аддитивных технологий для керамических материалов и карбида кремния, в частности. Это поможет уйти от использования металлических материалов и перейти к изготовлению сложных по конфигурации изделий с уникальными свойствами, включая низкую массу и высокие эксплуатационные свойства для применения в новых конструкторских разработках и при модернизации старых конструкций и механизмов с целью повышения эффективности.

Технология селективного лазерного спекания (СЛС) наиболее изученная технология на примере металлических материалов с большим опытом эксплуатации таких установок. Основным аспектом выбора СЛС для керамик является принцип спекания исходного сырья при температуре порядка 0,8 Тпл, поскольку физическая природа строения данного класса материалов практически исключает плавление, которое предполагается в технологиях селективного лазерного плавления (СЛП) и прямого лазерного выращивания (ПЛВ).

Карбид кремния, как и другие керамические материалы, при избыточном тепловом воздействии может изменять свой химический состав и свойства, соответственно. При нагреве до температуры плавления и выше происходит диссоциация бинарного соединения на отдельные составляющие, кремний и углерод. Предполагается, что при выборе оптимальных параметров лазерного воздействия можно будет обеспечить температурное воздействие, способствующее спеканию порошка SiC. При этом важно оценить и исследовать механизм спекания при лазерном воздействии, структурные и фазовые превращения, происходящие при этом процессе.

В качестве исходного материала для селективного лазерного спекания использовался порошок карбида кремния марки F320 по стандарту FEPA. В качестве рабочей установки для СЛС использовалась российская установка MeltMaster3D-160 (АО «НПО «ЦНИИТМАШ», Москва). В процессе подготовки к печати рабочая камера заполнялась инертным газом – аргоном во избежание образования SiO₂ при высокотемпературном воздействии ЛИ.






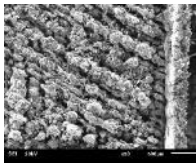
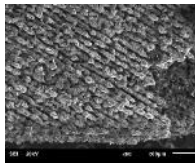
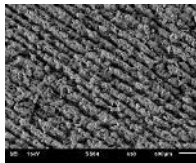
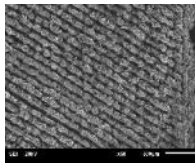
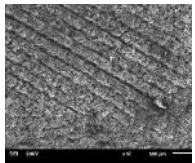
На основании проведённого анализа отечественных и зарубежных статей по СЛС, был выбран начальный комплекс параметров для работы установки для дальнейшего анализа микроструктуры получаемых образцов. Экспериментальные образцы размером 10 x 10 x 3 мм изготавливались по 16 технологическим режимам с целью исследования влияния параметров процесса селективного лазерного спекания на плотность, и микроструктуру. Изменялись такие параметры, как скорость сканирования (V) в диапазоне от 100 до 400 мм/с, шаг сканирования – расстояние между треками (штрихами) (d), в диапазоне от 75 до 150 мкм. Постоянными параметрами были толщина слоя (h) 50 мкм и мощность лазера (P) 150 Вт. Совокупность этих параметров формирует плотность энергии лазерного излучения - ЛИ (E, Дж/мм³), которая может быть выражена как:

$$E = P/(V \times h \times d) \quad (1)$$

Изготовленные образцы исследовались на электронном микроскопе с энергодисперсионной приставкой для спектрального анализа и определения химического состава структурных составляющих, а также был проведен рентгеноструктурный анализ для установления фазового и количественного фазового состава в изготовленных образцах.

В таблице 1 приведены фотографии и макрофотографии поверхности полученных образцов при различной плотности энергии ЛИ, от 400 до 50 Дж/мм³ слева направо.

Таблица 1 – Влияние плотности энергии лазерного излучения на качество поверхности образцов из порошка карбида кремния

400 Дж/мм ³	200 Дж/мм ³	133 Дж/мм ³	100 Дж/мм ³	50 Дж/мм ³
				
				

На основании проведенного исследования сделаны следующие основные выводы:

10. Плотность энергии лазерного излучения существенно влияет на спекание порошка карбида кремния: меняется морфология частиц, их дефектность, фазовый состав.
11. Существует пороговое значение плотности энергии, при превышении которого наблюдается активная термическая диссоциация с изменением цвета исходного порошка до светло-серого, а также ухудшение сплошности спекаемой поверхности порошкового слоя за счет набухания при формировании, вероятно, свободного кремния.
12. Исходные частицы после лазерного воздействия формируют между собой «мостики-шейки» по границам контактов, а также приобретают капельные сферические микрочастицы размером около 1 мкм на своей поверхности. При этом острые углы, характерные для исходной формы частиц сглаживаются, форма становится более обтекаемой, округлой. Химический состав капельных микрочастиц близок к карбиду кремния, однако преобладает в них кремний. Более детальный анализ таких частиц

Всероссийская конференция

показывает, что они имеют на своей губчатой поверхности свободный кремний, а матрица состоит из карбида кремния.

13. Механизм спекания, реализуемый при лазерном термическом воздействии на порошок карбида кремния, заключается в реализации комбинированного механизма – твердофазного спекания и испарения-конденсации. Границы контактов частиц в порошковом слое при лазерном воздействии фиксируются за счет твердофазной термической диффузии, а также за счет формирования капельных частиц, образовавшихся при диссоциации карбида кремния с последующей высокоскоростной конденсацией из-за локального характера воздействия. При этом, более легкоплавкий кремний оказывается на поверхности капельных частиц, дополнительно способствуя процессу спекания порошковых частиц.

Многоуровневая статистическая модель динамической рекристаллизации и ее применение для описания технологических процессов

Д. С. Безверхий, Н. С. Кондратьев

Пермский национальный исследовательский политехнический университет, 614990 Россия, г. Пермь, Комсомольский проспект 29

Большинство технологических процессов обработки металлов давлением реализуется при повышенных и высоких температурах (выше 0.5–0.7 от гомологической). В процессе формования заготовки при таких условиях в материалах реализуются процессы рекристаллизации и возврата, которые оказывают значительное влияние на внутреннюю структуру. Как следствие, изменение материальной структуры оказывает существенное влияние на свойства материала (предел текучести, предел прочности, твердость и др.). Традиционно промышленное производство изделий с применением технологических процессов опирается на опыт операторов, зачастую реализуется методом проб и ошибок, что отражается на стоимости и издержках производства [1, 2]. Методы численного моделирования призваны усовершенствовать этот процесс, позволяя повысить качество изделий и оптимизировать производственные расходы. Для совершенствования производственных процессов эффективным инструментом является применение многоуровневых конститутивных моделей, позволяющих исследовать не только напряженно-деформированное состояние, но и эволюцию структуры материала [3, 4].

В данной работе рассматривается прерывистая динамическая рекристаллизация, которая реализуется при неупругом деформировании в указанном диапазоне температур. Такой тип рекристаллизации представляет собой двухстадийный процесс, включающий отдельные стадии зародышеобразования и последующего роста зерен [5, 6]. Процесс образования новых зерен связан с выпучиванием границ зерен [5, 6]. При больших градиентах перемещений новые зерна полностью заменяют исходную зеренную структуру [5, 6], что приводит к изменению свойств материала.

В настоящее время наблюдается дефицит математических моделей, способных с высокой точностью и вычислительно эффективно прогнозировать поведение материалов и изделий при динамической рекристаллизации [5]. Макрофеноменологические модели являются недостаточно точными и ограниченными в плане учета микроструктуры, а современные физические модели чрезмерно требовательны к вычислительным ресурсам. Разработанная авторами физическая многоуровневая конститутивная модель [7] (рис. 1) позволяет с высокой степенью точности описывать поведение и внутренние переменные каждого зерна в рассматриваемой выборке представительного объема материала с учетом геометрической нелинейности [8]. Благодаря применению статистического подхода к моделированию процесса повышается вычислительная эффективность модели по отношению к моделям, явно учитывающих эволюцию и перестроение материальной структуры.

Всероссийская конференция

Одновременно с этим статистический подход позволяет детально исследовать эволюцию материальной структуры.

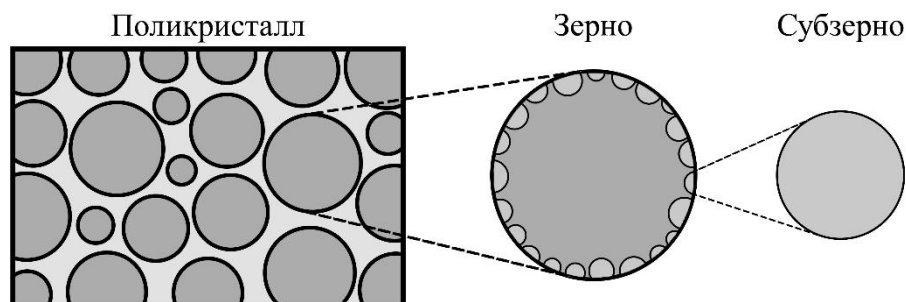


Рисунок 1. Схема физической многоуровневой модели динамической рекристаллизации

Разработанная многоуровневая модель динамической рекристаллизации [7] применяется при описании двух технологических процессов: многостадийной горячей осадки [9] и горячей прокатке. Эти технологические процессы широко применяются на металлургических и обрабатывающих предприятиях РФ. Для их описания используется программный комплекс конечно-элементного моделирования Abaqus, многоуровневая модель динамической рекристаллизации [7] применяется для исследования эволюции материальной структуры отдельных областей заготовок. В результате применения многоуровневой модели динамической рекристаллизации [7] было исследовано поведение внутренней структуры: эволюция размеров зерен, плотности дислокаций, напряженно-деформированное состояние, формируемая материальная текстура.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках реализации национального проекта «Наука и университеты» (в рамках выполнения государственного задания в лаборатории многоуровневого моделирования конструкционных и функциональных материалов, проект № FSNM-2024-0002).

- [1] Tzou G.Y., Chen D. C., Lin S.H. Multi-stage forging on torx-pin screw with high torque //MATEC Web of Conferences. – EDP Sciences, 2017. Vol. 119. P. 01048.
- [2] Mwema F.M. et al. Effect of punch force on the upsetting deformation process using three-dimensional finite element analysis //Journal of Physics: Conference Series. – IOP Publishing, 2019. Vol. 1378 (3). P. 032094.
- [3] Åkerström P. Modelling and simulation of hot stamping: diss. – Luleå tekniska universitet, 2006.
- [4] Karbasian H., Tekkaya A.E. A review on hot stamping //Journal of Materials Processing Technology, 2010. Vol. 210 (15). P. 2103–2118.
- [5] Sakai T. et al. Dynamic and post-dynamic recrystallization under hot, cold and severe plastic deformation conditions // Progress in materials science, 2014. Vol. 60. P. 130–207.
- [6] Humphreys J., Rohrer G.S., Rollett A. Recrystallization and Related Annealing Phenomena. – Oxford: Elsevier, 2017, 704 p.

Всероссийская конференция

- [7] Bezverkhy D.S., Kondratev N.S. Multilevel statistical model describing discontinuous dynamic recrystallization //Russian Physics Journal, 2025. P. 1-10.
- [8] Трусов П.В., Швейкин А.И. Многоуровневые модели моно-поликристаллических материалов: теория, алгоритмы, примеры применения. Новосибирск: изд-во СО РАН, 2019, 605.
- [9] Bezverkhy D.S., Kondratev N.S. Application of dynamic recrystallization physically based multilevel model to describe hot upsetting multistage process //Procedia Structural Integrity, 2024. Vol. 65. P. 17-24.

Эффект температурных колебаний в зоне расплава в технологиях лазерной 3D-печати

С. Л. Ломаев¹, Г. А. Гордеев², М. А. Тимиргазин¹, Д. Р. Фатталова¹,
М. Д. Кривилев^{2,1}

¹Удмуртский федеральный исследовательский центр УрО РАН, 426067, Россия, г. Ижевск, ул. им. Татьяны Барамзиной, 34

²ФГБОУ ВО «Удмуртский государственный университет», 426034, Россия, г. Ижевск, ул. Университетская, 1.

При определенных режимах обработки лазером металлической поверхности, а также в технологиях селективного лазерного плавления (СЛП) и прямого лазерного выращивания (ПЛВ) в зоне расплава (ЗР) может проявляться эффект температурных колебаний (ЭТК). Характерные частоты колебаний температуры и связанных с ней эффектов находятся в диапазоне 1–20 кГц. ЭТК может быть использован как для развития методов контроля и управления процессом лазерной обработки в реальном времени, так и для воздействия на процесс кристаллизации.

Численное моделирование ЭТК представляет собой достаточно сложную проблему, так как требует решения связанных нестационарных задач теплопереноса, гидродинамики и задачи Стефана. В данной работе развивается подход, в котором поиск решения разбивается на два шага:

1. На первом шаге связанные задачи решаются в квазистационарном приближении, в которой границы зоны расплава считаются неизменными во времени в системе координат, связанной с движущимся лазерным пятном.

2. На втором шаге с помощью представленной в работе теоретической модели ведется расчет ЭТК.

Модель ЭТК строится на применении методов теории малых возмущений к уравнению теплопроводности с учетом конвекции

$$\dot{T} - \alpha_{Me} \Delta T + \vec{v} \cdot \vec{\nabla} T = \frac{q}{c_p \rho}, \quad (1)$$

где температура $T = T(x, y, z, t)$ и источник тепла $q = q(x, y, z, t)$ представляют собой в общем случае трехмерные функции от координат и времени, α_{Me} – коэффициент температуропроводности материала в ЗР, c_p – изобарная теплоемкость, $\vec{\nabla}$ – оператор набла, $\dot{T} = \frac{\partial T(x, y, z, t)}{\partial t}$ – частная производная от температуры по времени. Анализ конвекции в ЗР основывается на уравнениях Навье-Стокса для несжимаемой жидкости:

$$\frac{\partial \vec{v}}{\partial t} = -(\vec{v} \cdot \vec{\nabla}) \vec{v} + \nu \Delta \vec{v} - \frac{1}{\rho} \vec{\nabla} P + \vec{g}, \quad (2)$$

$$\operatorname{div} \vec{v} = 0, \quad (3)$$

где $\vec{v} = \vec{v}(x, y, z, t)$ – скорость жидкости в точке (x, y, z) в момент времени t , $P = P(x, y, z, t)$ – поле давлений, которое формируется как за счет капиллярных эффектов, так и реактивного давления вылетающего из ЗР вещества, \vec{g} –

Всероссийская конференция

ускорение свободного падения, $\nu = \frac{\eta}{\rho}$ – кинематическая вязкость, Δ – оператор Лапласа.

В общем случае задача теплопроводности (1) должна решаться в трехмерной постановке, однако задачу о малых возмущениях температуры на поверхности ЗР δT можно свести к одномерному приближению, если малые возмущения δT не приводят к изменению структуры течений и границ ЗР. В этом случае уравнения (1)–(3) после ряда математических преобразований можно привести к уравнению

$$\delta \dot{T} + 2\zeta\omega_0\delta \dot{T} + \omega_0^2\delta T = 0, \quad (4)$$

представляющему собой уравнение затухающих колебаний температуры δT на поверхности ЗР в зоне воздействия лазерного излучения. Собственная циклическая частоты такой системы определяется выражением

$$\omega_0 = \frac{1}{l} \sqrt{\frac{\theta B_{Me} P_{vap}}{\rho T_s}}, \quad (5)$$

а коэффициент затухания

$$\zeta = \nu_{ch} l \frac{2 + \theta}{2\theta} \omega_0, \quad (6)$$

где l – характерный линейный размер ЗР, ν_{ch} – характерная скорость конфекции в ЗР, T_s – температура на поверхности ЗР под лазерным пятном без учета ЭТК (в квазистабильном приближении), $P_{vap} = P_{vap}(T_s)$ – реактивное давление вылетающего с поверхности ЗР вещества, а коэффициент θ определяется типом температурных полей внутри ЗР.

В рамках представленной модели давление P_{vap} задается показательной функцией в следующем виде:

$$P_{vap} = \left(1 - \frac{\phi}{2}\right) P_0 e^{A_{Me} - \frac{B_{Me}}{T}}, \quad (7)$$

где $P_0 = 1$ Па представляет собой нормировочный коэффициент, коэффициенты A_{Me} и B_{Me} являются характеристиками материала и определяются экспериментально, коэффициент ϕ характеризует долю вещества, которая не возвращается в ЗР после того, как испарилась с его поверхности. При лазерной обработке металлических материалов коэффициент ϕ может варьироваться в диапазоне $[0; 0,82]$. Коэффициент θ в рамках представленной модели определяется следующим образом

$$\theta = \ln\left(\frac{T_s}{T_{liq}}\right), \quad (8)$$

где T_{liq} – температура ликвидуса материала в ЗР.

В рамках данной модели было показано, что ЭТК возникает, когда T_s достигает достаточно высоких значений, при которых давление насыщенных паров материалов становится около 1 бар.

ЭТК сопровождается различными типами других колебательных явлений. Поверхность ЗР расплава в области воздействия лазерного луча также колеблется, что приводит, в свою очередь, к колебаниям коэффициента поглощения лазерной энергии. Данное явление было зафиксировано экспериментально. В работе [1]

Всероссийская конференция

были получены результаты колебаний коэффициента поглощения при различных режимах работы лазера, частота колебаний дает хорошее соответствие с данными, полученными из уравнения (4). ЭТК также приводит к генерации капиллярных волн на поверхности ЗР, а также к колебаниям поля скоростей, что, в свою очередь, оставляет характерные неоднородности на поверхности, а также в структуре затвердевшего материала. Примеры представлены на рисунке 1.

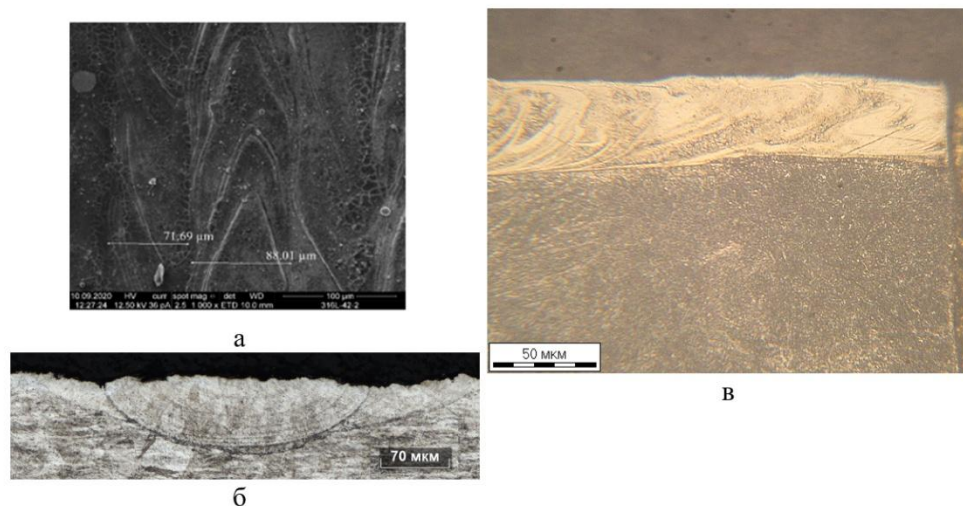


Рисунок 1 – Шлифы затвердевшего материала (сталь 316L) после лазерного сплавления одиночного слоя, на которых видны признаки ЭТК и связанные с ними колебательные эффекты. (а) Вид сверху. (б) Фотография шлифа, подготовленного поперек трека. (в) Фотография сечения шлифа вдоль трека

ЭТК приводит к генерации ультразвуковых колебаний на поверхности расплава частотой в диапазоне 1-20 кГц. Как показано в работе [2], колебания частотой выше 10 кГц могут быть задействованы для резонансного кавитационного схлопывания парогазовых пузырьков, формирующихся в ЗР в результате боллинг- или кейхол-эффектов. Этот факт открывает возможные перспективы для использования ЭТК в технологиях уменьшения пористости итогового изделия.

Таким образом, представленная в работе модель ЭТК находит не только свое подтверждение в эксперименте, но и позволяет оценить перспективу использования ЭТК для развития технологий лазерной 3Д-печати.

Работа выполнена при финансовой поддержке государственного задания Министерства образования и науки РФ (№ FUUE-2024-0011). Авторы выражают признательность Е.Б. Черепецкой, А.С. Бычкову, А.С. Алалыкину, Л.В. Камаевой за предоставленные экспериментальные данные.

- [1] Simonds B. J. et al. Time-resolved absorptance and melt pool dynamics during intense laser irradiation of a metal // *Physical Review Applied*. – 2018. – Vol. 10. – No. 4. – P. 044061.
- [2] Lomaev S. L. et al. Quantitative efficiency of optoacoustic ultrasonic treatment in SLM, DED, and LBW applications // *Scientific Reports*. – 2025. – Vol. 15. – No. 1. – P. 1887.

Комплексное описание механических свойств пористого материала

Г. А. Никифоров¹, Б. Н. Галимзянов¹, А. В. Мокшин¹

¹Казанский (Приволжский) федеральный университет, 420008, Россия, РТ, г. Казань, ул. Кремлевская, д.18.

Свойства пористых материалов зависят как от термодинамических условий (давление и температура), так и от строения пористой структуры. Пористую структуру можно охарактеризовать следующими основными параметрами: пористость, распределения пор и межпоровых перегородок по размерами [1]. Для более упрощенной характеристики пористого материала на основе распределений пор и межпоровых перегородок по размерам рассчитывают средние линейные размеры пор и межпоровых перегородок. Также на механические свойства пористых материалов влияет распределение твердой матрицы в материале [2]. С помощью рассмотренных параметров пористой структуры возможно получать пористые материалы с требуемыми функциональными и механическими свойствами. Для этого необходимо знать математическую зависимость между параметрами структуры и механическими свойствами. На данный момент хорошо изучена зависимость механических свойств от пористой материала [3]. Однако для наиболее точного описания механических свойств пористого материала один параметр не достаточен. Дополнительным параметром характеристики часто служит средний линейный размер пор. Однако на сегодняшний день не было описано математической зависимости механических свойств от данного параметра. В связи с этим целью настоящей работы является обобщенное описание механических свойств пористого материала от двух параметров: пористости и среднего линейного размера пор.

Объектом исследования в настоящей работе является пористый никелид титана NiTi. Была изучена зависимость от пористости и среднего линейного размера пор таких механических характеристик, как модуль Юнга, предел текучести и предел прочности. Для нахождения искомой зависимости были проанализированы данные на микромасштабе и наномасштабе. Данные для нанопористых систем были получены с помощью моделирования молекулярной динамики, данные для микропористых систем получены на основе эксперимента. На основе полученных данных было предложено выражение, описывающее зависимость механических свойств пористого материала от пористости и среднего линейного размера пор [4].

Работа выполнена за счет предоставленного в 2024 году Академией наук Республики Татарстан гранта на осуществление фундаментальных и прикладных научных работ в научных и образовательных организациях, предприятиях и организациях реального сектора экономики Республики Татарстан.

[1] 1. Liu P.S., Chen G.F. Porous Materials. Processing and Applications. Butterworth-Heinemann: Elsevier, 560 p., 2014.

Всероссийская конференция

- [2] Никифоров Г.А., Галимзянов Б.Н., Мокшин А.В. Механические свойства пористого никелида титана с различным пространственным распределением пор при одноосном растяжении // Журнал технической физики, 2023. Vol. 93 (12), 1740.
- [3] Ji S., Gu Q., Xia B. Porosity dependence of mechanical properties of solid materials. J. Mater. Sci. 2006. Vol. 41. P. 1757.
- [4] Galimzyanov B.N., Nikiforov G.A., Anikeev S.G., Artyukhova N.V., Mokshin A.V. A Unified Empirical Equation for Determining the Mechanical Properties of Porous NiTi Alloy: From Nanoporosity to Microporosity // Crystals. 2023. Vol.13(12). P.1656.

Аномалии, наблюдаемые при измерении вязкости металлических расплавов методом крутильных колебаний, их природа и механизмы

А.Л. Бельтюков

Удмуртский федеральный исследовательский центр УрО РАН, 426067 Россия, г. Ижевск, ул. Т. Барамзиной 34

Большинство технологий получения металлических материалов связано с затвердеванием жидкой фазы. Известно, что состояние жидкой фазы может оказывать существенное влияние на структуру и свойства, получаемых охлаждением расплава сплавов. В значительной степени это связано с особенностями состояния жидкой фазы (переходы жидкость-жидкость, релаксационные процессы и т.п.) и явлением структурной наследственности при затвердевании.

Вязкость является одним из наиболее структурно-чувствительных свойств расплавов и её измерение часто используется в качестве косвенного метода при изучении особенностей структурного состояния жидких сплавов. Наиболее распространенным и надежным методом определения вязкости металлических расплавов при высоких температурах (1000-1800°C) является метод крутильных колебаний, в основе которого лежит решение внутренней гидродинамической задачи с рассмотрением крутильно-колебательных движений цилиндра, заполненного жидкостью [1]. При экспериментальном исследовании вязкости на температурных зависимостях часто наблюдаются аномалии в виде резких изменений значений в режиме нагревания и/или охлаждения расплава, изломов политерма и др. Часто аномалии связываются с изменениями структуры расплава при изменении температуры, но единого мнения об их природе нет. Это связано с противоречивостью данных, получаемых разными авторами. В настоящей работе обсуждаются природа и возможные механизмы аномалий, наблюдаемых при изучении температурной зависимости вязкости металлических расплавов с использованием метода крутильных колебаний. Данное сообщение является результатом обобщения многолетнего опыта вискозиметрических исследований, проводимых в Научном центре Металлургической физики и материаловедения УдмФИЦ УрО РАН.

Пленочные эффекты. Метод крутильных колебаний основан на измерении логарифмического декремента затухания цилиндрического стаканчика с расплавом, подвешенного на упругой нити. Стандартно измерения вязкости проводятся в стаканчике, не полностью заполненном расплавом, т.е. верхняя граница расплава считается свободной. Однако в ходе эксперимента на поверхности расплава может образоваться оксидная пленка. Поскольку вязкость такой пленки много выше вязкости самого расплава, она выполняет роль второй твердоподобной торцевой поверхности. Наличие на верхней границе расплава вязкой пленки приводит к дополнительной диссипации механической энергии свободных крутильных колебаний подвесной системы вискозиметра с исследуемым образцом и, следовательно, завышению значений декремента

Всероссийская конференция

затухания. Формирование либо исчезновение пленки при изменении температуры расплава сопровождается относительно резким увеличением либо снижением значений декремента затухания и, соответственно, рассчитываемых значений вязкости. Пленочные эффекты были выявлены при вискозиметрии ряда систем (Co-B [2], Fe-B [3] и др.). Подобные аномалии политерм являются методическими и их исключение возможно в условиях эксперимента, при которых исследуемый расплав находится в замкнутом объеме, т.е. с закрытой верхней границей расплава [4].

Изменения условий смачивания расплавом стенок тигля. На примере жидких сплавов системы Co-B [4] показано, что аномальное поведение получаемых методом крутильных колебаний политерм вязкости, возможно за счет изменения условий смачивания расплавом стенок тигля. Влияние на результаты измерений вязкости методом крутильных колебаний высоты жидкости в тигле показано в работах [5,6]. Последнее обусловлено образованием ярко выраженного мениска, наличие которого при относительно небольшой высоте жидкости в тигле приводит к изменению эффективной высоты образца, что и сказывается на результатах измерений. При этом изменение условий смачивания при нагреве расплава (увеличение угла смачивания) может приводить к изменению характера получаемых политерм вязкости. В работе [5] для исключения влияния мениска на результаты измерений предлагается использование высоких тиглей (капилляров) с отношением высоты тигля к его радиусу более 8. При измерении вязкости в тиглях с крышкой на верхней границе расплава исключение влияния смачивания возможно за счет подбора массы крышки. При этом масса крышки должна быть достаточна для придания верхней границе расплава плоской формы и расплав не должен выдавливаться между боковыми стенками тигля и крышки.

Седиментация интерметаллидной фазы в двухфазной зоне. При измерении температурной зависимости вязкости наличие седиментационных процессов проявляется в длительном росте значений декремента затухания при нагреве образца выше температуры ликвидуса сплава и положительном гистерезисе политерм при последующем охлаждении (обнаружено в системе Al-Fe [7]). Седиментация тугоплавких интерметаллидов в двухфазной зоне приводит к неоднородности химического состава по высоте образца и смещению температуры плавления в область более высоких температур. В данном случае рост значений декремента затухания обусловлен увеличением доли жидкой фазы в процессе доплавления образца подобно процессу плавления в двухфазной зоне. Наличие процессов седиментации подтверждается металлографическим анализом вертикальных срезов слитков сплава.

Длительные релаксационные процессы после фазового перехода твердое тело – жидкость. Длительные релаксационные процессы обнаружены в расплавах на основе алюминия, легированных редкоземельными металлами, например [8]. Они проявляются в длительном немонотонном изменении значений вязкости в процессе изотермической выдержки и гистерезисе температурных зависимостей, полученных при нагреве и последующем охлаждении. Эти релаксационные процессы возникают только после фазового перехода кристалл-жидкость и обусловлены реализацией в расплаве сразу после плавления неравновесного микрогетерогенного состояния и его необратимым разрушением в процессе

Всероссийская конференция

температурно-временной обработки. Такое неравновесное микрогетерогенное состояние возникает вследствие наследования при плавлении неравновесных атомных микрогруппировок, упорядоченных по типу химических соединений Al_xR_y , присутствующих в твердых сплавах.

Переходы жидкость-жидкость. Переходы жидкость-жидкость (структурные превращения) в металлических расплавах является одним из наиболее дискуссионных вопросов природы жидкого состояния. Возможность таких переходов в металлических расплавах подтверждается структурными исследованиями и компьютерным моделированием структуры. На температурных зависимостях свойств, в том числе и вязкости, структурные превращения проявляются в виде особых точек: изломов или перегибов политерм, скачков значений и т.д. Опыт наших исследований показывает, что для интерпретации особых точек политерм вязкости изменением структуры расплава необходима тщательная постановка эксперимента с целью исключения других причин возникновения аномалий, описанных выше. В частности, излом политерм вязкости, обусловленный структурным превращением, обнаружен в жидком чистом алюминии и расплавах на его основе с небольшим содержанием никеля, кобальта и железа [7, 9].

- [1] Бельтюков А.Л., Ладьянов В.И. Автоматизированная установка для определения кинематической вязкости металлических расплавов // ПТЭ, 2008, №2. С. 155.
- [2] 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.
- [3] Бельтюков А.Л., Гончаров О.Ю., Ладьянов В.И. Особенности политерм вязкости расплавов Fe-V // ЖФХ, 2017, Т. 91 (10), С. 1706.
- [4] Бельтюков А.Л., Олянина Н.В., Ладьянов В.И. Особенности измерения вязкости металлических расплавов методом крутильных колебаний // Расплавы, 2016, №2, С. 176.
- [5] Nunes V.M.B., Lourenço M.J.V., Nieto de Castro C.A. Correct Use of Oscillating-Cup Viscometers for High-Temperature Absolute Measurements of Newtonian Melts // Int J Thermophys, 2024, V. 45, P. 64.
- [6] Sato Yu., Sugisawa K., Aoki D., Yamamura T. Viscosity of Fe-Ni, Fe-Co and Ni-Co binary melts // Measurement Science and Technology, 2005, V. 16, P. 363.
- [7] Bel'tyukov A.L., Menshikova S.G., Lad'yanov V.I. The viscosity of binary Al-Fe melts in the Al-rich area // J. of Non-Crystalline Solids, 2015, V. 410, P. 1.
- [8] Beltyukov A.L., Menshikova S.G. Lad'yanov V.I. Role of rare-earth metals (R) in the appearance of relaxation processes in AL-Ni-R metal melts // J. Phys.: Condens. Matter, 2023, V.35, P. 314001/
- [9] Beltyukov A., Ladyanov V., Sterkhova I. Effect of small nickel additions on viscosity of liquid aluminum // J. of Molecular Liquids, 2019, V.296, P. 111764.

Изменение механизма затвердевания заэвтектических сплавов Al-Si при увеличении скорости охлаждения расплава

О. В. Гусакова¹, В. Г. Шепелевич²

¹Учреждение образования «Международный государственный экологический институт имени А.Д.Сахарова» Белорусского государственного университета, ул. Долгобродская, 23, 220070, г. Минск, Беларусь

²Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030, г. Минск, Беларусь

Сплавы Al-Si хорошо известны как высокопрочные и легкие материалы, обладающие высокой коррозионной стойкостью, низким температурным коэффициентом линейного расширения. Поэтому они широко используются в автомобиле-, авиа- и ракетостроении для изготовления узлов различного назначения [1]. Особый интерес представляют заэвтектические сплавы с содержанием кремния выше 13 масс. %, поскольку более высокая объемная доля кремния обеспечивает улучшение механических свойств [2].

В работе представлены результаты исследования микроструктуры, распределения компонент, зеренной структуры и механических свойств заэвтектического сплава состава Al-21Si-0,8Mg-0,3Mn-0,2Fe-0,8Ni-1,5Cu (концентрация в масс. %) (далее Al-Si-M), в зависимости от скорости охлаждения расплава. Сплавы синтезированы при скоростях охлаждения расплава V_t от 10^2 до 10^7 К/с. Скорость охлаждения расплава 10^2 К/с достигается при остывании тонкого слоя расплава (2x3x15 мм) в графитовой изложнице на воздухе (массивный образец). Скорость охлаждения расплава $10^5 - 10^7$ К/с обеспечивается при получении фольги методом сверхбыстрой закалки из расплава [3-4].

На рисунке 1 представлены СЭМ изображения микроструктуры массивного образца (а) и фольги (б и в). Установлено, что в основном объеме фольги сплава Al-Si-M (слой В), при скорости охлаждения расплава 10^5 К/с, наблюдается уменьшение структурных составляющих на два порядка: размер включений первичного кремния не превышает 2 мкм, включения эвтектического Si принимают глобулярную форму с размером до 200-300 нм.

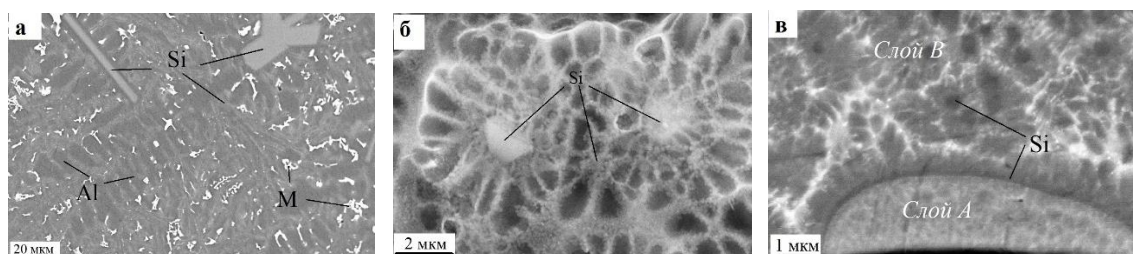


Рисунок 1 СЭМ изображения микроструктуры сплава Al-Si-M:
а - $V_t = 10^2$ К/с, б - 10^5 К/с, в - 10^5 К/с (слой А).

Предложен механизм модификации микроструктуры эвтектического кремния в заэвтектическом силумине, учитывающий уменьшение скорости затвердевания

Всероссийская конференция

эвтектического кремния за счет снижения его концентрации в расплаве и гетерогенное образование кластеров интерметаллических соединений легирующих элементов на растущей поверхности Si, что приводит к снижению скорости, изменению направления и прекращению роста включений кремния.

В слое фольги прилегающем к кристаллизатору (слой А на рис.1в) при скорости охлаждения расплава 10^7 К/с формируется микроструктура с однородным распределением компонент, что обеспечивается химически безразделительной кристаллизацией с образованием твердого раствора α -Al. Обнаружена ограниченная растворимость кремния в слое А, приводящая к его оттеснению к внутренней поверхности слоя А и образованию выделений Si на границе слоев А и В. На основе сравнения результатов исследования микроструктуры заэвтектических и эвтектических силуминов [5] проведена оценка скорости движения границы раздела фаз твердое тело-расплав при высокоскоростном затвердевании. Проведен расчет неравновесного коэффициента растворимости при высокоскоростном затвердевании с учетом зависимости объемной и поверхностной скорости диффузии кремния в расплаве Al-Si от концентрации Si. Показано удовлетворительное соотношение экспериментальных и расчетных значений.

Методом дифракции отраженных электронов изучена зеренная структура фазы алюминия в слоях фольги. Показано, что средний размер зерен в слоях составляет 3,5 мкм и 4,6 мкм. Однако в слое фольги, прилегающем к кристаллизатору распределение зерен по размерным группам бимодальное. Дано объяснение формированию участков с крупными (> 10 мкм) и мелкими (< 5 мкм) зернами. Впервые установлено, что в слое фольги, прилегающем к кристаллизатору, наблюдается деформация крупных зерен, обусловленная растягивающим напряжением, вызванным движением верхних слоев расплава. Для описания процесса вращения кристаллической решетки зерна использована модель Тейлора.

- [1] Haizhi Y. An Overview of the Development of Al-Si-Alloy Based Material for Engine Applications // Journal of Materials Engineering and Performance, 2003. Vol. 12(3). P. 288–297.
- [2] Стеценко В.Ю., Радько С.Л., Харьков С.А., Джонг Хун Ли, Ки ЙонгЧой Повышение эффективности охлаждения отливок из силуминов при литье закалочным затвердеванием // Литье и металлургия, 2006. № 2-1. С. 127-128.
- [3] Калиниченко А.С., Кривошеев Ю.К. Определение глубины переохлаждения расплава и характера структурообразования при закалке из жидкого состояния // Литье и металлургия, 2001. №3. С. 60–65.
- [4] Wang W., Qiu H.-H. Interfacial thermal conductance in rapid contact solidification process // International Journal of Heat and Mass Transfer, 2002. Vol. 45. P. 2043–2053.
- [5] Gusakova O. Chemically partitionless crystallization in near-eutectic rapidly solidified Al-12, 6Si-0, 8Mg-0, 4Mn-0, 7Fe-0, 9Ni-1, 8Cu alloy // Eur. Phys. J. Spec. Top, 2023. Vol. 232(8). P. 1281–1291.

Особенности формирования микроструктуры и коррозионного поведения никелевого сплава изготовленного методом ЭЛАП

Е. А. Бельтюков¹, А. Ю. Жилияков¹, Д. В. Пырин¹, Р. Р. Алимгулов¹

¹Уральский федеральный университет им. первого Президента России Б.Н. Ельцина, 620002 Россия, г. Екатеринбург, ул. Мира 19.

В работе приведен обзор влияния технологии изготовления и термической обработки на формирование микроструктуры никель-хром-молибденового сплава (23...24 Cr; 10...15 Mo; 61...64 Ni) [1], а также особенности коррозионного поведения в расплаве солей.

Представленный сплав изготавливался по двум технологиям: произведенный по традиционной технологии (горячекатанный лист) и полученный электронно-лучевым аддитивным производством (ЭЛАП). Последний исследовался в двух состояниях: в исходном и после закалки в воду с 1120 °С. Коррозионные испытания проводились в расплаве солей LiCl-KCl при 650 °С в течение 30 часов. В качестве исходных соединений использовались хлорид лития (А.С.С., безводный, 99%+, Aldrich) и хлорид калия (ОСЧ 5-4, ТУ 6-09-3678-74). Микроструктуры образцов сплава представлены на рисунке 1.

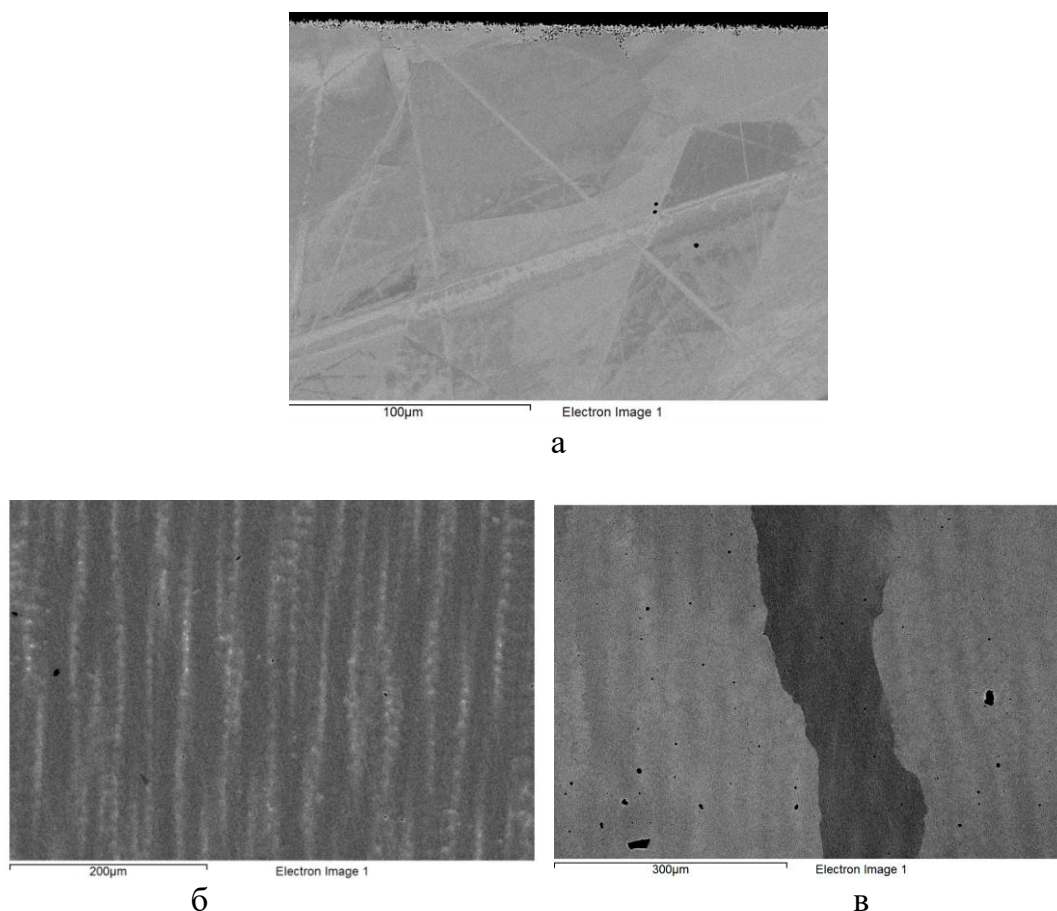


Рисунок 1. Микроструктуры исследуемого сплава

На микроструктурах образцов, изготовленных по методу ЭЛАП видно, что в исходном состоянии наблюдается сильная ликвация по Cr и Mo, в результате чего в междендритном пространстве выделяются вторичные фазы. После закалки же частиц вторичных фаз не обнаружено, а сама структура стала более однородной.

После проведения коррозионных испытаний на всех трех образцах наблюдаются следы протекания как общей «губчатой» коррозии, так и зачатки межкристаллитной коррозии. При этом по микроструктурам, представленным на рисунке 2 и 3 видно, что коррозия протекает не равномерно, быстрее по границам и медленнее по телу зерна, а в первую очередь в солевой раствор уходит Cr, это наблюдается по данным, представленным в таблице 1, что также согласуется с данными [2] и [3].

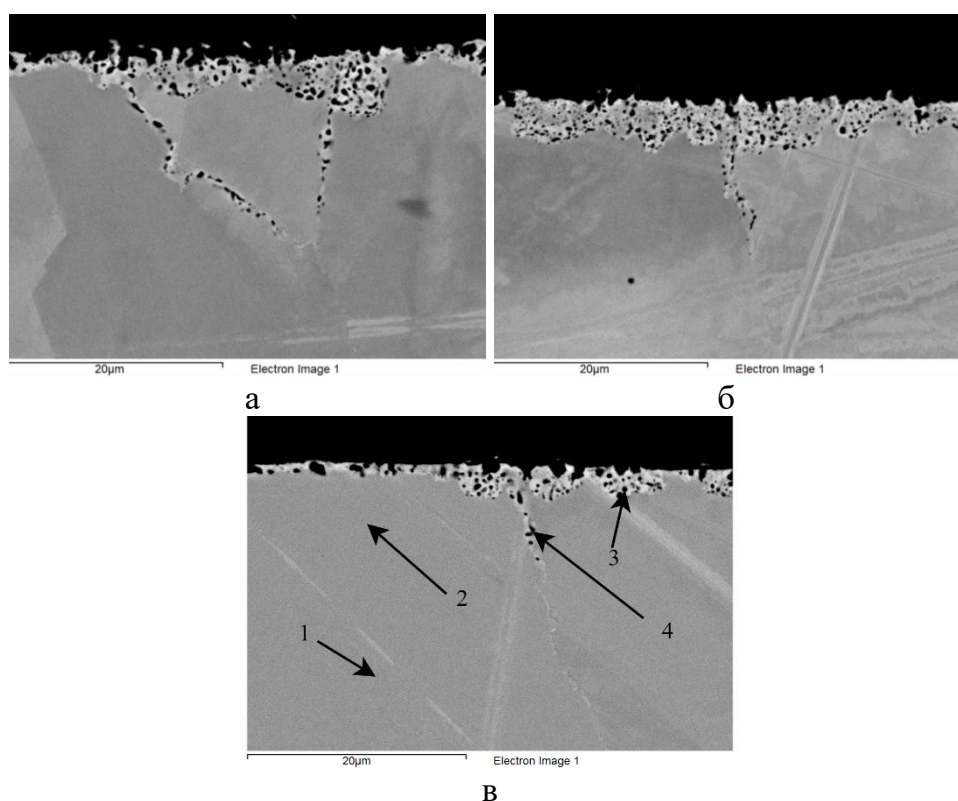


Рисунок 2. Микроструктуры исследуемого сплава после коррозионных испытаний в расплаве солей LiCl-KCl.

Таблица 1 – Результаты микрорентгеноспектрального анализа.

№ точки	Cr	Fe	Ni	Mo
1	23,29	0,72	63,17	12,82
2	23,40	0,54	62,47	13,58
3	19,50	0,66	55,87	23,97
4	14,81	0,74	61,33	23,12

После расчета общей скорости коррозии для каждого образца имеем следующие данные: скорость коррозии образца горячекатаного листа, составляет

Всероссийская конференция

229 мкм/год; изготовленного методом ЭЛАП, в исходном состоянии, равна 132 мкм/год; а изготовленного методом ЭЛАП с последующей закалкой равна 155 мкм/год. При этом разницу в скорости коррозии между образцом, изготовленным по традиционной технологии мы предположительно связываем с большим количеством границ зерен, которые выходят на поверхность раздела образец-коррозионная среда. Границы имеют большую диффузионную подвижность атомов и как следствие обладают повышенной реакционной способностью, становясь при этом первыми очагами коррозии, что согласуется с данными [3...5].

В случае же образцов, изготовленных по методу ЭЛАП, в обоих случаях микроструктура представлена в виде аксиальной текстуры с отклонением от оси текстуры $\langle 100 \rangle$ на углы, соответствующие отклонению ориентировки зерен аддитивной заготовки от направления аддитивного роста. Разница в скорости коррозии после проведения термообработки предположительно связана с отсутствием существенной ликвации, которая присуща образцу в исходном состоянии, так как частицы, выделившиеся в междендритном пространстве, выступали своего рода протекторами развития коррозионного разрушения [6].

- [1] Гамбург, А.С. Исследование нового никелевого сплава ХН62М на стойкость к межкристаллитной коррозии. Екатеринбург. 2018 г. 364...366 с.
- [2] Кочергин В.П. Высокотемпературная коррозия переходных металлов в ионных расплавах / В.П. Кочергин // Соровский образовательный журнал. 1997. № 8. С. 60-65.
- [3] Мальцева Г.Н. Коррозия и защита оборудования от коррозии: учеб. пос. / Г.Н. Мальцева. Пенза: Изд-во Пенз. гос. университета. 2000. 211 с.
- [4] Новиков И. И. Теория термической обработки металлов: учебник / И. И. Новиков. М.: Металлургия, 1986. 392 с.
- [5] Химмушин Ф.Ф. Нержавеющие стали: учебник / Ф.Ф. Химмушин. М.: Металлургия, 1967, 798 с.
- [6] Zhilyakov, A.Y., Belikov, S.V., Abramov, A.V. et al. Reserves of Elevation of Strength and Corrosion Resistance of Commercial Ni – Cr – Mo Alloys in High-Temperature Ionic Liquids Due to Creation of Austenitic-Intermetallic Structure. *Met Sci Heat Treat* 61,2020, 798–803.

Селективное лазерное плавление тонкостенных сетчатых конструкций

П.Н. Килина¹, А.А. Дроздов¹

¹Пермский национальный исследовательский политехнический университет, 614990 Россия, г. Пермь, Комсомольский проспект, д.29

В работе рассматривается исследование режимов 3Д-печати сетчатых конструкций на основе порошка CoCr [1-4]. Сплавление осуществлялось на установке Realizer SLM 50, которая оснащена иттербиевым волоконным лазером с диаметром пятна 40 мкм, что позволяет получать изделия с высокой точностью. Процесс лазерного синтеза проводился в камере, заполненной аргоном высокой чистоты. Исследование полученных образцов проводилось на микрофокусном томографе XT H 225 ST.

Для среднего размера частиц 26 мкм порошка расстояние между точками варьировалось в пределах 10–15 мкм [1]. По результатам комплексного исследования режимов печати порошком CoCr диапазон мощности составил 40–42.5 Вт, время экспозиции 40–60 мкс. С помощью томографических исследований выявлено, что выбранные режимы обеспечивают равномерное проплавление внутренней структуры, дефектов в виде несплавлений и трещин между сломи и в пределах каждого слоя не выявлено (рис. 1). Отмечаются отличия при формировании поверхностного слоя, зависящие от режимов сплавления [1-4].

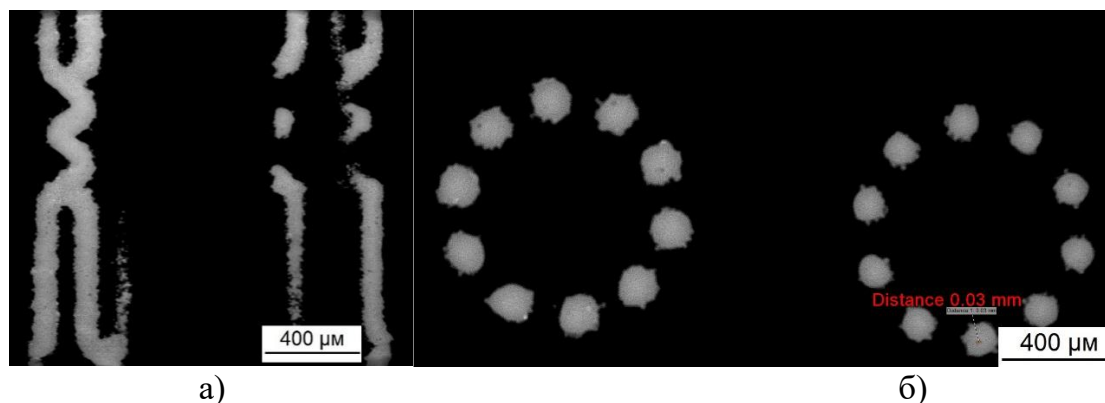


Рисунок 1.

Результаты томографического исследования конструкций в продольном (а) и поперечном (б) направлении.

При уменьшении мощности и времени экспозиции отклонения размеров от 3D модели снижаются, однако на перемычках наблюдаются частицы, сформированные по механизму твердофазного спекания, увеличивается шероховатость поверхности. Ширина перемычки находится в пределах 150 – 190 мкм, отклонения размеров от 3D модели составляют 0,01-0,04 мм. При увеличении мощности и времени экспозиции наблюдается увеличение ширины перемычки до 200-290 мкм и уменьшение шероховатости поверхности за счет более полного проплавления частиц. Отклонения размеров от 3D модели

Всероссийская конференция

составили 0,05-0,09 мм. Пористость в продольном и поперечном направлении при выбранном диапазоне режимов составляет <1%, размер пор не превышает размеров частиц.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 23-79-01284, <https://rscf.ru/project/23-79-01284/>.

- [1] Song C., Yang Y., Wang Y., Wang D., Yu J. Research on rapid manufacturing of CoCrMo alloy femoral component based on selective laser melting// *Int J Adv Manuf Technol*, 2014. Vol. 75. P. 445–453.
- [2] Ataei A., Li Y., Brandt M., Wen C. Ultrahigh-strength titanium gyroid scaffolds manufactured by selective laser melting (SLM) for bone implant applications// *Acta Mater*, 2018. Vol.158. P. 354–368.
- [3] Yuan L., Ding S., Wen C. Additive manufacturing technology for porous metal implant applications and triple minimal surface structures: A review// *Bioact Mater*, 2019. Vol. 4. P. 56–70.
- [4] Langi E., Zhao L.G., Jamshidi P., Attallah M.M., Silberschmidt V.V., Willcock H., et al. Microstructural and Mechanical Characterization of Thin-Walled Tube Manufactured with Selective Laser Melting for Stent Application// *J Mater Eng Perfor*, 2021. Vol. 30. P. 696–710.

Совершенствование технологии изготовления воздушных фурм доменных печей применяя CALPHAD методики

Бахтеев И.С.¹, Олейник К.И.^{1,2}, Литвинюк К.С.³, Валиев Р.М.¹, Фурман Е.Л.¹,

¹Уральский Федеральный Университет имени первого президента России Б.Н. Ельцина, ул. Мира 32, 620002, Екатеринбург, Россия

²Институт металлургии УрО РАН, ул. Амундсена 101, 620016, Екатеринбург, Россия

³Южно-Уральский государственный университет (национальный исследовательский университет), 454080, г. Челябинск, пр. Ленина, 76, Россия

При плавках в домнах многие элементы печи претерпевают значительные термические и физико-химические нагрузки [1]. Например, для медных водоохлаждаемых фурм наиболее частыми причинами выхода из строя являются выкрашивание, при подаче шихты в печь, и активное протекание коррозионных процессов при изготовлении сплавов. Для уменьшения скорости износа фурмы защищают с помощью нанесения покрытия.

Важную роль при подборе оптимальных режимов лазерной обработки играет наличие надёжных данных о плотности сплава покрытия при кристаллизации. Имея корректные значения плотности материалов, можно оценить жидко текучесть сплава, которая в значительной степени зависит от химического состава [2]. Особенно значимо это при создании покрытий между материалами с различными коэффициентами линейного расширения.

В данной работе при помощи расчётных методик CALPHAD в программном пакете ThermoCalc 2024a (от 20.12.2023), с номером версии программного обеспечения 2024.1.132110-55 исследовано изменение плотности системы Ni-B-Si после процесса лазерного оплавления.

Плотность системы Ni-B-Si с нагревом с 1 750 °С до 3 000 °С изменяется в небольших пределах линейно, а при охлаждении (рисунок 1) плотность состава, не содержащего меди, немного выше (7,8 г/см³ при 1 750 °С), чем для составов, содержащих Cu от 10 до 20 ат. % (7,5 г/см³ при 3 000 °С). Остальные составы изменяют плотность незначительно.

Из рисунка 1 видно, что плотность расплава изменяется в зависимости от количества меди, выделившейся в покрытие при оплавлении. При отсутствии меди (напыление Ni-B-Si без оплавления) в покрытии при температуре порядка 1750 °С происходит увеличение плотности с 7,8 г/см³ до 8,2 г/см³, что обусловлено началом выделения из жидкой фазы кристаллов твердого раствора. Также небольшое скачкообразное изменение плотности происходит при температуре порядка 1100 °С, связанное с появлением твердых кристаллов Ni₃B (M3B_D011) в жидкой фазе [3].

При добавлении меди в состав покрытия во всем температурном интервале изменение плотности происходит линейно, а незначительные скачкообразные изменения указывают на выделение твердых кристаллов и образование новых фаз из расплава, подробно представленных ранее на рисунке 2. Плотность всех содержащих медь систем при температуре 500 °С составляет порядка 8,26 г/см³,

что связано со значительным вкладом медно-никелевых соединений типа монель-металл (плотность 8,82 г/см³) [1].

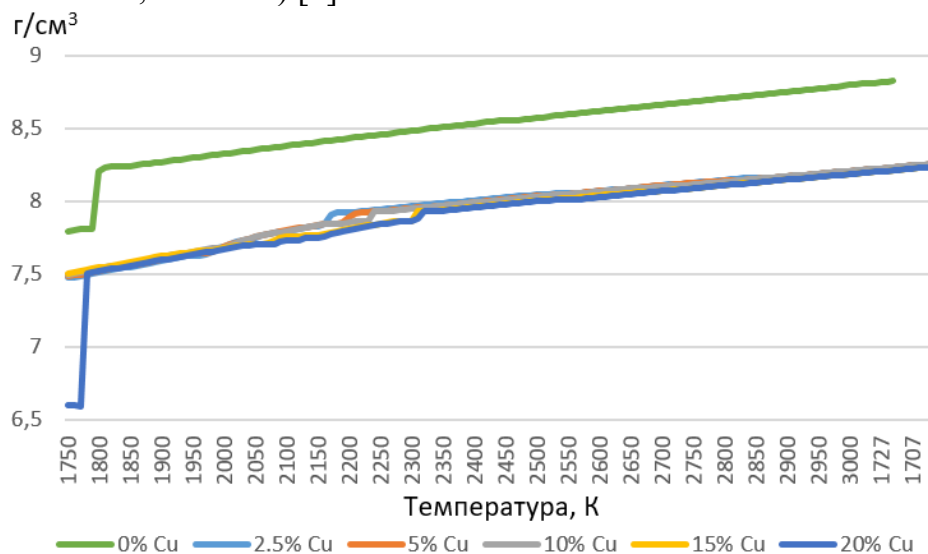


Рис. 1. Плотность сплавов систем: Ni_{81,97}-B_{6,93}-Si_{6,1}, Ni_{81,97}-Cu_{2,5}-B_{6,93}-Si_{6,1}, Ni_{81,9-7}Cu₅-B_{6,93}-Si_{6,1}, Ni_{76,97}-Cu₁₀-B_{6,93}-Si_{6,1}, Ni_{81,97}-Cu₁₅-B_{6,93}-Si_{6,1}, Ni_{81,97}-Cu₂₀-B_{6,93}-Si_{6,1}, при охлаждении

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Отработка режимов лазерного оплавления газо-термического покрытия / Бахтеев И. С., Олейник К. И., Шак А. В., Фурман Е. Л., Валиев Р. М., Вопнерук А. А. Расплавы, 2024, №4, с. 451–466. DOI: 10.31857/S0235010624040092
2. Богомягков А.В. Влияние химического состава на жидкотекучесть алюминиевой бронзы / Богомягков А.В. Пустовалов О.Д., Шумков А.А., Кайгородов А.К., Милованов Р.С. // Известия Самарского научного центра Российской Академии наук. –Т. 17. –№2 (4) –2015.
3. Подбор оптимального состава плазменного покрытия системы Ni-B-Si методом CALPHAD воздушных доменных фурм / Бахтеев И. С., Олейник К. И., Литвинюк К.С., Фурман Е. Л., Валиев Р. М., Расплавы, 2025, (в печати)

Подбор оптимального состава покрытия для модификации элементов верхнего строения пути после оплавления применяя CALPHAD методики

Киселев М.В.¹, Бахтеев И.С.¹, Олейник К.И.^{1,2}, Литвинюк К.С.³, Жилина Е.М.², Шанчуров С.М.¹, Гойда Э.Ю.²

¹Уральский Федеральный Университет имени первого президента России Б.Н. Ельцина, ул. Мира 32, 620002, Екатеринбург, Россия

²Институт металлургии УрО РАН, ул. Амундсена 101, 620016, Екатеринбург, Россия

³Южно-Уральский государственный университет (национальный исследовательский университет), 454080, г. Челябинск, пр. Ленина, 76, Россия

В связи с значительным спросом на железнодорожные перевозки в пределах предприятий (технические или подъездные пути), соединяющие станции (главный путь), перегоны (станционные пути) и т.д. появляется потребность в более мобильном и менее финансово затратном способе восстановления дорожного полотна или продлении его срока службы путём модификации поверхностных слоёв. Одним из наиболее уязвимых мест путевого хозяйства является активный износ крестовин, контррельс, рамных рельс и стрелочных остряков, что ведет к частым планово-предупредительным ремонтам (ППР), связанным с приостановкой всех логистических цепочек и выездом бригады в составе не менее 4 человек для замены изношенных элементов.

При помощи модификации элементов верхнего строения пути появится возможность сократить количество затрачиваемых человеческих ресурсов (увеличение интервала между ППР), и таким образом уменьшить длительность простоя железнодорожных путей при ремонте. Одним из наиболее распространенных и эффективных методов модификации поверхностных слоев деталей является нанесение защитного покрытия.

Основной сложностью модификации поверхности верхнего строения пути является то, что высокомарганцовистая сталь, применяемая для изготовления крестовин, подвержена выпадению карбидов марганца по границам зерен при некоторых перегревах. В связи с этим необходимо детальное и всестороннее исследование возможностей нанесения упрочненного слоя рельсового пути. Материалом покрытия выбран сплав 31Al - 19Ti - 2Zr - 28V - 20Nb % ат., наносимый на материал основу - сталь ГОСТ 7370-2015 п. 5.3.2.1 (крестовины железнодорожные), путём наплавки и последующего оплавления.

В данной работе, путем математического моделирования с применением CALPHAD методик (программный пакет ThermoCalc 2024a (от 20.12.2023), с номером версии программного обеспечения 2024.1.132110-55), исследован наиболее благоприятный состав с точки зрения образующихся при кристаллизации фаз (таблица 1).

Всероссийская конференция

Таблица 1 – Состав сплавов для моделирования

Элемент	Состав в ат.%								
Al	31,17	29,61	28,05	26,49	24,94	23,38	21,82	20,26	18,70
Ti	18,55	17,62	16,70	15,77	14,84	13,91	12,99	12,06	11,13
Zr	1,56	1,48	1,40	1,33	1,25	1,17	1,09	1,01	0,94
V	27,53	26,15	24,78	23,40	22,02	20,65	19,27	17,89	16,52
Nb	21,19	20,13	19,07	18,01	16,95	15,89	14,83	13,77	12,71
Fe	0	5,00	10,00	15,00	20,00	25,00	30,00	35,00	40,00

При воздействии лазерного излучения на покрытие происходит активное взаимодействие компонентов покрытия с железом с образованием сплошного покрытия, содержащего в себе новые фазы и химические элементы [1]. Используя данные, полученные математическим моделированием, методом Шейла определены скорости кристаллизации, а также фазы, образующиеся при охлаждении во всех составах при оплавлении. Определено, что благоприятным для формирования покрытия хорошего качества является наличие железа в покрытии в количестве от 10 ат.% до 20 ат.%. При этих концентрациях в пределах 1200-1100 °С отсутствуют фазы Лавеса и интерметаллические соединения, а элементы (порядка 95% сплава) образуют ОЦК решетку.

[1] Подбор оптимального состава плазменного покрытия системы Ni-B-Si методом CALPHAD воздушных доменных фурм / Бахтеев И. С., Олейник К. И., Литвинюк К.С., Фурман Е. Л., Валиев Р. М., Расплавы, 2025, №1 (в печати).

Эволюция состава прессовки Ti-CuO в условиях реакционного спекания

В. С. Сафронова^{1,2}, А. Г. Князева¹, Е. Н. Коростелева¹

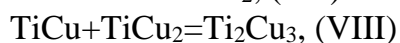
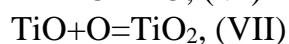
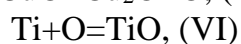
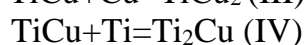
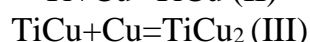
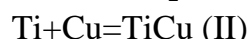
¹Институт физики прочности и материаловедения Сибирского отделения Российской академии наук, 634055 Россия, г. Томск, Академический проспект 8/2, кор. 4

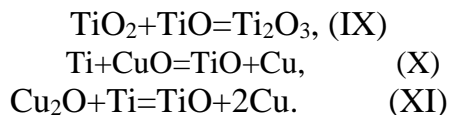
²Национальный исследовательский Томский политехнический университет, 634050 Россия, г. Томск, Тимакова, 12, кор. 16

Композиционные материалы с упрочняющими керамическими частицами все чаще используются в качестве материалов, обладающих высокой термостойкостью, прочностью и устойчивостью к коррозии. Они представляют собой материалы, содержащие равномерно распределенную матрицу, с дисперсными включениями упрочняющих частиц. Медные композиты, комбинированные с тугоплавкими материалами, сочетают ряд свойств, таких как твердость, пластичность, электропроводность, прочность и т.д., что эффективно в производстве электроники, автомобильных компонентов, электроинструментов и др., благодаря уникальным механическим свойствам. Известно, что титановые сплавы имеют хорошую биосовместимость, поэтому их часто используют в качестве протезов, а Ti₂Cu обладает антибактериальным эффектом.

В данной работе исследуется система Ti-CuO в виде порошковых прессовок, изначально подвергшемся механическому измельчению в шаровой мельнице, в результате чего порошки стали механоактивированы. После формования образцов под прессом, они помещались в вакуумную печь, в которой спекались при температурах 800, 900, 1200 С. В результате проведенного эксперимента обнаружен неоднородный фазовый состав, который исследовали с помощью рентгеновского дифрактометра XRD-6000 с CuK α -излучением и оптического микроскопа AXIOVERT-200MAT.

Важным аспектом при спекании порошков является выбор подходящих условий спекания, начального состава и методов обработки, в чем может помочь математическое моделирование. Математическая модель включала уравнение баланса тепла, описывающее поведение кривых температур образца, а также рассматривается влияние возможных сопутствующих процессов, а именно: изменение теплоемкости, возникновение доли жидкой фазы, кинетика химических реакций. Помимо окислительно-восстановительных реакций, в системе Ti-Cu также возможно образование интерметаллидов: TiCu, Ti₂Cu, TiCu₂ и Ti₂Cu₃. Для описания кинетики были выбраны следующие реакции:





Параметры, необходимые для расчета найдены в литературе, либо рассчитывались на основе теоретических и полуэмпирических методов, обоснованные в [1]. Выбранные химические реакции достаточно хорошо описывают путь фазообразования при данных условиях и основаны на результатах реального эксперимента.

Сформулирована модель спекания, которая включала уравнение баланса тепла и систему кинетических уравнений, соответствующих предложенной схеме реакций. Образец нагревался тепловым излучением от нагревателя, температура которого изменялась. Управление процессом осуществлялось в две стадии – нагрева с заданной скоростью до заданной фиксированной температуры, и выдержки при этой температуре заданное время.

Задача решалась численно, при этом проверялось выполнение закона сохранения массы и закона сохранения атомов. В результате вычислительная ошибка оказалась менее 1%, что является приемлемым результатом при таком количестве реакций.

Расчеты дают разный состав продукта для разного состава исходной прессовки и разных условий нагрева. Пример эволюции состава показан на рис.1

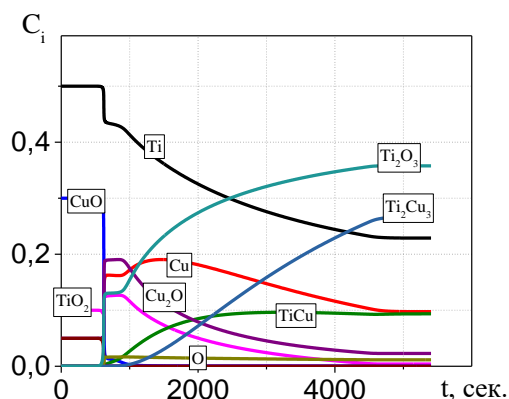


Рисунок 1

Эволюция состава при температуре спекания 900 С, при начальном составе: $C_{\text{Ti}} = 0.5$; $C_{\text{CuO}} = 0.3$; $C_{\text{TiO}_2} = 0.1$; $C_{\text{Cu}_2\text{O}} = 0.05$; $C_{\text{TiO}} = 0.05$.

Результаты удовлетворительно согласуются с экспериментальными данными.

Работа выполнена в рамках государственного задания ИФПМ СО РАН, тема номер FWRW-2022-0003

[1] Safronova V. S., Knyazeva A. G., Korosteleva E. N. -.A theoretical and experimental study of phase formation in Ti–CuO powder mixtures under reactive sintering conditions // New Journal of Chemistry. - 2025 - Т. 49 - №3. P. 893-909. doi: 10.1039/d4nj03751k.

Основы и особенности кристаллографического строения разнородных сварных соединений сталей аустенитного и перлитного класса.

Ходаков Д.В., к.т.н., Феклистов С.И., д.т.н., Потапов Н.Н., д.т.н.,
Ходаков В.Д., к.т.н.

Акционерное общество «Научно-производственное объединение «Центральный научно-исследовательский институт технологии машиностроения» (АО «НПО «ЦНИИТМАШ»), 115088 Москва, ул. Шарикоподшипниковская, д. 4, к. 1А

Оборудование атомных электростанций, исходя из условий эксплуатации, изготавливается из сталей различного класса, поэтому при производстве атомноэнергетического оборудования неизбежно возникает необходимость выполнять разнородные сварные соединения и, прежде всего, сварку деталей из сталей перлитного и аустенитного класса. При этом в результате сплавления при сварке неизбежно возникает зона структурной неоднородности, которая в конечном итоге определяет работоспособность разнородных сварных соединений (РСС) [1].

Выяснение природы и механизма образования в зоне сплавления разнородных сталей структурной неоднородности, возможность появления которой обуславливает основную трудность их сварки, необходимо начинать с процесса кристаллизации металла шва в этой зоне с учетом тех особенностей, которые вызываются сплавлением металлов, обладающих различными физико-химическими свойствами.

Затвердевание металла сварочной ванны, с точки зрения общих положений физического металловедения, можно отнести к процессу кристаллизации на анизотропной подкладке, нагретой до оплавления. В силу этого зародышами кристаллов являются частично оплавленные зерна перлитного свариваемого металла. При дальнейшем охлаждении происходит рост таких зародышей, путем последовательного послойного присоединения по их кристаллическим плоскостям молекул, атомов кристаллизующего аустенитного металла [2,3,4].

В результате между свариваемыми перлитным «основным» и аустенитным металлом шва образуются общие зерна и формируется сварной шов между перлитным основным металлом и аустенитным металлом шва.

Определение природы и механизма образования РСС невозможно без рассмотрения кристаллического строения металла, которое имеет строгое расположение атомов-ионов в виде так называемой пространственной кристаллической прослойки.

Для металлов, участвующих в образовании РСС при сварке между собой перлитных и аустенитных сталей, наиболее характерны два типа шва кристаллической решетки: кубическая объемно-центрированная (Cr, Mo, Fe – α) и кубическая гранецентрированная (Ni, Mn, Fe- γ). У железа наблюдается полиморфизм, т.е. изменение типа кристаллической решетки с изменением температуры ($\alpha \leftrightarrow \gamma$), поэтому у железа имеются две основные полиморфные формы: кубическая объемно-центрированная (Fe – α) и кубическая-гранецентрированная (Fe- γ).

Всероссийская конференция

Выводы:

1. Затвердевание металла сварочной ванны, с точки зрения общих положений физического металловедения, можно отнести к процессу кристаллизации на анизотропной подкладке, нагретой до оплавления. В силу этого зародышами кристаллов являются частично оплавленные зерна перлитного свариваемого металла. При дальнейшем охлаждении происходит рост таких зародышей, путем последовательного послойного присоединения по их кристаллическим плоскостям молекул, атомов кристаллизующего аустенитного металла [1-4].

2. Выяснение природы и механизма образования в зоне сплавления разнородных сталей структурной неоднородности, возможность появления которой обуславливает основную трудность их сварки, необходимо начинать с процесса кристаллизации металла шва в этой зоне с учетом тех особенностей, которые вызываются сплавлением металлов, обладающих различными физико-химическими свойствами.

3. Определение природы и механизма образования РСС невозможно без рассмотрения кристаллического строения металла, которое имеет строгое расположение атомов – ионов в виде так называемой пространственной кристаллической решётки. Для металлов, участвующих в образовании РСС при сварке перлитных и аустенитных сталей характерны два типа кристаллической решётки: кубическая объёмно-центрированная (Cr, Mo, Fe- α) и кубическая гранецентрированная (Ni, Mn, Fe- γ). У железа наблюдается полиморфизм, т.е. изменение типа кристаллической решётки с изменением температуры ($\alpha \leftrightarrow \gamma$), поэтому у железа имеются две основные полиморфные формы: кубическая объёмно-центрированная (Fe- α) и кубическая гранецентрированная (Fe- γ).

4. Теоретически задача получения качественного соединения между различными материалами легко решается в том случае, если атомы соединяемых металлов будут сближены на расстояние, требуемое для межатомного взаимодействия. В результате между свариваемым металлом и металлом шва создается межатомное сцепление, которое, в свою очередь, создает сварное соединение, в зоне сплавления которого образуются указанные общие зерна для перлитного и аустенитного металла. [5]

Кристаллическую решётку, помимо её типа, характеризует атомный диаметр (расстояние между центрами двух ближайших атомов) и параметр решётки (размер рёбер элементарной кристаллической решётки). Кроме того, кристаллическая решётка характеризуется координатным числом, плотностью упаковки (степенью заполнения) и индексами атомных плоскостей. Координатное число характеризует условия взаимодействия атомов и принцип построения решётки. Для кубической объёмно-центрированной $K=8$, для кубической гранецентрированной $K=12$.

5. Плотность заполнения атомами у кристаллических решёток в различных направлениях различная. Для того, чтобы определить и чётко обозначить это различие в плотности заполнения атомами по разным направлениям введено понятие о кристаллографических плоскостях кристаллических решёток. В зависимости от положения в пространстве, таких плоскостей у кристаллической решётки может быть несколько, при этом должна учитываться такая важная характеристика атомных кристаллических плоскостей, как густота заполнения её

Всероссийская конференция

атомами, определяющая прочность связи образуемого зерна (рис. 3). Различная плотность атомов на разных плоскостях определяет различие по разным направлениям свойств ячейки и комплекса ячеек, а такое различие свойств по разным направлениям называют анизотропией [6]. Выше рассмотренные характеристики кристаллических решёток имеют важное значение для оценки свариваемости двух разнородных металлов (РСС) и позволяют определить пары, которые свариваются между собой легче или труднее.

Список литературы:

- [1]. Земзин В. Н. Сварные соединения разнородных сталей. Л-д. «Машиностроение» 1966.
- [2]. Шубин В.Ф. «Сварка разнородных сварных соединений». Сварка в машиностроении: Справочник в 4-х т. Под ред. А.И. Акулова, т.1, М., Машиностроение, 1978, 504 с.
- [3]. Бельчук Г.А., Земзин В.Н. «Сварка разнородных сварных соединений». Сварка в машиностроении: Справочник в 4-х т. Под ред. А.И. Акулова, т.2, М., Машиностроение, 1978, 462 с.
- [4]. Гатальский Ю.Н. «Сварка разнородных сварных соединений» Киев: Техника, 1981 – 184 с. Ходаков В.Д., Зубченко А.С.
- [5]. Лившиц Л.С. «Металловедение для сварщиков», Москва, «Машиностроение», 1979 г.
- [6]. Гуляев А.П. «Металловедение», Москва, «Металлургия», 1977 г.

Термодинамическое моделирование химических реакций при формировании покрытий методом лазерной наплавки

М. Д. Кривилев, Е. В. Коробейникова, С. М. Решетников, Е. В. Харанжевский

Удмуртский государственный университет, 426034 Россия, г. Ижевск, ул. Университетская, 1

Метод лазерной наплавки широко применяется в промышленности как способ восстановления геометрии деталей в результате износа, а также как метод нанесения покрытий различного функционального назначения. При наплавке обеспечиваются высокие температуры, которые способствуют сплавлению частиц подаваемого материала с поверхностью и между собой. Это открывает возможность создания сложных металлокерамических покрытий с высокой адгезией наплавляемого слоя к основному материалу.

В работе анализируется процесс лазерной наплавки смеси порошков W_4C+VN с добавками MgO and Li_2O на стальную подложку, что приводит к образованию сверхтвердого покрытия со сверхнизким коэффициентом трения [1, 2]. Изучается состав формируемого покрытия в условиях высокоэффективного лазерного нагрева, когда плавление сопряжено с окислительно-восстановительными реакциями [3].

Исследуется взаимное влияние режимов обработки, кристаллизации и аморфизации, химических реакций и итоговой микроструктуры для объяснения наблюдаемых триботехнических свойств. Методами химической термодинамики выявлены предпочтительные химические реакции, объяснены механизмы формирования микроструктуры в термодинамически высоконервновесных условиях.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РНФ № 19-79-20012.

- [1] E.V. Kharanzhevskiy, A.G. Ipatov, M.D. Krivilyov, A.V. Makarov, F.Z. Gil'mutdinov, and E.G. Volkova: Surf. Coat. Tech., 2020, vol. 390, p. 125664. <https://doi.org/10.1016/j.surfcoat.2020.125664>.
- [2] E.V. Kharanzhevskiy, A.G. Ipatov, A.V. Makarov, F.Z. Gil'mutdinov, N.N. Soboleva, and M.D. Krivilyov: Wear, 2021, vol. 477, p. 203835. <https://doi.org/10.1016/j.wear.2021.203835>.
- [3] M. Krivilyov, E. Kharanzhevskiy, S. Reshetnikov, L.J. Beyers: Metall. Mater. Trans. B, 2016, vol. 47 (3), pp. 1573–1582. <https://doi.org/10.1007/s11663-016-0616-y>.

Комплексное изучение статических механических свойств нержавеющей стали 316Lsi, полученной методом проволочно-дуговой наплавки

А. В. Ильиных¹, А.М. Паньков¹

¹Пермский национальный исследовательский политехнический университет, 614990, Россия, г. Пермь, Комсомольский пр., 29

В работе обсуждаются результаты различных статических механических испытаний нержавеющей стали 316Lsi, полученной по технологии аддитивного производства проволочно-дуговой наплавки[1]. Проводилось три вида испытаний: растяжение, кручение и сдвиг[2]. Образцы для проведения испытаний из пластины (рис. 1б) толщиной 10 мм вырезались в двух направлениях, вдоль и поперек направления наплавки. Схема вырезки представлена на рисунке 1а.

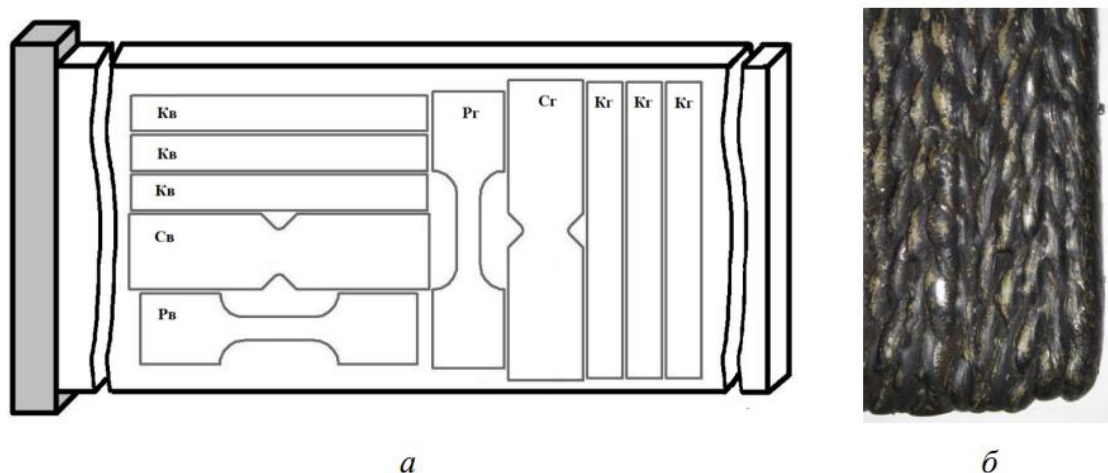


Рисунок 1. Схема вырезки образцов из наплавленной пластины (а) и фотография наплавленного фрагмента пластины (б): К, С и Р – образцы для испытания на кручение, сдвиг и растяжение соответственно; индексы «в» и «г» обозначают вертикальную и горизонтальную ориентацию образцов по отношению к направлению выращивания пластины

Все экспериментальные исследования проводились в Центре экспериментальной механики ПНИПУ. Испытания вырезанных из пластины образцов на квазистатическое одноосное растяжение, сдвиг и кручение выполнялись на универсальных испытательных системах Instron 5882 и Instron E10000. Во время испытания на растяжение продольные деформации измерялись с помощью навесного экстензометра Instron 2620-601 с максимальной измеряемой продольной деформацией 40%. Для измерения деформаций на поверхности образцов на сдвиг и кручение использовался метод корреляции цифровых изображений[3], полученных с оптической системы Vic 3D(Рис. 2а). Испытания на сдвиг проводились в специальной оснастке(Рис. 2б) по ASTM D5379.

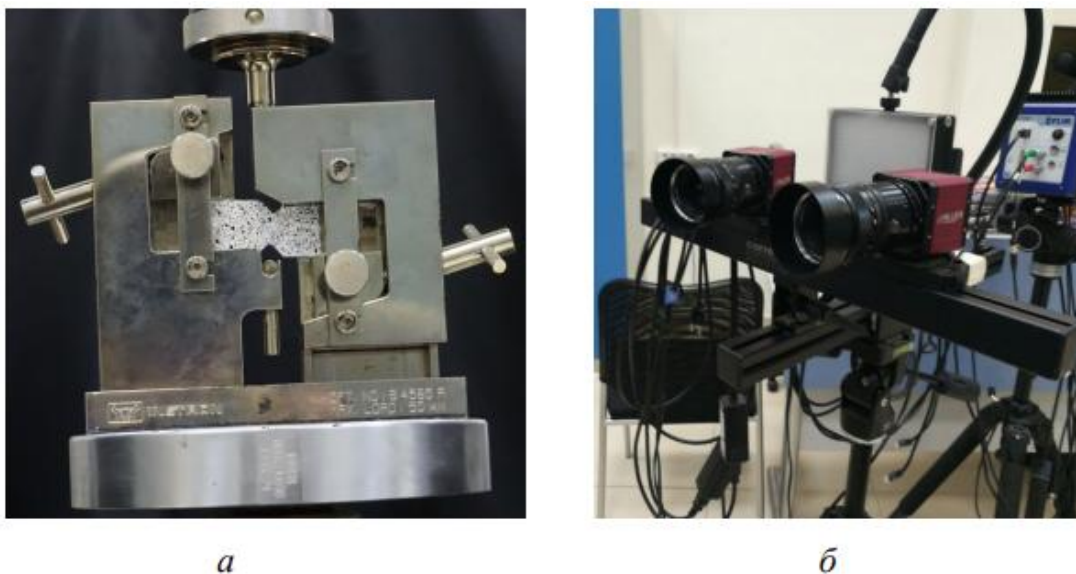


Рис. 2 Внешний вид оснастки для испытаний на сдвиг с покрашенным образцом (а) и фотография цифровых камер оптической системы Vic 3D (б)

По результатам испытаний проведено сравнение анизотропии[4] упругих, пластической и прочностных механических свойств при растяжении, кручении и сдвиге. Так же в дополнение к этому была проведена оценка коэффициента Пуассона для пластинок в плоскости наплавки и в плоскости вдоль наплавки, но перпендикулярно к плоскости наплавляемой пластины.

Работа выполнена при финансовой поддержке РЦНИ и Пермского края (проект № 20-48-596007-р_НОЦ_Пермский край).

- [1] Formation of Structure and Properties of Two-Phase Ti-6Al-4V Alloy during Cold Metal Transfer Additive Deposition with Interpass Forging / Y. Shchitsyn, M. Kartashev, E. Krivonosova, T. Olshanskaya, D. Trushnikov // Materials. – 2021 – Vol. 14, Iss. 16, August (II). – Art. 4415. – 18 p. – URL: www.mdpi.com/1996-1944/14/16/4415. - DOI 10.3390/ma14164415.
- [2] Экспериментальное исследование механических свойств при сдвиге и кручении нержавеющей стали 316LSI, полученной методом дуговой наплавки / А. В. Ильиных, А. М. Паньков, Е. М. Струнгарь, Г. Л. Пермьяков // Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Аэрокосмическая техника. – 2023. – № 74. – С. 96-106. – DOI 10.15593/2224-9982/2023.74.09.
- [3] Deformation and failure of carbon fiber composite specimens with embedded defects during tension-torsion test / V.E. Wildemann, T.V. Tretyakova, E.M. Strungar, M.P. Tretyakov // Frattura ed Integrita Strutturale. –2018. – Ass. 12. – Vol 46. – P. 295–305.
- [4] Dirk Herzog, Additive manufacturing of metals / Vanessa Seyda, Eric Wycisk, Claus Emmelmann // Acta Materialia 117 (2016) 371–392.

Моделирование динамической рекристаллизации: анализ эксплуатационных свойств функциональных материалов-изделий

А.Н. Подседерцев¹, Н.С. Кондратьев¹, М.Н. Балдин¹, Д.С. Безверхий¹

¹ Пермский национальный исследовательский политехнический университет, 614990, Россия, г. Пермь, Комсомольский проспект, д. 29

В условиях постоянного роста требований к прочности, надежности и долговечности металлических изделий разработка функциональных материалов-изделий становится стратегической задачей современной металлургии и машиностроения. Современные технологии термомеханической обработки позволяют формировать специфическую внутреннюю структуру материала, адаптированную к требуемым условиям эксплуатации. В этом контексте актуальным представляется не только создание новых функциональных материалов, но и совершенствование математических моделей, способных описывать эволюцию микроструктуры при термомеханической обработке [1]. Использование таких моделей открывает перспективы совершенствования технологических процессов для решения актуальной проблемы – целенаправленного управления характеристиками материала для получения в процессе обработки заготовок конструкций и изделий с оптимальными механическими свойствами [2].

Известно, что изменения зеренной структуры и кристаллографической текстуры, возникающие в процессе термомеханической обработки, существенно влияют на предел текучести, прочности и другие макросвойства изделия. Динамическая рекристаллизация, реализующаяся при термомеханических воздействиях, характеризуется образованием малодефектных зародышей, и служит основным механизмом для формирования новой зеренной структуры [3]. В этом процессе новые зерна, образующиеся по границам исходной матрицы, активно поглощают дефектные участки, что способствует улучшению однородности структуры.

Ранее разработанная расширенная статистическая модель обеспечивает воспроизведение полиэдрических форм и ориентаций зерен [5]. Для детального анализа эксплуатационных свойств функциональных материалов с различной микроструктурой используется специализированный программный пакет *Nepes*, который позволяет генерировать полиэдрическую геометрию зеренной структуры по статистическим законам [4]. В дальнейшем каждому зерну присваиваются свойства монокристалла, что позволяет с высокой точностью учитывать индивидуальные механические и кристаллографические характеристики.

После формирования зеренной структуры, полученные кристаллиты разбиваются на конечные элементы и передаются в вычислительный комплекс *Abaqus*. Далее решается краевая задача для представительного объема поликристалла с учетом эксплуатационных нагрузок, с использованием классической прямой физически ориентированной математической модели неупругого деформирования [1, 6]. Такой подход позволяет детально исследовать

Всероссийская конференция

напряженно-деформированное состояние материала при различных условиях нагружения, учесть влияние локальных взаимодействий между зернами.

Особое внимание в настоящем исследовании уделено анализу анизотропии свойств материала, обусловленной различными формой и кристаллографической ориентацией зерен. Применение указанного подхода позволяет выявить, как разная структурная организация рекристаллизованных зерен влияет на предел текучести, прочности и другие макрохарактеристики образца. Различия в локальном отклике материала приводят к тому, что при заданных эксплуатационных нагрузках наблюдаются значительные вариации в распределении напряжений и деформаций. Это, в свою очередь, оказывает существенное влияние на эксплуатационную надежность изделий, позволяя на основе результатов моделирования оптимизировать технологические режимы термомеханической обработки для достижения требуемых эксплуатационных характеристик.

Разработка и внедрение методов моделирования, объединяющих описание эволюции зеренной структуры с использованием расширенной статистической модели, включая генерацию зеренной структуры с помощью *Perer* и детальный анализ в *Abaqus*, открывают широкие возможности для дальнейшего изучения механизмов динамической рекристаллизации и анизотропии свойств изделий с различной внутренней структурой. Комплексный подход позволяет не только исследовать закономерности формирования микроструктуры, но и целенаправленно управлять процессами горячей неупругой деформации для достижения необходимых физико-механических свойств макрообразца, что особенно актуально для проектирования функциональных материалов, способных удовлетворить современные требования к прочности и надежности.

Таким образом, предлагаемая многоуровневая модель для анализа анизотропных механических свойств металлов и сплавов обладает потенциалом практического применения для оптимизации технологических процессов термомеханической обработки. Результаты исследования открывают перспективы для разработки новых функциональных материалов с заданными эксплуатационными характеристиками и способствуют совершенствованию современных методов численного анализа в металлургии и машиностроении. Кроме того, интеграция микроструктурного моделирования с численным решением краевых задач позволяет глубже понять взаимосвязь между локальными структурными характеристиками и макромеханическим поведением материала, что является важным этапом на пути создания инновационных решений в области механики и материаловедения.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 25-29-00460, <https://rscf.ru/project/25-29-00460/>.

- [1] Трусов П. В. и др., Многоуровневые модели в физической мезомеханике металлов и сплавов: результаты и перспективы //Физическая мезомеханика, 2020. Т. 23(6). С. 33-62

- [2] Zheng G., et al., Theoretical, numerical, and experimental study on laterally variable thickness (LVT) multi-cell tubes for crashworthiness // *International Journal of Mechanical Sciences*, 2016. Vol. 118. P. 283-297.
- [3] Montheillet F. Moving grain boundaries during hot deformation of metals: dynamic recrystallization // *Moving interfaces in crystalline solids*, 2004. P. 203-256.
- [4] Quey R., Renversade L. Optimal polyhedral description of 3D polycrystals: Method and application to statistical and synchrotron X-ray diffraction data // *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2018. Vol. 330. P. 308-333
- [5] Trusov P., Kondratev N., Podsedertsev A. Description of dynamic recrystallization by means of an advanced statistical multilevel model: Grain structure evolution analysis // *Crystals*, 2022. Vol. 12(5). P. 653.
- [6] Trusov P. V., Shveykin A. I. Multilevel crystal plasticity models of single-and polycrystals. Direct models // *Physical mesomechanics*, 2013. Vol. 16(2). P. 99-124.

Особенности формирования магнитных состояний в сплаве Fe-Al

К. Г. Слободчиков¹, М. А. Тимиргазин², А. К. Аржников²

¹Удмуртский государственный университет, 426034 Россия, г. Ижевск, ул. Университетская, 1

²Удмуртский федеральный исследовательский центр УрО РАН 426067 Россия, г. Ижевск, ул. Т. Барамзиной, 34

Сплавы Fe-Al привлекают внимание исследователей их потенциальным использованием в экстремальных условиях. Они обладают рядом таких свойств как хорошая тугоплавкость, коррозионная стойкость, высокая пластичность и др. Установлено, что в диапазоне концентраций 25-50 ат. % Al сплав находится в сложном магнитном состоянии, которое может интерпретироваться как спиновое стекло [1] или волна спиновой плотности [2]. В то же время анализ кривых намагниченности позволяет предположить суперпарамагнитное поведение [3,4], которое характеризуется наличием магнитных кластеров в системе. Одной из причин формирования таких кластеров может служить близость системы к точке магнитного фазового перехода между различными магнитными состояниями.

В работе [4] с помощью первопринципных расчетов были исследованы два типа коллинеарных магнитных состояний: с сонаправленными моментами на всех атомах Fe («ферромагнитное») и с противоположно направленными моментами в зависимости от ближнего упорядочения («антиферромагнитное»). Для всех исследованных концентраций и постоянных решетки было найдено, что ферромагнитное (ФМ) состояние является более выгодным по отношению к антиферромагнитному (АФМ).

В настоящей работе мы исследуем систему Fe₉Al₇ (44 ат. % Al) с помощью программного пакета Quantum ESPRESSO [5], позволяющего из первых принципов рассчитывать электронную структуру и молекулярную динамику на основе теории функционала плотности и метода псевдопотенциала. Найдена равновесная постоянная решетка системы, которая оказалась выше, чем в работе [4], и ближе к экспериментальному значению. Кроме того, в отличие от работы [4], мы провели учет спин-орбитального взаимодействия, которое, как было показано, сближает по энергии ФМ и АФМ состояния при некоторых значениях параметров решетки.

- [1] Shukla P., Wortis M. Spin-glass behavior in iron-aluminum alloys: A microscopic model // *Phys. Rev. B*, 1980. Vol. 21. P. 159.
- [2] Noakes D.R., Arrott A.S., Belk M.G., Deevi S.C., Huang Q.Z., Lynn J.W., Shull R.D., Wu D. Incommensurate Spin Density Waves in Iron Aluminides // *Phys. Rev. Lett.*, 2003. Vol. 91 P. 217201.
- [3] Voronina E.V., Yelsukov E.P., Korolyov A.V., Yelsukova A.E. Mossbauer spectroscopy of spin structure and its in-field and temperature dynamics in B2 ordered Fe(Al) alloys // *Hyper. Interact.*, 2006. Vol. 168 P. 1079.

Всероссийская конференция

- [4] Arzhnikov A.K., Dobysheva L.V., Timirgazin M.A. Formation and ordering of local magnetic moments in Fe–Al alloys // *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 2008. Vol. 320 P. 1904.
- [5] Giannozzi P., Andreussi O., Brumme T., et al. Advanced capabilities for materials modelling with Quantum ESPRESSO // *Journal of Physics: Condensed Matter*, 2017. Vol. 29 P. 465.

Газофазное нитрирование поверхности титана короткими лазерными импульсами

И.В. Смирнов, Е.В. Харанжевский

Удмуртский государственный университет, Институт математики, информационных технологий и физики, 426034 Россия, г. Ижевск, ул. Университетская 1к4

Титан и его сплавы широко применяются в медицине, авиации и машиностроении благодаря высокой прочности и коррозионной стойкости. Однако относительно низкая твердость ограничивает их эксплуатационные свойства. Газофазное нитрирование с применением лазерной обработки позволяет формировать на поверхности прочные нитридные слои, повышающие эксплуатационные характеристики материала [1].

Газофазное нитрирование поверхности титана короткими лазерными импульсами является перспективным методом модификации поверхности, обеспечивающим повышение твердости, износостойкости и коррозионной стойкости материала.

Эксперимент проводился на образцах титана марки ВТ0. Нитрирование осуществлялось в герметичной камере, наполненной аммиаком, с применением двух различных методик, одна из которых осуществлялась на оптоволоконном лазере LDesigner F1, вторая на твердотельном лазере БУЛАТ LRS-300AU.

Микроструктура и фазовый состав обработанных образцов исследовались методами оптической и электронной микроскопии, рентгеноструктурного анализа и энергодисперсионной рентгеновской спектроскопии (EDAX). Аналогичные методики применялись в исследованиях Илларионова А.Г. и Попова А.А. [2] для изучения свойств титановых сплавов.

Результаты показали, что лазерное нитрирование приводит к формированию плотного слоя нитрида титана (TiN) толщиной до 10 мкм. Анализ микротвердости выявил увеличение твердости поверхности в 2,5 раза по сравнению с необработанными образцами. Рентгенофазовый анализ подтвердил образование TiN и Ti₂N, что свидетельствует о высокой степени насыщения поверхности азотом. Волоконный лазер обеспечил более равномерное распределение нитридов, тогда как твердотельный лазер сформировал более грубую микроструктуру. Газофазное нитрирование титана короткими лазерными импульсами повышает твердость и износостойкость поверхности. Волоконный лазер обеспечивает более однородное покрытие, тогда как твердотельный лазер формирует более толстый, но менее равномерный слой нитридов. Метод перспективен для применения в медицине и машиностроении благодаря улучшенным механическим свойствам титана.

[1] Лахтин Ю. М., Коган Я. Д. Азотирование стали. Машиностроение, 1976 г.

[2] Илларионов А. Г., Попов А. А. Технологические и эксплуатационные свойства титановых сплавов: учебное пособие. – 2014.

Магнетокалорический эффект в Cu-допированных манганитах неодима-стронция

В.Я. Митрофанов¹, С.Х. Эстемирова¹, Л.А. Черепанова¹

¹Институт металлургии Уральского отделения РАН, 620016, Россия, г. Екатеринбург, ул. Амундсена, 101

Магнитные материалы, проявляющие магнетокалорический эффект (МКЭ) являются потенциальными кандидатами для применения их в технологии магнитного охлаждения [1]. Несмотря на то, что в настоящее время доступно несколько МКЭ-материалов, исследование МКЭ-манганитов с рабочими температурами вблизи или ниже комнатной является актуальным, принимая во внимание экологический аспект такого метода охлаждения. Температура Кюри (T_C) в манганитах может быть легко модифицирована незначительными изменениями концентрации легирования в позициях А и/или В структуры перовскита ABO_3 [2]. В работе исследовано влияние замещения $Cu \rightarrow Mn$ на структурные, магнитные свойства и МКЭ орторомбических манганитов $Nd_{1-x}Sr_xMn_{1-y}Cu_yO_3$ ($x=0.0, 0.0.5, 0.10, 0.15, 0.20$). Концентрационные зависимости объема элементарной ячейки уменьшаются монотонно с увеличением концентрации меди (рис. 1); орторомбическая деформация также понижается с увеличением Cu с $D=0.50\%$ для $x=0.00$ до $D=0.25\%$ для $x=0.20$.

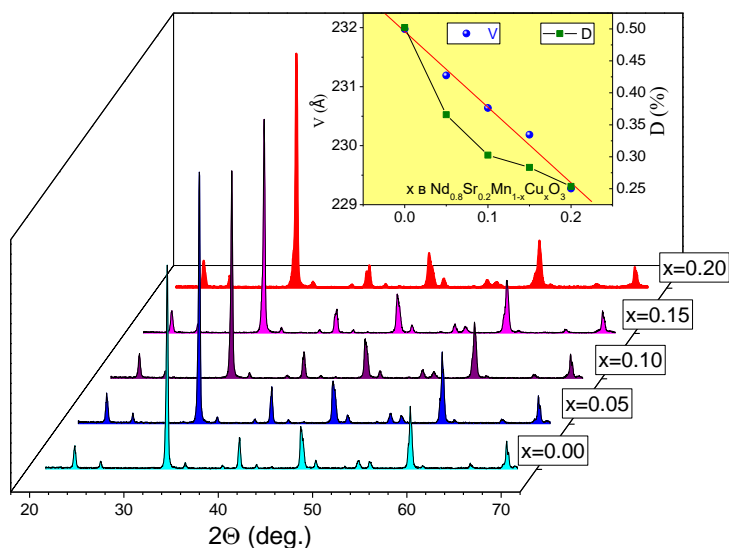


Рисунок 1. Рентгеновские дифрактограммы и концентрационная зависимость объема элементарной ячейки и степени орторомбической деформации составов $Nd_{0.8}Sr_{0.2}Mn_{1-x}Cu_xO_3$ ($x=0.0, 0.0.5, 0.10, 0.15, 0.20$).

Наблюдаемое изменение V можно объяснить, рассчитав средний ионный радиус в позиции В структуры ABO_3 , исходя из модели сосуществования Cu^{2+} и Cu^{3+} . Исходя из принципа зарядовой нейтральности, и предполагая, что Nd и Sr имеют фиксированные валентности ($3+$, $2+$), а O^{2-} является стехиометрическим, можно рассчитать количество разновалентных ионов меди и марганца в составе $Nd_{1-y}Sr_xMn_{1-x}Cu_xO_3$, а также средний радиус катиона в позиции В структуры ABO_3 ($\langle R_B \rangle$). Согласно этой модели, количество ионов Mn^{3+} , Mn^{4+} , Cu^{2+} и Cu^{3+} рассчитываются по формуле:

$$n_{Mn^{3+}} = 1 - y - \frac{3x}{2}, n_{Mn^{4+}} = y + \frac{x}{2}, n_{Cu^{2+}} = \frac{x}{2}, n_{Cu^{3+}} = \frac{x}{2}. \quad (1)$$

Из расчетов следует, что $\langle R_B \rangle$ -монотонно уменьшается, что влечет за собой уменьшение V , подтвержденное экспериментально.

Магнитные измерения манганитов $Nd_{0.8}Sr_{0.2}Mn_{1-x}Cu_xO_3$ в приложенном магнитном поле 100 Э были проведены в интервале температур 5–300 К. Кривые намагниченности $m(T)$, измеренные в режимах ZFC, FCC и FCW, показаны на рисунке 2а. Температуры Кюри T_c определялась по зависимости dM/dT на кривой $M = M(T)$. Соответствующие данные для T_c и температура Кюри-Вейсса (θ_{CW}) представлены в таблице 1.

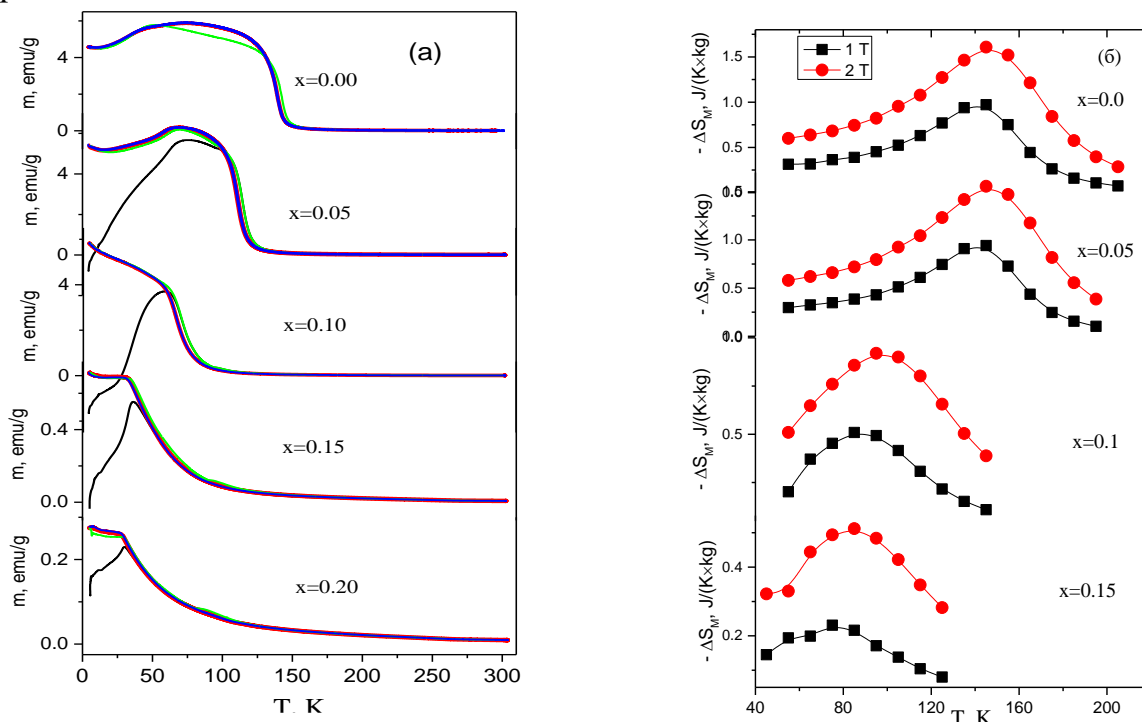


Рисунок 2. Температурные зависимости намагниченности во внешнем магнитном поле 100 Э (а), изменения магнитной энтропии ($-\Delta S_{max}$) (б) составов $Nd_{0.8}Sr_{0.2}Mn_{1-x}Cu_xO_3$ ($x=0.0, 0.05, 0.10, 0.15, 0.20$).

С ростом концентрации меди температуры T_c и θ_{CW} редуцируют. Результаты измерения магнитной восприимчивости в системе $Nd_{0.8}Sr_{0.2}Mn_{1-x}Cu_xO_3$ при температурах выше T_c свидетельствуют о существовании неоднородного состояния спинов Mn и Cu, подобного фазе Гриффитса.

Таблица 1. Температура Кюри (T_c), температура Кюри-Вейсса (θ_{CW}) манганитов $Nd_{0.8}Sr_{0.2}Mn_{1-x}Cu_xO_3$

	x в $Nd_{0.8}Sr_{0.2}Mn_{1-x}Cu_xO_3$				
	$x=0.00$	$x=0.05$	$x=0.10$	$x=0.15$	$x=0.20$
T_c (К)	139	110	70	91	83
θ_{CW} (К)	168	152	146	127	99

Температурные зависимости магнитной энтропии имеют широкий характерный максимум вблизи точки Кюри (рис. 2б). Установлено, что максимальное значение изменения магнитной энтропии ($-\Delta S_{max}$) в системе $Nd_{0.8}Sr_{0.2}Mn_{1-x}Cu_xO_3$ существенно понижается с ростом x .

Всероссийская конференция

Работа выполнена в рамках государственного задания ИМЕТ УрО РАН на оборудовании центра коллективного пользования «Урал-М».

- [1] Nehan P. Z. Z., Vitayaya O., et al., The magnetocaloric effect properties for potential applications of magnetic refrigerator technology: a review // Phys. Chem. Chem. Phys., 2024. Vol. 26. P. 14476-14504.
- [2] Yadav K., Singh M.P. et al., Effect of Cu doping and oxygen-annealing on the magnetic properties of $\text{Nd}_{0.5}\text{Sr}_{0.5}\text{Mn}_{1-x}\text{Cu}_x\text{O}_{3-d}$ ($x= 0.0, 0.01, 0.03, 0.05$ and 0.10) // Materials Chemistry and Physics, 2012. Vol. 137. P. 323-330.

Секция молодых ученых

Сравнительный анализ структуры и свойств сплавов Al-Cu-Co, полученных в условиях нормального и высокого давлений

Ю.И.Бронникова¹, Л.В.Камаева², В.В.Бражкин³

¹Удмуртский Государственный Университет, 426034 Россия, г. Ижевск, ул. Университетская, 1, кор. 1

²Удмуртский федеральный исследовательский центр УРО РАН, 125412 Россия, г. Ижевск, ул. Барышникова, 53

³Институт физики высоких давлений имени Л.Ф. Верещагина РАН, 142190 Россия, г. Троицк, Калужское шоссе, 14, стр. 2

Сплавы системы Al-Cu-Co в области, богатой Al, обладают хорошими литейными свойствами и являются перспективными конструкционными материалами, сочетающими в себе такие качества, как высокая твердость и пластичность. В сплавах, полученных в условиях нормального давления, с содержанием 10-20 ат.% Co и 20-30 ат.% Cu наблюдается образование стабильной квазикристаллической фазы с декагональной структурой (D-фаза). При воздействии давлением расширяется концентрационная область существования квазикристаллической структуры до концентраций, соответствующих конструкционным сплавам, что позволяет получить новый конструкционный композит. Поэтому в работе проводится сравнительный анализ структуры и свойств сплавов Al-Cu-Co, полученный в условиях нормального и высокого давлений.

По данным дифференциального термического анализа для сплавов, полученных в условиях нормального давления, построены концентрационные зависимости температур фазовых превращений, происходящих при 15 ат.% Co и 10-30 ат.% Cu и при 25 ат.% Cu и 2,5-20 ат.% Co, а также концентрационные зависимости переохлаждения.

На концентрационном срезе для сплавов с постоянной концентрацией Co при 17,5 ат.% Cu на линии ликвидус наблюдается излом, который указывает на изменение типа твердой фазы первой образующейся из расплава. До 17,5 ат.% Cu это интерметаллид $Al_{13}Co_4$, а после – β -фаза (твердый раствор на основе интерметаллида Cu_3Al). Для сплавов с постоянной концентрацией меди – 25 ат.%Cu при 10 ат.% Co наблюдается перегиб, который также указывает на изменение типа плавящейся твердой фазы. До 10 ат.% Co - это D-фаза, а после β -фаза.

Концентрационные зависимости переохлаждения для двух исследованных концентрационных сечений показывают, что кристаллизация сплавов Al-Cu-Co начинается в условиях небольших переохлаждений и зависит от концентрации Cu и Co, а также скорости охлаждения. Максимальное переохлаждение наблюдается для сплавов в области, богатой Al, то есть с небольшим содержанием Cu и Co, а в условиях минимальных переохлаждений затвердевает сплав, соответствующий стехиометрии D-фазы ($Al_{60}Cu_{25}Co_{15}$). Увеличение скорости охлаждения приводит к уменьшению температур начала кристаллизации, а, следовательно, увеличению переохлаждения, в условиях которого начинается затвердевание сплавов.

Всероссийская конференция

Полученную концентрационную зависимость переохлаждения для сплавов с постоянной концентрацией Cu 25 ат.% можно разделить на два основных интервала: от 2,5 до 10 ат.% Co концентрационная зависимость переохлаждения описывает изменения кристаллизационной способности D-фазы, а от 10 до 20 ат.% Co β -фазы. В области образования D-фазы увеличение концентрации Co, приводит к росту переохлаждения, т.е. к задержке в образовании квазикристаллической структуры, а в области образования β -фазы, при 17,5 ат.% Co – наблюдается максимум переохлаждения. Концентрационная зависимость переохлаждения при 15 ат.% Co имеет более сложный вид чем при 25 ат.% Cu. Помимо перегиба соответствующего инвариантному равновесию $L+Al_{13}Co_4 \rightarrow L+\beta$ при 17,5 ат.% Cu на зависимости $\Delta T(c)$ наблюдаются еще две особенности – минимумы переохлаждения при 12,5 и 25 ат.% Co.

Металлографический анализ позволил получить данные о микроструктуре образцов, и показал, что кристаллизация сплава $Al_{75}Cu_{10}Co_{15}$ с содержанием 10 ат.% Cu начинается с образования кристаллов $Al_{13}Co_4$, затем эта фаза претерпевает перитектическое и полиморфное превращения. Заканчивается кристаллизация данного сплава эвтектической кристаллизацией. Кристаллизация сплава с концентрацией 12,5 ат.% Cu ($Al_{72,5}Cu_{12,5}Co_{15}$) начинается также с образования интерметаллида $Al_{13}Co_4$, но в микроструктуре нет тройной эвтектики, а наблюдается двойная эвтектика. При последующем увеличении концентрации Cu в микроструктуре образцов появляются кристаллы $AlCu$, тройной интерметаллид Al_7Cu_2Co и небольшое количество D-фазы. При концентрации, соответствующей стехиометрии D-фазы ($Al_{60}Cu_{25}Co_{15}$), микроструктура образца состоит из смеси β -фазы и D-фазы. Сплав с наибольшим содержанием Cu ($Al_{55}Cu_{30}Co_{15}$) также состоит из β -фазы и D-фазы, но между дендритами β -фазы наблюдаются следы перитектических реакций с выделением фазы $CuAl$ и тройного интерметаллида Al_7Cu_2Co .

При затвердевании сплавов с 15 ат.%Co в условиях 5 ГПа не наблюдается образование фазы $Al_{13}Co_4$, кристаллизация всех исследованных сплавов начинается с образования β -фазы, а квазикристаллическая фаза образуется даже в сплавах с небольшим содержанием Cu (10-15 ат.%) по перитектической реакции, а в сплаве $Al_{67,5}Cu_{17,5}Co_{15}$ как по перитектике так и напрямую из расплава. Такой характер кристаллизации указывает, что увеличение давления до 5 ГПа смещает область инвариантных равновесий при 15 ат.% Co в область меньших концентраций Cu, что способствует расширению концентрационного интервала существования D-фазы. Анализ структуры сплавов при 25 ат.% Cu, полученной при затвердевании в условиях высоких давлений показал, что воздействие давления на расплав смещает инвариантное равновесие $L+D \rightarrow \beta+L$ в сторону больших концентрации Co.

Таким образом, при затвердевании сплавов Al-Cu-Co в условиях высоких давлений расширяется концентрационная область образования квазикристаллической фазы из расплава как по Cu так и по Co, а также изменяется последовательность фазовых превращений при охлаждении, что приводит к увеличению доли квазикристаллической фазы в сплавах при комнатной температуре и как следствие увеличению их микротвердости.

Влияние траектории движения луча лазера на коробление нержавеющей стали 316L в процессе СЛП

Р. С. Коньшин¹, Е. В. Харанжевский¹

¹Удмуртский государственный университет, 426034 Россия, г. Ижевск, Университетская улица, 1, корп. 4

В процессе селективного лазерного плавления высокотемпературные градиенты, вызванные быстрыми циклами нагрева и охлаждения ванны расплава, вызывают остаточные растягивающие напряжения [1]. Изменение формы и размеров напечатанной металлической конструкции обусловлено действием напряжений первого рода, а напряжения второго и третьего рода также имеют определяющее значение на возникновение трещин в процессе лазерной обработки.

Деформация в процессе печати зачастую приводит к необходимости полной остановки процесса. В зависимости от формы и размеров обрабатываемых лазерным излучением элементов, а также характера действующего излучения могут возникать одно-, двух- или трехосные напряжения. В случае лазерной однопроходной сварки, наплавки или термообработки поверхностей возникает двухосное напряженное состояние. В процессе СЛП печати появляется трехосное напряженное состояние, являющееся наиболее сложным для расчетного и экспериментального определения [2]. Одним из способов снизить остаточные напряжения, является изменение стратегий сканирования [3]. Напряжения, действующие в направлении лазерной обработки, называют продольными и обозначают σ_x . Напряжения, действующие в плоскости x_{0y} перпендикулярно направлению обработки, называют поперечными и обозначают σ_y . Напряжения, действующие в направлении, перпендикулярном плоскости обработки x_{0y} , называют напряжениями по толщине элементов и обозначают σ_z [2].

В работе был рассмотрен упрощенный вариант печати. В качестве тела была выбрана пластинка из нержавеющей стали 316, размерами (50x30x1 мм). На пластинку наносился слой порошка 316L (сферической формы фракции 10–40 мкм), который используется в СЛП процессе. Нанесенный слой порошка сплавляли с помощью твердотельной лазерной установки различными траекториями сканирования.

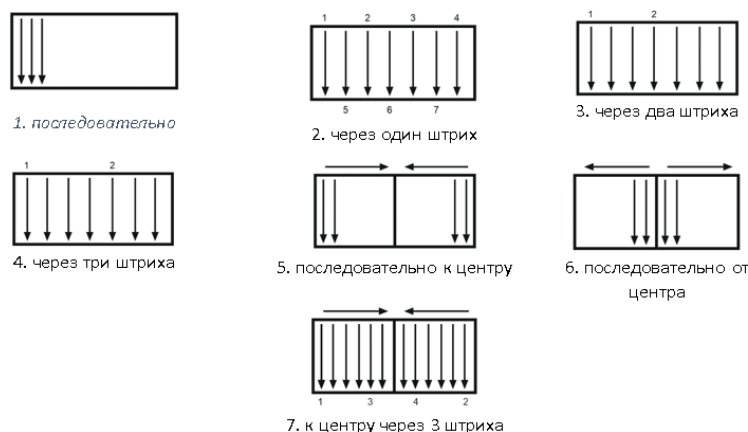


Рисунок 2. Стратегии сканирования лазерного излучения

В ходе эксперимента были рассмотрены следующие варианты сканирования луча лазера (рис.1): последовательная штриховка, соответствующая классической заливке в СЛП процессе; через 1-3 дорожки; последовательно к центру и от центра; совмещенный режим – к центру через 3 лазерные дорожки. По данным результатам было обнаружено, с изменением очередности заполнения штриховки изменяется результирующее воздействие на коробление, в стандартном (последовательном режиме) в большей доле участвует коробление вдоль лазера. В то время как в режимах (через 1 - 3 дорожки) преобладающая доля коробления поперек лазера. Снижение коробления на 19% от исходной последовательной стратегии и достигнуто при использовании стратегии сканирования «через 3 штриха».

- [1] Zaeh M. F., Branner G. Investigations on residual stresses and deformations in selective laser melting // *Production Engineering*. 2010. Vol. 4. №. 1. С. 35-45.
- [2] Григорьянц А. Г. Основы лазерной обработки материалов. – Общество с ограниченной ответственностью Научно-техническое издательство Машиностроение, 1989.
- [3] Zou S. et al. Numerical analysis of the effect of the scan strategy on the residual stress in the multi-laser selective laser melting // *Results in Physics*. 2020. Vol. 16. P. 103005.

Применение лазерной обработки поверхности высоколегированных сталей для изменения структуры с целью повышения коррозионной стойкости

Е. В. Коробейникова¹, С. М. Решетников¹, М. Д. Кривилев^{1,2}, А.С. Широбокова¹,
Е.А. Дурман¹

¹Удмуртский государственный университет, 426034 Россия, г. Ижевск, ул. Университетская 1

²Удмуртский федеральный исследовательский центр УрО РАН, 426067 Россия, г. Ижевск, ул. им. Татьяны Барамзиной 34

В работе обсуждаются результаты влияния применения лазерной обработки поверхности высоколегированных сталей на коррозионно-электрохимические свойства исследуемых материалов. На сегодняшний момент одной из актуальных задач промышленности является поиск методов увеличения механических и функциональных свойств стальных изделий [1]. В связи с чем, целью данной работы является сравнение базовых коррозионно-электрохимических характеристик сталей 14X17H2, 12X18H10T и сплава ХН77ТЮР до и после лазерной обработки.

Материалы для исследования представляли собой пластины размером 10×10×2 мм, которые подвергались короткоимпульсной лазерной обработке с помощью оптоволоконного импульсного иттербиевого лазера Laser Scan-44 с длиной волны излучения ~1 мкм в атмосфере воздуха или аргона при мощности излучения 4,5 и 17,9 Вт. Поляризационные измерения образцов проводились путем снятия анодных потенциодинамических кривых на потенциостате EcoLab 2А-100 в боратном буферном растворе (ББР) с рН=7,4 при естественной аэрации. Поляризационные методы исследования позволяют качественно и количественно оценить коррозионно-электрохимические свойства материалов, такие как: потенциал перепассивации и анодные токи растворения поверхности [2].

В ходе работы подобран оптимальный, с точки зрения коррозионной стойкости, режим лазерной обработки поверхности для каждого вида исследуемого материала. Лазерная обработка на воздухе с мощностью 4,5 Вт улучшает коррозионную стойкость стали 12X18H10T и сплава ХН77ТЮР по сравнению с исходными данными в растворе ББР. Для стали 14X17H2 оптимальной является обработка на воздухе с мощностью излучения 17,9 Вт.

[1] Овчинников В.В., Боровин Ю.М., Якутина С.В., Лукьяненко Е.В., Козлов Д.А., Парфеновская О.А. Повышение коррозионной стойкости конструкционной стали 30ХГСН2А путем имплантации ионов меди и свинца. // Машиностроение и инженерное образование, 2013. № 3. С. 35–41.

[2] Решетников С.М., Харанжевский Е.В., Садиоков Э.Е. Повышение коррозионной стойкости металлических материалов при лазерной обработке, Ижевск, Вестник удмуртского государственного университета, 2016. С. 116.

Влияние структуры материала на механические свойства изделия в лазерных аддитивных технологиях

Р. М. Мосина¹, М. Д. Кривилев¹, К. А. Романов²

¹Удмуртский государственный университет 426034, Удмуртская республика, г. Ижевск, ул. Университетская, 1.

²Пермский национальный исследовательский политехнический университет, 614990, Пермский край, г. Пермь, Комсомольский проспект, д. 29

Лазерные аддитивные технологии (АТ) активно развиваются в России и находят применение в аэрокосмической, медицинской, автомобильной отраслях и многих других сферах. Структура материала, создаваемого с помощью аддитивных технологий (3D-печати), оказывает значительное влияние на его механические свойства. Это связано с особенностями процесса послойного нанесения материала, который может приводить к формированию уникальной микро- и макроструктуры. В аддитивных технологиях селективного лазерного плавления (СЛП) и прямого лазерного выращивания (ПЛВ) протекают высокоскоростные процессы кристаллизации и охлаждения, научно-обоснованное управление которыми позволяет получать материалы, обладающие улучшенными механическими свойствами.

В данной работе проведено исследование влияния структуры материала на его механические свойства. Для этого получены образцы в трех различных направлениях выращивания: вертикальном, вдоль направления теплоотвода, горизонтальном, перпендикулярно этому направлению, и под углом (рис. 1). Для выращенных образцов проведено исследование механических свойств, включая предел текучести и предельную деформацию, а также исследована зеренная структура. Полученные результаты сопоставлены с разработанной математической моделью. С помощью анализа просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ) и математической модели проведен анализ влияния расстояния между двойниками на механические свойства материала. Исследование проводилось для сплава 03X17H14M2.



Рисунок 1. Образцы, полученные при различных углах выращивания 0°, 45°, 90° относительно направления теплоотвода.

Всероссийская конференция

Для стали 03X17H14M2 (316L) характерна типичная зеренная структура, представляющая собой удлиненные столбчатые зерна γ -аустенита, расположенные вдоль направления теплоотвода, и остаточный δ -феррит [1-2]. В образцах стали 316L, полученных АТ, в основном наблюдается столбчато-дендритная структура зерен за счет процессов кристаллизации как основного механизма и рекристаллизации как сопутствующего процесса.

Теоретические методы механики материалов можно обобщенно разделить на три основных подхода: макрофеноменологический, прямой и гибридный. В настоящей работе рассматривается параметрическая гибридная модель, разработанная на базе статистической конститутивной модели с явным рассмотрением элементов микроструктуры. Гибридная модель – модель механики деформирования твердого тела, имеющая черты прямых моделей и макрофеноменологических (конститутивных) моделей. Из прямых моделей использовались данные о размерах зерна, дисперсии, анизотропии размеров по направлению, расстояниях между плоскостями двойникования, размерах включений, которые определялись на основе представительной выборки зерен. Из феноменологических моделей используется данные об определяющих соотношениях, взаимосвязей между прочностью и размерами зерна (соотношение Холла-Петча).

Исследование влияния микроструктуры образцов на механические свойства показало ярко выраженную анизотропию, определяемую вытянутостью зерен аустенита. В опытах на одноосное нагружение наблюдается увеличение предела текучести при изменении направления выращивания от 0 до 90 градусов. Эффект упрочнения связан с уменьшением средней длины свободного пробега дислокаций при неупругой деформации. В вертикально выращенных образцах происходит тангенциальный рост зерен, вытянутых вертикально в направлении теплоотвода, длина свободного пробега дислокаций составляет 50 мкм, что обеспечивает уменьшение предела текучести. При горизонтальном выращивании происходит снижение анизотропии зерен, переход к более равноосной микроструктуре, длина свободного пробега дислокаций составила 14 мкм, что обуславливает увеличение предела текучести.

Авторы выражают благодарность Швейкину А.И., Кондратьеву Н.С., Трусову П.В., Шишковскому И.В., Харанжевскому Е.В., Камаевой Л.В. за обсуждение результатов.

Работа частично выполнена в рамках стипендии Президента Российской Федерации для аспирантов и адъюнктов, проводящих научные исследования. Работа выполнена в рамках проекта ЕОТП «Виртуальный 3Д-принтер».

- [1] Prakash K. S. et al. Microstructure, Mechanical Properties and Fracture Toughness of SS 321 Stainless Steel Manufactured Using Wire Arc Additive Manufacturing // Transactions of the Indian Institute of Metals. – 2023. – Т. 76. – №. 2. – С. 537-544.
- [2] Rodrigues T. A. et al. Effect of heat treatments on 316 stainless steel parts fabricated by wire and arc additive manufacturing: Microstructure and synchrotron X-ray diffraction analysis // Additive Manufacturing. – 2021. – Т. 48. – С. 102428.

Влияние экстремальных воздействий на структуру заэвтектических сплавов Al-Co

Т. М. Сабурова¹, С. Г. Меньшикова²

¹Удмуртский государственный университет, 426034 Россия, г. Ижевск, ул. Университетская, 1

²Удмуртский федеральный исследовательский центр УрО РАН, 426067 Россия, г. Ижевск, ул. Татьяны Барамзиной, 34

Бинарные сплавы на основе алюминия типа Al - ПМ (ПМ - переходный металл) - перспективные материалы для базовых отраслей промышленности [1]. Введение небольших добавок ПМ приводит к повышению коррозионной стойкости, прочности и других механических свойств алюминия [2]. Растворимость данных элементов в алюминии при равновесных условиях небольшая - не превосходит десятых долей процента. Повышение растворимости ПМ в алюминии возможно за счет быстрого ($\sim 10^4$ - 10^6 град/с) охлаждения расплавов, в процессе которого происходит формирование аномально пересыщенных твердых растворов. Дальнейшая термообработка способствует распаду неравновесных твердых растворов с образованием nano-размерных частиц алюминидов ПМ, которые стабилизируют зеренную структуру, обеспечивают повышение физико - механических свойств сплавов [3]. В последнее время в металлургическом производстве все чаще используются экстремальные воздействия на жидкие сплавы, в частности, высокие давления [4]. Экстремальные воздействия влияют и на кинетику и на термодинамику затвердевания расплава. Воздействие высокими давлениями на металлические расплавы с разным исходным состоянием перед охлаждением, совместно с высокоскоростной закалкой расплавов, приводит к получению материалов с уникальными структурами и свойствами [5,6].

Цель работы: изучить особенности формирования структур в бинарных сплавах Al - ПМ (ПМ: Co) при быстром затвердевании их высокотемпературных расплавов под высоким давлением. Выбраны заэвтектические сплавы в области, богатой алюминием.

Лигатуры системы Al - Co составами $Al_{97}Co_3$, $Al_{96}Co_4$, $Al_{95}Co_5$, $Al_{94}Co_6$, $Al_{93}Co_7$ получали в печи Таммана в корундовых тиглях сплавлением чистых компонентов при атмосферном давлении. При выплавке сплавов исходными компонентами служили элементы с содержанием основного металла: алюминий 99.999, кобальт 99.9 масс.%. Первоначально при 1175 К в расплав алюминия вводили кобальт, затем смесь нагревали до 1770 К и перемешивали, подстуживали до 1270 К и выливали в цилиндрическую изложницу из стали, диаметр которой 14 мм. Химический анализ показал, содержание основных компонентов соответствовало заданному составу. Полученные по данной технологии лигатуры рассматривали как исходные образцы.

Образцы после термобарических воздействий и последующей закалке расплава получали в камере высокого давления типа «тороид» [7]. В качестве среды, передающей давление, использовали твердое пластичное вещество -

Всероссийская конференция

камень алгетский. Такая среда создавала всестороннее сжатие исследуемого объекта. Основной принцип создания высокого давления в такой камере заключается в сочетании процессов сжатия и истечения вещества, передающего давление. Последовательность эксперимента в камере «тороид»: установление заданного давления, импульсный нагрев, выдержка при установленных давлении и температуре, охлаждение без сброса давления до комнатной температуры и далее уменьшение высокого давления до атмосферного. Образцы для исследования получали под высоким давлением 2, 5, 7, 8 и 10 ГПа. Полуколичественные расчеты, за использованием уравнения теплопроводности, показали, средняя скорость охлаждения расплавов выбранной системы сплавов при данных условиях составляет порядка 1000 град/с. Температура расплава перед закалкой 1800 К (± 10 К).

Рентгеноструктурные и металлографические исследования показали, особенности структур при выбранных условиях затвердевания идентичны для выбранных составов, поэтому достаточно рассмотреть структурообразование для одного состава, возьмем состав $Al_{95}Co_5$.

В состав исходного образца $Al_{95}Co_5$ (полученного при атмосферном давлении в печи Таммана) входят две стабильные фазы: αAl (твердый раствор кобальта в алюминии, ГЦК, $Fm\bar{3}m$) и Al_9Co_2 (моноклинная решетка, $P2_{1/c}$). Данные металлографического анализа - в хорошем согласии с данными рентгеноструктурного анализа. Микроструктура состоит из первичных кристаллов алюминида кобальта Al_9Co_2 , по форме представляющих фрагментированные дендриты, а также эвтектики ($\alpha Al + Al_9Co_2$) пластинчато - игольчатой морфологии с областями веерного расщепления пластинчатого пакета. Средняя толщина интерметаллидов Al_9Co_2 составляет ~ 70 мкм. В образце также присутствуют поры. Повышение скорости охлаждения до 10^3 град/с приводит к измельчению структуры сплава в целом при сохранении фазового состава. Твердость (H_v) интерметаллида Al_9Co_2 составляет порядка 5500 МПа; эвтектики, в зависимости от выбранной области, с бóльшим или меньшим содержанием интерметаллидов, от 230 до 955 МПа. Среднее значение $H_v \sim 1100$ МПа. Усреднение проведено по 20 произвольно выбранным точкам, которые включают H_v интерметаллида и эвтектики.

При быстром затвердевании под высоким давлением 2 ГПа фазовый состав, а также и механизм кристаллизации сплава не изменяются, однако структура, по сравнению с исходным образцом, существенно измельчается. Первичные интерметаллиды Al_9Co_2 представляют собой цепочки длиной и шириной порядка 50 и 2 мкм соответственно из кубиков размером ~ 2 мкм, распределены в объеме образца равномерно. Средняя твердость образца увеличивается до 1200 МПа.

Увеличение давления до 7 - 10 ГПа при прочих равных условиях затвердевания, по отношению к предыдущему образцу, приводит к изменению механизма затвердевания сплава: кристаллизуется по принципу доэвтектического, хотя изначально был заэвтектический. При этом фазовый состав сплава сохраняется, метастабильных фаз не выявлено. В сплаве - первичные кристаллы αAl твердого раствора в форме тонко разветвленных дендритов, хорошо отслеживаются оси первого и второго порядков. Междендритное пространство занимает мелкая пластинчатая эвтектика, размер эвтектических

Всероссийская конференция

ячеек ~ 5 мкм. Согласно данным рентгеноспектрального микроанализа, в состав α Al твердого раствора входит 2% Co при затвердевании под давлением 7 ГПа и увеличивается до 3% при затвердевании под давлением 10 ГПа. Известно, что растворимость кобальта в алюминии при эвтектической температуре ~ 0.01 ат.%. Таким образом, с помощью давления можно существенно увеличить степень пересыщения α Al твердой фазы кобальтом. Средняя твердость сплава увеличивается до 1400 МПа при 7 ГПа и до 1500 МПа при 10 ГПа.

Таким образом, увеличение давления оказывает такое же влияние на процессы затвердевания, как если бы увеличивалась скорость охлаждения расплавов, увеличивая их переохлаждение. Одновременно установлено, в области давлений от 5 до 10 ГПа изменения структуры сплавов алюминия с кобальтом очень схожи с изменениями в структуре сплавов алюминия с никелем, количественные и качественные изменения структуры при переходе от одного элемента к другому сравнительно невелики.

Исследования выполнены с использованием оборудования ЦКП «Центр физических и физико - химических методов анализа, исследования свойств и характеристик поверхности, наноструктур, материалов и изделий» УдмФИЦ УрО РАН. Выражаем искреннюю признательность Академику РАН, д.ф.-м.н. В.В. Бражкину за содействие в получении образцов в камере типа «тороид» (ИФВД РАН, г. Москва, г. Троицк).

- [1] Inoue A., Kimura H. Fabrications and mechanical properties of bulk amorphous, nanocrystalline, nanoquasicrystalline alloys in aluminum - based system // *Journal of Light Metals*, 2001. Vol. 1 (1). P. 31.
- [2] Sidorov V.E. et all. Physical properties of Al - R melts // *Materials Science and Engineering: A*, 2007. Vol. 449 - 451. P. 586.
- [3] Mochugovskiy A.G. et all. Annealing induced precipitation of nanoscale icosahedral quasicrystals in aluminum based alloy // *Materials Letters*, 2019. Vol. 247. P. 200.
- [4] Menshikova S.G., Brazhkin V.V. Effect of High Pressures on the Formation of New Compounds in the $Al_{86}Ni_2Co_6Gd_6$ Alloy // *Physics of the Solid State*, 2022. Vol. 64. P. 197.
- [5] Menshikova, S.G. et all. Microstructure and Physical and Mechanical Properties of the $Al_{90}Gd_{10}$ Binary Alloy after Barothermal Treatment // *Physics of the Solid State*, 2022. Vol. 64. P. 204.
- [6] Chtchelkatchev N.M. et all. Theoretical and experimental study of high - pressure synthesized B20 - type compounds $Mn_{1-x}(Co,Rh)_xGe$ // *Pure and Applied Chemistry*, 2019. Vol. 91 (6). P. 941.
- [7] Бражкин В.В. Влияние высокого давления на затвердевание металлических расплавов (Pb, In, Cu, двойные сплавы на основе меди): дисс. ... канд. физ. - мат. наук: 01.04.07 / Бражкин Вадим Вениаминович. - М.: МФТИ (1987). 150 с.

Моделирование движения фазовой границы при растворении алюминиевой пластины цинковым припоем

И.Р. Салтыков, С.А. Груздь, И.В. Шутов

Удмуртский государственный университет, 426034 Россия, г. Ижевск, ул. Университетская, 1

В наши дни актуальной проблемой для космической техники является ремонт поврежденных конструкций в условиях космоса. Повреждения могут появляться как непосредственно в процессе эксплуатации, так и из-за воздействия космического мусора. Для ремонта, возникающих дефектов, предлагается использование высокотемпературной пайки (ВТП). Разработка технологии на основе данного метода требует детального изучения процессов взаимодействия припоя и основного материала.

При проведении экспериментов по растеканию жидкого припоя системы Zn-Cu-Al на поверхности сплава АМг6 было обнаружено подплавление поверхностного слоя подложки. Вследствие чего образовывался бассейн расплава, граница которого в процессе эксперимента смещалась по нормали к поверхности, вглубь основного материала (рис. 1).

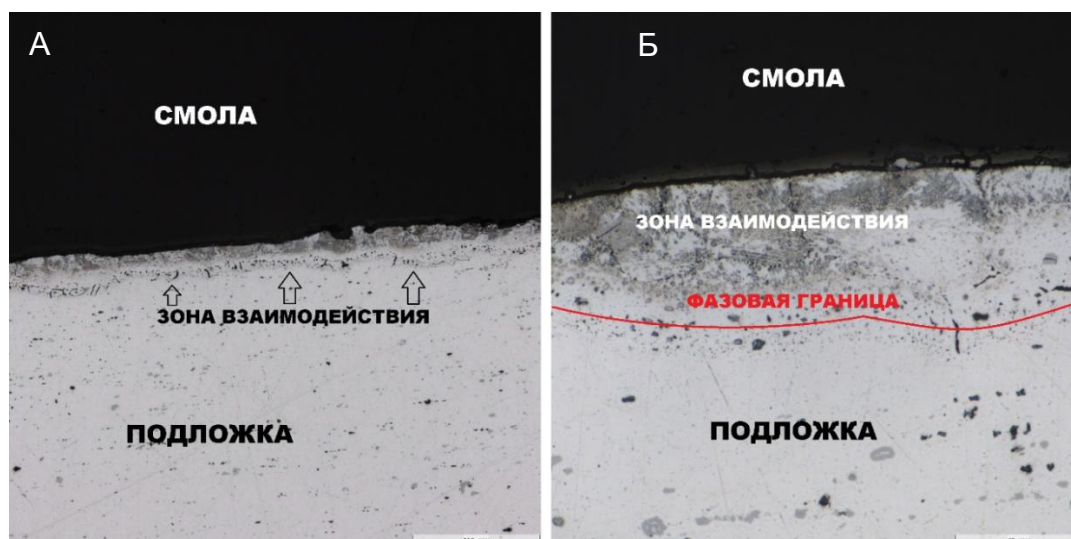


Рисунок 3. Поперечный микроразрез пластины АМг6 после термических испытаний на воздухе с припоем Zn-Cu-Al. Температура $T = 405^{\circ}\text{C}$, выдержки $t = 30$ мин. А – общий вид рассматриваемой области, Б – увеличенное изображение зоны контакта

Для исследования наблюдаемых в эксперименте явлений, была построена математическая модель, описывающая динамику распространения жидкого припоя по поверхности подложки [1]. Важным элементом модели является учёт диффузионных процессов, которые определяют концентрацию компонентов в системе и как следствие положение границы между разными фазами. Для расчета скорости смещения фазовой границы было применено уравнение “направленного роста” (потокосное условие) [2]:

$$V_n(1 - k)C^* = -D \frac{\partial C}{\partial m} \quad (1)$$

где V_n – локальная нормальная скорость движения межфазной границы, C^* – концентрация жидкости на границе, kC^* – концентрация твёрдой фазы, D – коэффициент диффузии. При моделировании процесса контактного плавления с использованием соотношения (1) были получены следующие результаты (рис. 2).

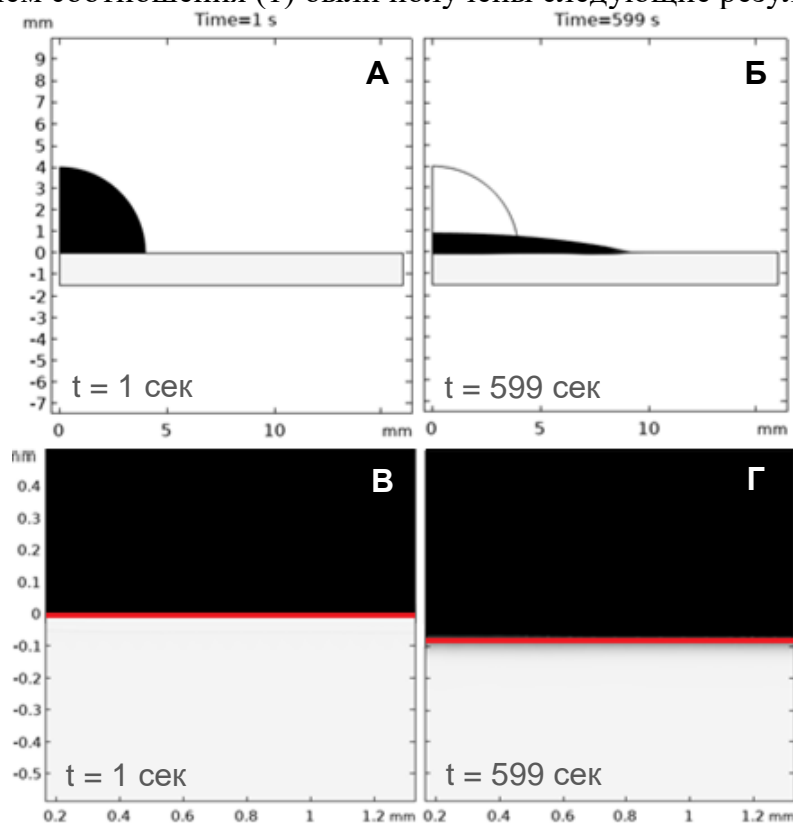


Рисунок 4. Смещение фазовой границы в процессе контактного плавления за время $t = 10$ мин. А, Б – общий вид расчетной области, В, Г – увеличенная область межфазной границы "припой - подложка"

Результаты расчетов показали значения смещения фазовой границы на 7 – 8 мкм за время $t = 10$ мин. Эти значения достаточно хорошо согласуются с данными натурального эксперимента, где средняя величина смещения границы составляет ~ 30 мкм за время $t = 30$ мин.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант №24-21-00413).

- [1] Груздь С.А., Шутов И.В., Салтыков И.Р. Исследование влияния оксидного слоя на растекание цинкового припоя по поверхности алюминиевой пластины с учетом диффузионных процессов // XXIV Зимняя школа по механике сплошных сред. - Пермь: ПФИЦ УрО РАН, 2025. - С. 98.
- [2] Курц У. Фундаментальные основы затвердевания / У. Курц, Д. Фишер; перевод с английского В. М. Голода и Е. В. Голод, под научной редакцией П. К. Галенко. — Москва, Ижевск : Институт компьютерных исследований, 2013. — 298 с.

Влияние графита на триботехнические свойства стали, поверхностно легированной оксидом висмута

А.С. Широбокова¹, Е. В. Харанжевский¹

¹Удмуртский государственный университет, 426034 Россия, г. Ижевск, ул. Университетская, 1

Оксид висмута в составе композитных покрытий на поверхности сталей и жаропрочных сплавов вносит значительный вклад в снижение трения и износа [1-5]. В работе [1] была продемонстрирована возможность модифицирования поверхности стали оксидом висмута при помощи короткоимпульсной лазерной обработки. Однако механизм работы висмутового покрытия в условиях граничной смазки не до конца выявлен. Поэтому для исследования механизма состав покрытия был модифицирован графитом, выступающим в роли восстановителя висмута из Bi_2O_3 .

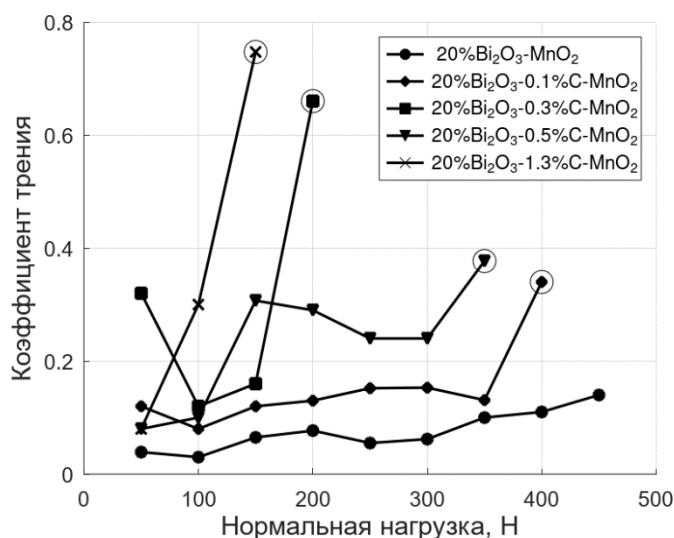
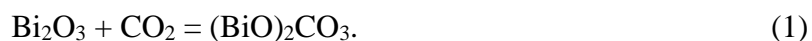


Рисунок 1. Динамика изменения коэффициента трения покрытий с оксидной матрицей с различным содержанием графита (пара трения сталь-алюминий), \bigcirc — схватывание поверхностей.

По сравнению с исходным составом, не содержащим графит, под действием различных динамических нагрузок все покрытия показали высокие значения коэффициента трения и были подвержены схватыванию поверхности при различных динамических нагрузках. Причем чем больше содержание углерода, тем быстрее происходит процесс адгезионного изнашивания и заклинивания (рис. 1). Образец, содержащий 0,1 мас. % графита, подвергается схватыванию поверхностей при нормальной динамической нагрузке, равной 400 Н. А в образце, содержащем 1,3 мас. % С, заклинивание происходит при нагрузке 150 Н.

В докладе обсуждается влияние окислительно-восстановительных процессов в зоне трения скольжения. Для эффективной работы висмутового покрытия необходимо образование слоистой триботехнической пленки, состоящей из субкарбоната висмута [6]:



Всероссийская конференция

Однако этот процесс (1) при добавлении графита в состав наносимой порошковой смеси затруднен, так как при лазерной обработке протекают следующие реакции [7]:



Добавление диоксида марганца в состав смеси покрытий в работе [1] обусловлено следующими факторами: MnO_2 выступает как проводник оксида висмута в поверхность стали и как источник кислорода [8] для окисления восстановленного висмута [7]:



В докладе обсуждается влияние окислительно-восстановительных процессов в зоне трения скольжения. Чем больше в составе висмутового покрытия графита, тем больше висмут восстанавливается до металлической формы. Для работы покрытия нужна окисленная форма висмута (Bi_2O_3), и в исходную порошковую смесь нужно добавлять такие соединения, которые будут мешать оксиду висмута восстанавливаться, т.е. окислители.

- [1] Kharanzhevskiy E. V. et al. Towards eliminating friction and wear in plain bearings operating without lubrication //Scientific Reports. 2023. Т. 13. №. 1. С. 17362.
- [2] Sun H. et al. Effect of adding soft Bi_2O_3 on structural modification and tribological regulation of Ni-5 wt% Al composite coating in wide temperatures range //Surface and Coatings Technology. 2021. Т. 405. С. 126517.
- [3] Kato H., Komai K. Tribofilm formation and mild wear by tribo-sintering of nanometer-sized oxide particles on rubbing steel surfaces //Wear. 2007. Т. 262. №. 1-2. С. 36-41.
- [4] Wang X. et al. Mechanical and tribological properties of plasma sprayed NiAl composite coatings with addition of nanostructured $\text{TiO}_2/\text{Bi}_2\text{O}_3$ //Surface and Coatings Technology. 2018. Т. 349. С. 157-165.
- [5] Rodil S. E., Depablos-Rivera O., Sánchez-López J. C. Tribological Response of δ - Bi_2O_3 Coatings Deposited by RF Magnetron Sputtering //Lubricants. 2023. Т. 11. №. 5. С. 207.
- [6] Ortiz-Quiñonez J. L. et al. Bismuth oxide nanoparticles partially substituted with EuIII, MnIV, and SiIV: Structural, spectroscopic, and optical findings //Inorganic Chemistry. 2017. Т. 56. №. 6. С. 3394-3403.
- [7] Юхин Ю. М., Михайлов Ю. И. Химия висмутовых соединений и материалов. Новосибирск: Изд-во СО РАН. 2001. 360 с.
- [8] Ю. Д. Третьяков и др. Неорганическая химия: в 3 т. / Т. 3: Химия переходных элементов. Кн. 1: учебник для студ. высш. учеб. заведений / М.: Издательский центр «Академия», 2007. 352 с.

Физико-математическое моделирование полидисперсного ансамбля частиц в форме вытянутых и сплюснутых эллипсоидов вращения

М. А. Никишина¹, Д. В. Александров¹

¹Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б. Н. Ельцина, Институт естественных наук и математик, 620000 Россия, г. Екатеринбург, пр-кт Ленина 51

Явления объемного роста кристаллов лежат в основе производства материалов из переохлажденных/пересыщенных жидкостей в материаловедении, химической и фармацевтической промышленности [1]. Различные аспекты таких фазовых переходов определяют физические характеристики, свойства и микроструктуру твердых тел, полученных из метастабильной и/или неравновесной жидкости.

Важнейшими процессами, лежащими в основе объемной кристаллизации, являются зарождение и рост одиночных зародышей, а также эволюция ансамблей полидисперсных частиц на начальной и промежуточной стадиях. В последнее десятилетие был достигнут значительный прогресс в математическом описании объемного зарождения и роста сферических кристаллов. Однако, как показано в экспериментальных работах, [2-3] форма зарождающихся и растущих кристаллов не всегда является сферической. Для учета несферичности частиц естественным шагом в развитии теории является использование приближения об их эллипсоидной форме.

В данной работе будет представлено полное аналитическое решение интегро-дифференциальной модели, описывающей зарождение и рост кристаллов эллипсоидальной формы в переохлажденном расплаве. Найдены и сравнены объемные скорости роста кристаллов в форме вытянутых и сплюснутых эллипсоидов вращения. Аналитическое решение этой интегро-дифференциальной модели показывают, что ансамбль вытянутых частиц растет и устраняет переохлаждение расплава быстрее, чем ансамбль сплюснутых частиц. В результате функция распределения частиц по объему для вытянутых кристаллов смещается в сторону больших объемов кристаллов, чем аналогичное распределение для сплюснутых кристаллов. Учитывая такое поведение, мы пришли к выводу, что форма кристаллов играет решающую роль в динамике переохлаждения расплава и их распределении по объему.

Работа выполнена при финансовой поддержке Фонда развития теоретической физики и математики «БАЗИС» (проект № 23-1-5-43-1).

- [1] Ocaña M., Morales M.P., Serna C.J. The growth mechanism of α -Fe₂O₃ ellipsoidal particles in solution // J Colloid Int Sci. 199 5.Vol. 171.P. 85.
[2] Mullin J. Crystallization. London (1972). P. 473.
[3] Kertis F., Khurshid S., Okman O., et al. Heterogeneous nucleation of protein crystals using nanoporous gold nucleants. J Mater Chem. 2012. Vol. 22. P. 21928.

Влияние состояния жидкой фазы на процессы кристаллизации расплавов Cr-Fe-C

И.В. Стерхова¹, Л.В. Камаева¹, К.Ю. Ярышкина², В.И. Ладьянов¹

¹Удмуртский федеральный исследовательский центр УрО РАН, 426067 Россия, г. Ижевск, ул. Т. Барамзиной 34

²Удмуртский государственный университет, 426034 Россия, г. Ижевск, ул. Университетская 1

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]. Кроме того, эта система является базовой композицией для создания объемно-аморфных сплавов на основе Fe, проявляющих высокие механические, магнитные и коррозионные свойства, которые способствуют их обширному практическому применению [3]. Высокая износостойкость сплавов Cr-Fe-C обеспечивается наличием большого количества карбидной фазы с высокой твердостью, в частности карбидов M_7C_3 и $M_{23}C_6$ [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 [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]. Кроме того, τ -фаза $M_{23}C_6$ является фазой-стеклообразователем для объемно-аморфных сплавов на основе переходных металлов [3]. Помимо выбора химического состава сплава его структура и свойства определяются состоянием жидкой фазы перед затвердеванием и условиями охлаждения [4]. Проведенные ранее исследования [5] показали, что в расплавах Cr-C вблизи эвтектического состава наблюдается изменение ближнего упорядочения при повышении температуры жидкой фазы, которое оказывает влияние на механизм кристаллизации карбида $Cr_{23}C_6$. В связи с этим в данной работе проведены исследования температурного и концентрационного поведения кинематической вязкости расплавов системы Cr-Fe-C и процессов их кристаллизации. В качестве объектов исследования выбран концентрационный интервал включающий составы вблизи эвтектики, в которых присутствует карбидные фазы $M_{23}C_6$ и M_7C_3 .

Кинематическую вязкость (ν) 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

Всероссийская конференция

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%. Исследование процессов кристаллизации расплавов Cr-Fe-C проводили методом дифференциального термического анализа на высокотемпературном анализаторе (ВТА 983), рентгеноструктурного анализа и металлографии. Термограммы ДТА получали в режиме нагрева со скоростью $20^\circ/\text{мин}$ от 100 до 1650°C и последующего охлаждения со скоростью $100^\circ\text{C}/\text{мин}$, после 20 мин. выдержки при максимальной температуре жидкой фазы. По полученным термограммам нагрева и охлаждения определяли температуры всех этапов плавления (в режиме нагрева) и кристаллизации (в режиме охлаждения) для каждого сплава, а также переохлаждение как разность температуры ликвидус, определенной из термограммы нагрева и температуры начала кристаллизации определенной из термограммы охлаждения.

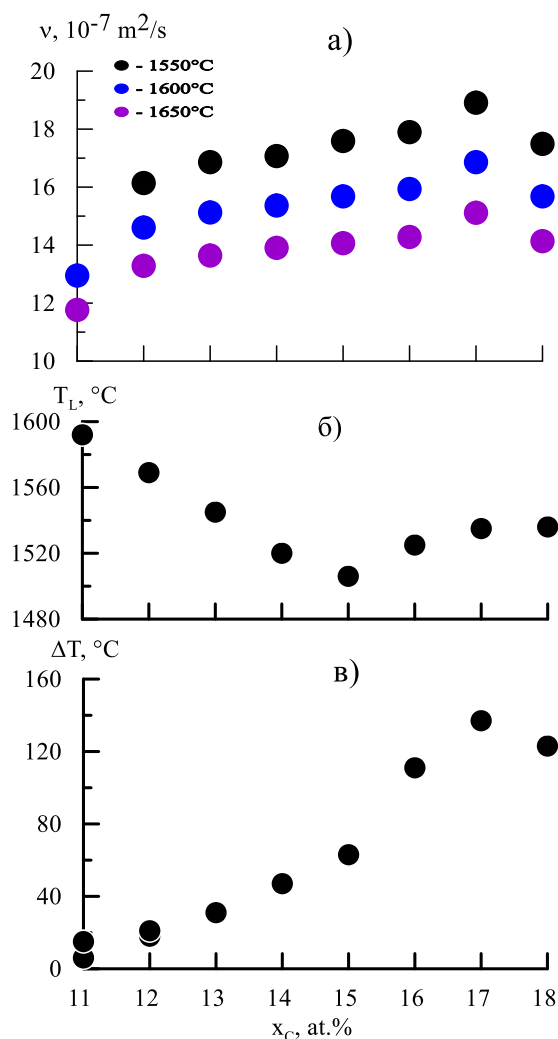


Рисунок 1. Концентрационные зависимости кинематической вязкости (а), линии ликвидус (б) и величины переохлаждения (в) расплавов $\text{Cr}_{88-x}\text{Fe}_{12}\text{C}_x$ ($x=11-18$ ат. %).

Исследование кинематической вязкости расплавов $\text{Cr}_{88-x}\text{Fe}_{12}\text{C}_x$ ($x=11-18$ ат. %) показало, что температурные зависимости вязкости исследованных расплавов в режимах нагрева и последующего охлаждения совпадают и характеризуются

Всероссийская конференция

монотонными зависимостями аррениусовского типа. По политермам ν были построены концентрационные зависимости вязкости расплавов Cr-Fe-C. Изотермы вязкости имеют не монотонный характер. С увеличением концентрации углерода в сплаве наблюдается повышение значений вязкости исследованных расплавов. Повышение концентрации углерода в расплаве до 17 ат. % приводит к росту вязкости, а затем значения вязкости снижаются, что приводит к максимуму ν при 17 ат.% C. При повышении температуры расплава характер изотерм вязкости не меняется. Наблюдаемые особенности свидетельствуют об изменении взаимодействия между атомами в жидком состоянии. Для общего анализа изменения характера химического взаимодействия в системе Cr-Fe-C в исследуемой области концентраций были проведены исследования линии ликвидус, которая приведена на рисунке 1б. Из рисунка видно, что при 15 ат.% C наблюдается минимум, который должен соответствовать концентрации инвариантного равновесия. При этом в области 17 ат.% C, в которой наблюдается максимум на изотермах ν , температуры ликвидус сплавов слабо изменяются. Поэтому наблюдаемая особенность на концентрационной зависимости вязкости не связана с видом диаграммы состояния и указывает на усиление химического взаимодействия между атомами только в жидком состоянии. Однако исследование концентрационной зависимости переохлаждения показывает, что обнаруженная особенность проявляется при кристаллизации. Из анализа термограмм охлаждения видно, что переохлаждение в условиях которого начинается кристаллизация расплавов Cr-Fe-C в исследованном концентрационном интервале немонотонно изменяется с ростом концентрации углерода в сплаве. На концентрационной зависимости переохлаждения также наблюдается ярко выраженный максимум в области 17 ат.% C.

Таким образом, проведенные исследования показали, что наблюдаемые в области 17 ат.% C изменения структурного состояния расплавов $\text{Cr}_{88-x}\text{Fe}_{12}\text{C}_x$ ($x=11-18$ ат.%), характерные только для жидкого состояния, оказывают влияние и на процесс кристаллизации этих расплавов.

Круглый стол

**Применение метода фазового поля
и термодинамических расчетов (метод CALPHAD)
в науке о материалах и промышленности**

**«КРУГЛЫЙ СТОЛ» КОНФЕРЕНЦИИ:
Метод фазового поля и термодинамическое моделирование**

П. К. Галенко¹, О.Б. Фабричная²

¹Удмуртский государственный университет, 426034 Россия, г. Ижевск, ул. Университетская 1

²Институт Геохимии и Аналитической Химии им. В.И. Вернадского РАН, 119334 Россия, г. Москва, ул. Косыгина 19

Метод фазового поля основан на теории фазовых переходов и представляет элегантное и термодинамически согласованное решение задач об эволюции полей переноса и фазовых границ с образованием микро- и нано-структур произвольной морфологии [1-6]. В отличие от методов и моделей с резкой границей, имеющей нулевой энергетический вклад, метод фазового поля учитывает диффузность фазовой границы конечную пространственную ширину. В этом случае полная энергия образца включает объемные вклады фаз с дополнительным вкладом энергии интерфейса.

На атомном уровне анализа упорядоченная фаза (кристалл) имеет периодическую последовательность плоскостей решетки с дальним порядком в пространстве. В неупорядоченной фазе (которая представлена жидкостью, паром или замороженным стеклом) случайное расположение атомов или кластеров образует только ближний структурный порядок. В диффузной границе, представляющей переходную область между фазами конечной ширины (3–5 атомных расстояний для металлов), структурный порядок в атомном расположении увеличивается с пространственным переходом от неупорядоченной фазы к упорядоченной фазе.

Для характеристики перехода из неупорядоченной в упорядоченную фазу феноменологически вводится пространственно-временная функция фазового поля ϕ как огибающая максимумов локальной атомной плотности. В самом простейшем описании эволюция фазового поля описывается уравнением

$$\frac{1}{M(\phi)} \frac{\partial \phi}{\partial t} = \varepsilon_{\phi}^2 \nabla^2 \phi - \Delta G \frac{dp(\phi)}{d\phi} - W_{\phi}(T, C) \frac{dg(\phi)}{d\phi} \quad (1)$$

Здесь: левая часть уравнения описывает релаксацию фазового поля, а правая часть уравнения указывает на причины, приводящие к локальному изменению ϕ во времени из-за пространственной неоднородности, описываемой $\nabla^2 \phi$, изменения интерполяции $p(\phi)$ между фазами при изменении фазового поля, что определяется $dp(\phi)/d\phi$, а также изменения рельефа $g(\phi)$ фазового поля, благодаря вкладу $dg(\phi)/d\phi$. Коэффициенты уравнения (1) определяют мобильность $M(\phi)$ фазового поля, энергию ε_{ϕ}^2 диффузной границы, а также энергетический барьер $W_{\phi}(T, C)$ между фазами, зависящий от температуры T и концентрации C различных частиц (атомов, молекул или кластеров). Особое значение в уравнении (1) имеет движущая сила ΔG фазового превращения. Она

Всероссийская конференция

определяется разностью свободных энергий Гиббса между фазами и количественно определяется на основе методов вычислительной термодинамики.

Вычислительная термодинамика является мощным инструментом для решения различных задач материаловедения, в частности, используется при построении фазовых диаграмм. Расчет фазового равновесия основан на минимизации энергии Гиббса системы, которая является суммой энергий Гиббса отдельных фаз, умноженных соответственно на их мольное количество, или с использованием условия равенства химического потенциала для компонентов в равновесных фазах.

Энергия Гиббса отдельной фазы математически описывается термодинамической моделью, представляющей ее зависимость от температуры, давления и состава [7]. Таким образом, фазовые диаграммы связаны с термодинамическими свойствами отдельных фаз, которые также могут быть определены экспериментально с использованием калориметрии, измерений давления паров и электрохимических данных. Эти различные виды данных используются для оптимизации термодинамических параметров модели одновременно воспроизводящих как фазовые диаграммы, так и экспериментальные термодинамические данные. Полученный набор термодинамических параметров отдельных фаз может быть использован для расчета различных видов фазовых диаграмм. Таким образом, метод CALPHAD является процедурой оптимизации, которая позволяет получить набор термодинамических параметров, описывающих энергии Гиббса отдельных фаз в соответствии с выбранными моделями. Энергии Гиббса элементов в их стабильном и метастабильном состоянии были описаны Динсдейлом [8] с помощью выражения

$$G_i^\theta - H_i^{SER} = a_1 + a_2T + a_3T \ln T + a_4T^2 + a_5T^{-1} + a_6T^3 + a_7T^7 + a_8T^{-9} + \dots \quad (2)$$

где H_i^{SER} — энтальпия элемента i в его стабильном состоянии при 298,15 К и давлении 1 бар (стандартное состояние). Энергия Гиббса стехиометрического соединения описывается аналогичной функцией. Для описания энергии Гиббса такого соединения необходима энтальпия его образования при 298,15 К $\Delta_f H_{298,15}^\circ$, стандартная энтропия $S_{298,15}^\circ$ и температурная зависимость теплоемкости C_p .

Простейшей моделью раствора является модель замещения с энергией Гиббса, представленной выражением

$$G_m = {}^{srf}G_m - T {}^{cnf}S_m + {}^E G_m = \sum_{i=1}^n x_i {}^\circ G_i + RT \sum_{i=1}^n x_i \ln(x_i) + {}^E G_m \quad (3)$$

В бинарной системе избыточная энергия ${}^E G_m$, описывающая отклонение от идеальности, часто выражается функцией Редлиха–Кистера

$${}^E G_m = x_i x_j \sum_{v=0}^n (x_i - x_j)^v \cdot {}^v L_{i,j} \quad (4)$$

где $L_{i,j}$ — параметр смешения компонентов i и j .

Всероссийская конференция

Модель замещения используется для описания жидких металлических сплавов, а также твердых растворов, в которых все кристаллографические позиции эквивалентны. Для моделирования твердых растворов и соединений с областью гомогенности используется подрешеточная модель [9], учитывающая, что смешение происходит на разных кристаллографических позициях.

Следует отметить, что термодинамические данные некоторых компонентов очень хорошо определены и не должны быть оптимизированы, другие параметры, такие как параметры смещения компонентов раствора и энергия Гиббса метастабильных конечных членов твердых растворов, должны быть оптимизированы. Термодинамические свойства промежуточных соединений обычно также должны быть оптимизированы. Целью метода CALPHAD является получение согласованного описания всех фаз, которые могут существовать в системе, при этом измеренные экспериментально термодинамические свойства и фазовые диаграммы должны быть воспроизведены в пределах погрешности измерений. Самосогласованная термодинамическая база данных позволяет прогнозировать фазовые соотношения и термодинамические свойства в областях, где экспериментальная информация недоступна, а также рассчитывать метастабильные фазовые диаграммы, рассчитывать бездиффузионные превращения и моделировать неравновесные процессы, предполагая локальное равновесие. Методология метода CALPHAD и основные принципы разработки термодинамических баз данных описаны в ряде книг и фундаментальных исследованиях [7, 9-11].

- [1] Boettinger W.J., Warren J.A., Beckermann C., Karma A. Phase field simulation of solidification // *Annu. Rev. Mater. Res.*, 2002. Vol. 32. P. 163
- [2] Emmerich H. // *The Diffuse Interface Approach in Materials Science*, Springer, Berlin (2002)
- [3] I. Steinbach, Phase-field models in materials science // *Model. Simul. Mater. Sci. Eng.*, 2009. Vol. 17. P. 1.
- [4] Provatas N., Elder K. // *Phase-Field Methods in Materials Science and Engineering*, Wiley-VCH, Weinheim (2010)
- [5] Galenko P.K., Ankudinov V., Starodumov I. // *Phase-Field Crystals: Fast Interface Dynamics*, De Gruyter, Berlin (2018)
- [6] Galenko P.K. // *Phase Field Theory in Materials Physics*, Springer, Berlin (2024)
- [7] Lukas H.L., Fries S.G., Sundman B. // *Computational thermodynamics*, Cambridge Univ. Press, Cambridge (2007)
- [8] Dinsdale A.T. SGTE data for pure elements // *Calphad*, 1991. Vol. 15. P. 317.
- [9] Hillert M. The compound energy formalism // *J. Alloys Compd.*, 2001. Vol. 320. P.161.
- [10] Kaufman L., Bernstein H. // *Computer calculation of phase diagrams with special reference to refractory metals*, Academic Press Inc, New York, (1970)
- [11] Saunders N., Miodownik A.P. // *CALPHAD Calculation of Phase Diagram. A Comprehensive Guide*, Pergamon, Oxford (1998)

Оглавление

От редакции	- 4 -
Секция I. Теория и эксперимент процессов затвердевания. Рост и морфология кристаллов.	5
Плавление в двух и трех измерениях – теоретические подходы и компьютерное моделирование	
В.Н. Рыжов, Ю.Д. Фомин, Е.Н. Циок	6
Неравновесные эффекты при росте кристаллов	
П. К. Галенко	8
Универсальное распределение кристаллов по размерам на заключительной стадии фазового превращения: коагуляция и остwaldово созревание	
Д. В. Александров, Е. В. Маковеева	9
Атомистическое моделирование кристаллизации и плавления в металлических сплавах с помощью машинно-обучаемых межатомных потенциалов	
Р.Е. Рыльцев, Н.М. Щелкачев, Е.О. Хазиева, И.А. Балякин, Н.С. Пикалова, А.О. Типеев	12
Калибровочные теории стекла	
Л. Д. Сон, М. Г. Васин	14
Особенности кристаллизации сплавов на основе железа и кобальта из жидкого и аморфного состояний	
В. Е. Сидоров, Б. А. Русанов, П. С. Попель, Л. Д. Сон, С. А. Петрова, К. Ю. Шуняев, В. И. Ладынов	15
Рост кристаллов и формирование аморфной структуры в мезоскопической модели стеклования	
Анкудинов В. Е., Васин М. Г.	17
Анализ микроструктур на границе контактного плавления сплавов на основе систем Al-Mg и Al-Zn	
Е. А. Баталова, Л. В. Камаева, И. В. Шутов, М. Д. Кривилев, М. Н. Королев	19

Всероссийская конференция

Экспериментальное исследование и численное моделирование усталостной прочности металлических сплавов, полученных методом селективного лазерного плавления

А.Д. Никитин, И.С. Никитин..... 21

Новые теоретические и экспериментальные данные о затвердевании как двухстадийном процессе

И. А. Иванов, А. В. Дуб, В. В. Дрёмов, К. Э. Купер, М. Д. Кривилев, Е. Б. Черепецкая, В. С. Дуб..... 24

Влияние экстремальных (термобарических) воздействий на структуру и свойства сплавов Al-PM-P3M при охлаждении их расплавов

С. Г. Меньшикова 28

К вопросу о диспергировании и коагуляции при разделении фаз в расплавах Co-Cu

О. А. Чикова 29

Особенности формирования морфологии и структурно-фазового состава поверхностных слоев титанового сплава VT6 в зависимости от температуры ионно-плазменного азотирования

В.Л. Воробьёв, В.С. Гладышева, С.Г. Быстров, П.В. Быков, В.Я. Баянкин..... 32

Системное моделирование литой микроструктуры стали 110Г13Л

Добош Л.Ю., Феоктистов Н.А., Голод В.М. 35

Рост кристаллов в пересыщенном растворе с учётом двухступенчатого механизма

Е. В. Маковеева 38

Влияние температуры расплава на вязкость, переохлаждение и процессы кристаллизации сплава Ni₆₀Nb₄₀

И.В. Стерхова, А. Л. Бельтюков, В.И., Ладьянов 41

Фазовый состав и физические свойства высокоэнтропийных сплавов AlNiCoCuZr в твёрдом и жидком состояниях

Б. А. Русанов, В. Е. Сидоров, Л. Д. Сон, Э. А. Карфидов, С. А. Петрова, А. И. Русанова 44

Всероссийская конференция

Особенности гомогенного плавления металла при ультракоротком сверхмощном воздействии лазерного излучения

В.И. Мажукин, А.В. Шапранов, М.М. Демин, О.Н. Королева, А.В. Мажукин 46

Развитие теории роста кристаллов в переохлажденных эвтектических расплавах

М. В. Дудоров, А. Д. Дрозин, В. Е. Рошин 48

Анализ процесса неравновесной кристаллизации металла шва сварного соединения легированной Nb аустенитной Cr-Ni-Si стали

Л. В. Палаткина, П. А. Алексеёнок 50

Метод граничного интеграла для задач кристаллизации в ограниченной области

Е. А. Титова, Д. В. Александров 53

Исследование возможностей метода термического анализа для прогнозирования структуры отливок из нелегированных чугунов

А.М. Шишкин, Д.А. Гуртовой, А.Г. Панов 55

Немонотонные релаксационные процессы в расплавах галлия и алюминия с редкоземельными металлами

А. И. Русанова, Л. Д. Сон, А. Л. Бельтюков, Б. А. Русанов, В. Е. Сидоров, В. И. Ладьянов 58

Структура сплавов $Al_{66}Cu_{24}Ni_{10}$, полученных в разных условиях затвердевания

А.Л. Алтунян, Л.В. Камаева 60

К вопросу о зарождении и росте кристаллов перед подвижной межфазной границей твёрдая фаза - расплав

А.Е. Глебова, Д.В. Александров 62

Кинетика кристаллизации аморфных лент на основе кобальта

Коваленко Д.А. , Быков В.А. , Куликова Т.В. , Евдокимов И.В. , Ягодин Д.А. 65

К вопросу о кристаллизации с двухфазной областью при наличии слабого натекания расплава

И.Е. Корозникова, Д.В. Александров 68

Всероссийская конференция

- Переохлаждения эвтектических сплавов в системах: дифенилметан-дифенил, нафталин-дифенилметан
Е.А. Покинтелица, О.В. Соболев, С.А. Фролова 70
- Описание поперечных коллективных возбуждений в жидкости Юкавы в рамках самосогласованной релаксационной теории
И. И. Файрушин, А. В. Мокшин 72
- Нуклеация на ультрадисперсных частицах с учетом размерных эффектов
А. Н. Черепанов, В. К. Черепанова 73
- Моделирование и исследование процессов нуклеации и роста газовых гидратов метана
М. Б. Юнусов, А. В. Мокшин 76
- Электрохимическое осаждение композиционных покрытий никеля с добавлением двумерного карбида титана (MXene)
А.Е. Берёзкина, И. К. Аверкиев 78
- Термический гистерезис в исследовании неравновесных фазовых превращений плавления/кристаллизации благородных металлов под воздействием ультракороткого лазерного излучения
О.Н. Королева, В.И. Мажукин, А.В. Шапранов, М.М. Демин, А.В. Мажукин 80
- О «первичной», «вторичной» и «третичной» макроструктуре отливок из коррозионностойкой стали мартенситного класса микролегированной ниобием
Л. В. Палаткина, А. П. Куликов, И. А. Щепкин, С. В. Новиков 82
- Области легкого стеклования в трехкомпонентных металлических системах Sc-Co-Al и Gd-Co-Al
Е. С. Подкин, П. В. Котенков, А. В. Майорова 85
- Плотность и электрическое сопротивление сплавов CoFeSiBNb и FeNiBSiNb при высоких температурах
Б. А. Русанов, В. Е. Сидоров, П. С. Попель, А. И. Русанова 88

Всероссийская конференция

Форма дендритного кристалла: геометрико-морфологическая теория в сравнении с экспериментом

Л.В.Торопова, П.К.Галенко, Д.В.Александров..... 89

Атомистическое моделирование структуры, термодинамических свойств и фазовых превращений в сплавах Ti-Al с помощью машинно-обучаемых межатомных потенциалов

Е.О. Хазиева, Р.Е. Рыльцев, И.А. Балякин, Д.О. Закирьянов, М.В. Петрик 92

Секция II. Металлургические и литейные технологии. Системы САПР. Метод фазового поля и расчет микроструктур 95

Некоторые актуальные проблемы теории и практики затвердевания конструкционных сталей

В. С. Дуб, А. Н. Мальгинов, А. Н. Тохтамышев, М. С. Соловьёва, И.А. Иванов . 96

Эксперимент и термодинамическое моделирование в оксидных системах представляющих интерес для получения направленно закристаллизованных эвтектик

О.Б. Фабричная 101

Электровихревые течения расплавленного металла в цилиндрической ячейке в условиях воздействия внешних магнитных полей

И. В. Колесниченко, В. А. Ельтищев 104

Особенности микроликвационных процессов и распределения легирующих элементов в слитке конструкционной стали

Тохтамышев А.Н., Иванов И.А., Палаткина Л.В., Мальгинов А.Н., Дуб В.С.... 107

Многофазные модели фазового поля: проблемы и перспективы

В.Г.Лебедев..... 109

Фазово-полевое описание процесса формирования микроструктуры бинарной системы при неизотермическом затвердевании со взаимодействием фаз переменного и постоянного составов

С. А. Коробейников, В. Г. Лебедев, В. И. Ладьянов 111

Всероссийская конференция

Показатели качества проката инструментальных легированных сталей, изготовленного из непрерывнолитой заготовки

С. А. Зинченко, Н.Н. Васильева, В.С. Клековкин 113

Фазово-полевая модель роста нескольких стехиометрических фаз в бинарном сплаве

В.А.Копытов..... 116

Применение CALPHAD-метода в пакете LVMFlow

Л. И. Романов 119

Макроскопическое затвердевание бинарных растворов с учетом фазового состава

А.А.Лебедева, В.Г.Лебедев, В.В.Лебедев..... 121

Особенности кристаллизации синтетического чугуна в условиях получения полых отливок способом непрерывно-циклического литья намораживанием

М. С. Соловьева, В. П. Груша, Л. В. Палаткина 124

Перемешивание включений при кристаллизации слитков

В. А. Ельтищев, Г. Л. Лосев, А. Д. Мамыкин, И. В. Колесниченко 127

Влияние способа разлива на формирование качества кузнечных слитков

А.Н. Мальгинов, В.С. Дуб, И.А. Иванов, А.Н. Тохтамышев, М.А. Стрижов..... 129

Численное моделирование процесса МГД-перемешивания примеси в цилиндрической ячейке

Р. С. Окатьев, Г. Л. Лосев, И. В. Колесниченко 132

Влияние формы углерода на волновое горение системы Ti-Si-C

Н.С. Ларионова, Р.М. Никонова, В.И. Ладьянов 135

О структурных особенностях быстрозакаленных лент промышленного сплава системы Fe-Si-B-Nb-Cu и их влиянии на кристаллизацию и магнитные свойства

Коновалов М.С., Ладьянов В.И., Тумаков Н.Ю., Суслов А.А., Бабкин С.Э., Ардашева Д.П..... 137

Всероссийская конференция

Влияние состояния расплава на структуру и свойства литого металла

Е.Е. Барышев, А.Г. Тягунов, И.В. Вандышева, Г.В. Тягунов 140

Моделирование жаропрочности и структурно-фазовой стабильности сплавов на основе никеля

А.Г. Тягунов, Е. Е. Барышев, О.Б. Мильдер, Д.А. Тарасов 143

Разработка конструктивного исполнения корпуса авиационного шестеренного насоса

В.С. Вишняков, А.А. Леонов, Е.А. Гашев..... 146

Математическое моделирование заполнения заливочной чаши при заливке из шиберного ковша

Удод П.А., Кадочников С.В., Нуралиев Ф.А., Ковалевич Е.В. 149

Технологический подход к предотвращению азотной пористости слитков из супердуплексной стали

К.Н. Уткина, Л.Я. Левков, Е.Л. Корзун, А.В. Монастырский, Тохтамышев А.Н., Е.И. Ярополова, Климов Д.А., Калмыков А.А. 151

Влияние легирующих элементов Nb и Mo на вязкость расплавов Co-Cr-Fe-Si-B

Д.С. Коробейникова, И.В. Стерхова, Л.В. Камаева, В.И. Ладьянов, Молоканов В.В. 154

Секция III. Междисциплинарные вопросы. Высокоскоростное затвердевание. Аддитивные технологии 157

Многоматериальное прямое лазерное выращивание: механизмы трещинообразования на границах сталь - бронза и их многоуровневый анализ

К. И. Макаренко, М. М. Мурашев, И. В. Шишковский..... 158

Трансферное обучение и дизайн многокомпонентных металлических сплавов

Н. М. Щелкачев, Р. Е. Рыльцев..... 160

Многоуровневая конститутивная модель для описания механических свойств образцов стали 308LSi, полученных методом дуговой наплавки

Н. С. Кондратьев, Э.Р. Шарифуллина, А.Н. Подсердцев, А.А. Вшивкова, К.А. Романов, Д.С. Безверхий, К.А. Курмоярцева 163

Всероссийская конференция

Исследование механизма спекания порошка карбида кремния под воздействием лазерного излучения

Бубнёнков Б.Б., Жармухамбетов А.С., Иванов И.А., Нарзуллоев У.У. 166

Многоуровневая статистическая модель динамической рекристаллизации и ее применение для описания технологических процессов

Д. С. Безверхий, Н. С. Кондратьев..... 169

Эффект температурных колебаний в зоне расплава в технологиях лазерной 3Д-печати

С. Л. Ломаев, Г. А. Гордеев, М. А. Тимиргазин, Д. Р. Фатгалова, М. Д. Кривилев 172

Комплексное описание механических свойств пористого материала

Г. А. Никифоров, Б. Н. Галимзянов, А. В. Мокшин..... 175

Аномалии, наблюдаемые при измерении вязкости металлических расплавов методом крутильных колебаний, их природа и механизмы

А.Л. Бельтюков 177

Изменение механизма затвердевания заэвтектических сплавов Al-Si при увеличении скорости охлаждения расплава

О. В. Гусакова, В. Г. Шепелевич 180

Особенности формирования микроструктуры и коррозионного поведения никелевого сплава изготовленного методом ЭЛАП

Е. А. Бельтюков, А. Ю. Жияяков, Д. В. Пырин, Р. Р. Алимгулов 182

Селективное лазерное плавление тонкостенных сетчатых конструкций

П.Н. Килина, А.А. Дроздов..... 185

Совершенствование технологии изготовления воздушных фурм доменных печей применяя CALPHAD методики

Бахтеев И.С., Олейник К.И., Литвинюк К.С., Валиев Р.М., Фурман Е.Л., 187

Всероссийская конференция

Подбор оптимального состава покрытия для модификации элементов верхнего строения пути после оплавления применяя CALPHAD методики

Киселев М.В. , Бахтеев И.С., Олейник К.И. , Литвинюк К.С., Жилина Е.М., Шанчуров С.М. , Гойда Э.Ю. 189

Эволюция состава прессовки Ti-CuO в условиях реакционного спекания

В. С. Сафронова, А. Г. Князева, Е. Н. Коростелева..... 191

Основы и особенности кристаллографического строения разнородных сварных соединений сталей аустенитного и перлитного класса

Ходаков Д.В., к.т.н., Феклистов С.И., д.т.н., Потапов Н.Н., д.т.н., Ходаков В.Д., к.т.н..... 193

Термодинамическое моделирование химических реакций при формировании покрытий методом лазерной наплавки

М. Д. Кривилев, Е. В. Коробейникова, С. М. Решетников, Е. В. Харанжевский 196

Комплексное изучение статических механических свойств нержавеющей стали 316Lsi, полученной методом проволочно-дуговой наплавки

А. В. Ильиных, А.М. Паньков..... 197

Моделирование динамической рекристаллизации: анализ эксплуатационных свойств функциональных материалов-изделий

А.Н. Подседерцев, Н.С. Кондратьев, М.Н. Балдин, Д.С. Безверхий 199

Особенности формирования магнитных состояний в сплаве Fe-Al

К. Г. Слободчиков, М. А. Тимиргазин, А. К. Аржников 202

Газофазное нитрирование поверхности титана короткими лазерными импульсами

И.В. Смирнов, Е.В. Харанжевский 204

Магнетокалорический эффект в Cu-допированных манганитах неодима-стронция

В.Я. Митрофанов, С.Х. Эстемирова, Л.А. Черепанова..... 205

Секция молодых ученых 208

Всероссийская конференция

Сравнительный анализ структуры и свойств сплавов Al-Cu-Co, полученных в условиях нормального и высокого давлений

Ю.И.Бронникова, Л.В.Камаева, В.В.Бражкин 209

Влияние траектории движения луча лазера на коробление нержавеющей стали 316L в процессе СЛП

Р. С. Коньшин, Е. В. Харанжевский 211

Применение лазерной обработки поверхности высоколегированных сталей для изменения структуры с целью повышения коррозионной стойкости

Е. В. Коробейникова, С. М. Решетников, М. Д. Кривилев, А.С. Широбокова, Е.А. Дурман 213

Влияние структуры материала на механические свойства изделия в лазерных аддитивных технологиях

Р. М. Мосина , М. Д. Кривилев , К. А. Романов 214

Влияние экстремальных воздействий на структуру заэвтектических сплавов Al-Co

Т. М. Сабурова, С. Г. Меньшикова 216

Моделирование движения фазовой границы при растворении алюминиевой пластины цинковым припоем

И.Р. Салтыков, С.А. Груздь, И.В. Шутов 219

Влияние графита на триботехнические свойства стали, поверхностно легированной оксидом висмута

А.С. Широбокова, Е. В. Харанжевский 221

Физико-математическое моделирование полидисперсного ансамбля частиц в форме вытянутых и сплюснутых эллипсоидов вращения

М. А. Никишина, Д. В. Александров 223

Влияние состояния жидкой фазы на процессы кристаллизации расплавов Cr-Fe-C

И.В. Стерхова, Л.В. Камаева, К.Ю. Ярышкина, В.И. Ладьянов 224

Всероссийская конференция

Круглый стол

Метод фазового поля и термодинамическое моделирование

П. К. Галенко, О.Б. Фабричная 228

Оглавление..... 231

Научное издание

Кристаллизация: компьютерные модели, эксперимент, технологии

Тезисы

X Всероссийской конференции
26–29 марта 2025 года, г. Ижевск, УдГУ

Редакционная коллегия:

П. К. Галенко (гл. ред.), д.ф.-м.н., проф., УдГУ

М. Д. Кривилев, д.ф.-м.н., зав. лаб., УдГУ

Е. В. Харанжевский, д.т.н., проф., УдГУ

В. Е. Анкудинов, к.ф.-м.н., н.с., ИФВД РАН, г. Москва

Авторская редакция

Подписано в печать 23.03.2025 Формат 60×84 1/16.
Электронное издание

Издательство Удмуртский университет
426067, г. Ижевск, ул. Университетская, 1, корп. 2