

МОДЕЛИРОВАНИЕ МОДИФИЦИРОВАНИЯ ПОВЕРХНОСТНОГО СЛОЯ МЕТАЛЛА НАНОЧАСТИЦАМИ ПРИ ИМПУЛЬСНОМ ИНДУКЦИОННОМ НАГРЕВЕ

В.Н. Попов

А.Н. Черепанов

В.Г. Щукин

popov@itam.nsc.ru

ancher@itam.nsc.ru

schukin_vg@ngs.ru

Институт теоретической и прикладной механики им. С.А. Христиановича СО РАН,
Новосибирск, Российская Федерация

Аннотация

Исследована возможность применения высокочастотного электромагнитного поля для нагрева и плавления металла в целях его последующего модифицирования. Проведено численное моделирование процессов при модифицировании поверхностного слоя металла в подложке. Поверхность подложки покрыта слоем специально подготовленных наноразмерных тугоплавких частиц, которые после проникания в расплав служат активными центрами кристаллизации. С помощью предлагаемой математической модели, описывающей термо- и гидродинамические явления, рассмотрены процессы, включающие в себя нагрев металла, его плавление, конвективный теплоперенос в расплаве и затвердевание после окончания импульса. Распределение электромагнитной энергии в металле описано эмпирическими формулами. Плавление металла рассмотрено в приближении Стефана, а при затвердевании предположено, что все наночастицы являются центрами объемно-последовательной кристаллизации. Течение жидкости описано уравнениями Навье — Стокса в приближении Буссинеска. Распределение наночастиц в расплаве смоделировано перемещением маркеров. По результатам численных экспериментов оценена структура течения в расплаве в зависимости от количества поверхностно-активной примеси в металле. Определены режимы импульсного индукционного воздействия, способствующие формированию течений для однородного распределения частиц модифицирующего вещества. Установлено, что применение импульсов высокочастотного электромагнитного поля для нагрева и плавления металла позволяет модифицировать металл глубже, чем при использовании лазера. Рассмотрены характеристики объемной и последовательной кристаллизации, а также роста твердой фазы. Получены оценки размеров двухфазной зоны и зоны метастабильного состояния, когда доля кристаллической фазы возрастает очень медленно и практически близка нулю

Ключевые слова

Численное моделирование, модифицирование металла, импульсный индукционный нагрев, теплоперенос, наноразмерные тугоплавкие частицы, кристаллизация

Поступила в редакцию 23.03.2017
© МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2018

Введение. Одним из перспективных способов улучшения эксплуатационных свойств деталей является модифицирование расплава при лазерной обработке их поверхностей подготовленными наноразмерными частицами тугоплавких соединений (карбиды, нитриды, карбонитриды и др.), что позволяет увеличить число центров кристаллизации и измельчить структурные составляющие затвердевшего металла, повышая его однородность [1–3]. Наряду с широким использованием лазеров при легировании и модифицировании поверхностного слоя металла возможно применение энергии высокочастотного индукционного поля [4, 5]. Вместе с тем возможности подобной технологии недостаточно изучены, особенно в части применения наноразмерных модификаторов для улучшения структуры материала [6].

При исследовании процессов, происходящих в поверхностном слое металла под воздействием лазерного импульса, определено, что одним из главных факторов, влияющих на эффективность модифицирования, является термокапиллярная конвекция, которая при определенных условиях может способствовать гомогенному распределению вносимых материалов, проникающих в ходе подплавления в расплав [7, 8]. Влияние растворенных в расплаве поверхностно-активных веществ (ПАВ) на характер конвекции рассмотрено в работах [9–12], там же определено, что структура течений в расплавленном металле зависит от состава и количества присутствующих в нем примесей. В связи с этим возможные изменения технологии модифицирования поверхности делают необходимым детальное исследование происходящих процессов с учетом большего числа влияющих факторов.

В настоящей работе с использованием численного моделирования рассмотрено воздействие импульса высокочастотного электромагнитного поля на распределение модифицирующего материала, проникающего в подложку с ее поверхности при наличии в металле ПАВ. В качестве объекта исследований использован сплав железа ($\text{Fe} + 0,42\%$ по массе углерод $\text{C} + 0,001 \dots 0,02\%$ сера S), выбранный в связи с наличием значений физических параметров, необходимых для проведения расчетов и анализа происходящих процессов [13, 14]. С помощью предлагаемой математической модели, описывающей термо- и гидродинамические явления, описаны нестационарные процессы, включающие в себя нагрев металла, его плавление, конвективный теплоперенос в расплаве и далее, после окончания импульса, затвердевание. По результатам численных экспериментов определены условия импульсного воздействия на подложку, связанные с количеством ПАВ в металле, способствующие гомогенному распределению модифицирующих наноразмерных частиц в расплаве, а также характеристики кристаллизации и роста твердой фазы.

Математическая модель и алгоритм реализации. Рассмотрим воздействие импульса высокочастотного электромагнитного поля на металлическую подложку. Схема процесса приведена на рис. 1. Цилиндрическая головка индуктора электромагнитного поля расположена над плоской поверхностью пластины из сплава железа. Продолжительность импульса t_H . Индукционное воздействие

осуществляется через пятно радиусом r_0 . Распределение электромагнитной энергии в металле описывается эмпирическими формулами, используемыми в инженерных тепловых расчетах индукционных нагревателей [15]. Поверхность подложки покрыта слоем специально подготовленных модифицирующих наноразмерных частиц тугоплавкого соединения, которые после проникания в расплав служат активными центрами кристаллизации [1, 2]. Под воздействием энергии металл нагревается и плавится. Фазовый переход происходит при температуре плавления материала подложки T_m . В образовавшейся и увеличивающейся со временем жидкой лунке развивается конвекция под действием капиллярных и термогравитационных сил. Смачиваемые частицы под действием конвективных потоков проникают в глубину расплава. На границе фазового перехода выполняются условия прилипания. После завершения импульса за счет теплообмена с окружающей средой и отвода теплоты в неразогретый материал подложки происходит остывание расплава и его объемно-последовательная кристаллизация в предположении, что все проникшие модифицирующие частицы являются ее центрами.

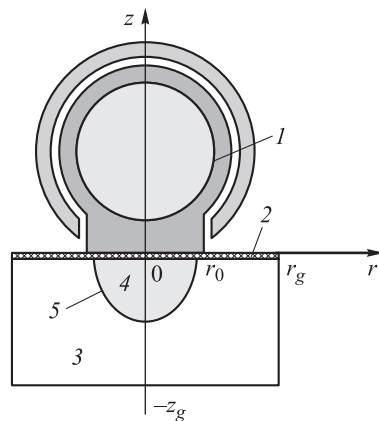


Рис. 1. Схема воздействия индукционного импульса:

z_g , r_g — глубина и радиус рассматриваемой области в подложке; 1 — индуктор с охватывающим ферритовым магнитным экраном; 2 — частицы модифицирующего материала на поверхности подложки; 3 — металлическая подложка; 4 — расплав; 5 — граница проплавленной зоны

Для упрощения задачи полагаем, что теплофизические характеристики жидкой, твердой и двухфазной сред одинаковые и не зависят от температуры. Массовое содержание частиц m_p , проникающих в расплав, мало ($m_p \leq 0,05\%$), их диаметр d_p много меньше характерного размера жидкой лунки, влиянием включений на физические параметры расплава можно пренебречь. Количество растворенных компонентов в расплаве незначительно, так что можно не учитывать их влияние на температуру фазового перехода, полагая $T_m = \text{const}$. Плавление металла рассмотрено в приближении Стефана с использованием эффективной теплоемкости [16]. Предположено, что при заданных режимах нагрева небольшие значения конвективных скоростей обуславливают плоскую форму свободной поверхности жидкости [17]. Границы r_g , z_g рассматриваемой области выбраны так, чтобы их положение не влияло на исследуемые процессы.

Распределение температурного поля в твердом и жидком материалах подложки опишем уравнениями конвективного теплопереноса в цилиндрической

системе координат (r, z) , которые для безразмерных переменных при воздействии индуктора имеют вид

$$c_{ef}[\theta_t + (\nabla \cdot \mathbf{u})\theta] = \frac{1}{Pr} \Delta\theta + \frac{Ki}{Pr} \chi(r, z), \quad 0 \leq r \leq r_g, \quad -z_g \leq z \leq 0, \quad 0 \leq t \leq t_H, \quad (1)$$

$$\theta_t + (\nabla \cdot \mathbf{u})\theta = \frac{1}{Pr} \Delta\theta + St(f_s)_t, \quad 0 \leq r \leq r_g, \quad -z_g \leq z \leq 0, \quad t > t_H, \quad (2)$$

после завершения разогрева. Здесь \mathbf{u} — вектор скорости в расплавленном металле с компонентами u, w в радиальном (r) и вертикальном (z) направлениях (в твердом металле $u \equiv 0, w \equiv 0$); θ — температура; t — время; $Pr = \nu/a$ — число Прандтля, ν — кинематическая вязкость расплава, a — температуропроводность; $Ki = (p_0 r_0) / (\lambda T_m)$ — число Кирпичёва, λ — коэффициент теплопроводности, p_0 — удельная мощность, поглощаемая единицей поверхности нагреваемого тела; $St = \kappa / (c_p T_m)$ — число Стефана, κ — удельная теплота плавления; c_p — удельная теплоемкость; f_s — доля твердой фазы в материале ($0 \leq f_s \leq 1$). Эффективная теплоемкость, учитывающая скрытую теплоту фазового перехода, описывается соотношением $c_{ef} = 1 + \delta(\theta) St$, где $\delta(\theta) = 1$ при $\theta \in [1 - \Delta\theta/2, 1 + \Delta\theta/2]$ и $\delta(\theta) = 0$, если $\theta \notin [1 - \Delta\theta/2, 1 + \Delta\theta/2]$, $\Delta\theta$ — температурный интервал, на котором «размазывается» фазовая граница. Безразмерные параметры определяются с помощью характерного размера r_0 , скорости $v_0 = v/r_0$, времени $t_0 = r_0/v_0$ и температуры T_m : $r = r/r_0$; $z = z/r_0$; $u = u/v_0$; $w = w/v_0$; $t = t/t_0$; $\theta = T/T_m$.

Полагаем, что центральная точка «пятна» индукционного воздействия радиусом r_0 расположена в точке $(0, 0)$. В этом случае распределение энерговыделения по толщине пластины, согласно [15], можно описать как

$$\chi(r, z) = e^{z/\Delta_1}, \quad \theta(r, 0) \leq \theta_K, \quad r \leq 1, \quad z \leq 0;$$

$$\chi(r, z) = \begin{cases} e^{z/\Delta_2}, & -z_K(r) \leq z \leq 0; \\ e^{-z_K/\Delta_2} e^{(z+z_K)/\Delta_1}, & z < -z_K(r), \end{cases} \quad \theta(r, 0) > \theta_K, \quad r \leq 1.$$

Здесь Δ_1 — глубина проникания тока в материал, м, т. е. толщина скин-слоя, $\Delta_1 = 503 \sqrt{\rho_{e1} / (\mu_1 f)}$, ρ_{e1} — удельное электрическое сопротивление, μ_1 — относительная магнитная проницаемость при нагреве металла ниже температуры магнитных превращений T_K (точка Кюри), f — рабочая частота генератора поля, Гц. При достижении температуры магнитных превращений относительная магнитная проницаемость снижается до значения $\mu_2 = 1$, а удельное электрическое сопротивление возрастает до ρ_{e2} , вследствие чего глубина проникания тока в материал составит $\Delta_2 = 503 \sqrt{\rho_{e2} / (\mu_2 f)}$; $z_K(r)$ — расстояние от поверхности подложки до точки с температурой магнитных превращений ($T = T_K$). При переходе к безразмерным величинам $\Delta_1 = \Delta_1 / r_0$, $\Delta_2 = \Delta_2 / r_0$, $z_K = z_K / r_0$, $\theta_K = T_K / T_m$.

Граничные условия для уравнений (1), (2) на оси симметрии

$$\frac{\partial \theta}{\partial r} = 0, \quad r = 0, \quad -z_g \leq z \leq 0, \quad (3)$$

на внешней боковой границе расчетной области

$$\frac{\partial \theta}{\partial r} = 0, \quad r = r_g, \quad -z_g \leq z \leq 0. \quad (4)$$

На верхней границе $z = 0$. При нагреве от источника $t \leq t_H$:

$$\frac{\partial \theta}{\partial z} = \alpha(\theta_c - \theta), \quad 1 < r \leq r_g. \quad (5a)$$

После завершения импульса $t > t_H$:

$$\frac{\partial \theta}{\partial z} = \alpha(\theta_c - \theta), \quad 0 \leq r \leq r_g. \quad (5b)$$

На нижней границе расчетной области

$$\frac{\partial \theta}{\partial z} = 0, \quad 0 \leq r \leq r_g, \quad z = -z_g. \quad (6)$$

Здесь $\alpha = \alpha_0 r_0 / \lambda$, $\alpha_0 = \varepsilon \sigma_0 (T^2 + T_c^2)(T + T_c)$, σ_0 — постоянная Стефана — Больцмана, ε — степень черноты материала подложки, T_c — температура окружающей среды ($\theta_c = T_c / T_m$).

При плавлении материала скорость v_n для каждой точки границы расплав–твердая фаза $\zeta(r, z, t)$ определяется условием

$$\text{Pr St } v_n = \partial \theta / \partial \mathbf{n} \Big|_{\theta=1-} - \partial \theta / \partial \mathbf{n} \Big|_{\theta=1+},$$

где \mathbf{n} — единичный вектор нормали.

При затвердевании предполагается, что все наноразмерные частицы являются центрами кристаллизации, тогда доля твердой фазы f_s в двухфазной зоне расплава определяется, согласно [18], из соотношения $f_s = 1 - \exp\{-\Omega N_p\}$, где

$$\Omega(r, z, t - \xi) = \frac{4\pi}{3} \left[r_p + K_v \int_{\xi}^t (T_m - T) d\zeta \right]^3$$

— объем растущего зародыша, возникшего в момент времени $t = \xi$; N_p — число наночастиц в единице объема расплава; $r_p = d_p / 2$; K_v — эмпирическая константа. Окончанию затвердевания соответствует $f_s = 0,95$.

При плавлении металла в области $\theta > 1$ с границей расплав–твердая фаза $\zeta(r, z, t)$ течение в жидкости описывается уравнениями Навье — Стокса в приближении Буссинеска:

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_t + (\nabla \cdot \mathbf{u})\mathbf{u} &= -\nabla p + \nabla^2 \mathbf{u} + \mathbf{k} \text{Gr}(\theta - 1); \\ \nabla \cdot \mathbf{u} &= 0. \end{aligned} \quad (7)$$

Здесь p — давление ($p = p_0 / P_0$, $P_0 = \rho v_0^2$, ρ — плотность материала подложки); $\text{Gr} = \beta_\rho g r_0^3 T_m / \nu^2$ — число Грасгофа, g — ускорение свободного падения, β_ρ — коэффициент объемного теплового расширения расплава; \mathbf{k} — единичный вектор вдоль координатной оси z .

Граничные условия для уравнений (7) следующие. На границе раздела расплав–твердая фаза $\zeta(r, z, t)$:

$$u = 0, \quad w = 0. \quad (8)$$

На оси симметрии $r = 0$, $-z_f(t) \leq z \leq 0$ ($-z_f(t)$ — координата границы фазового перехода):

$$u = 0, \quad \frac{\partial w}{\partial r} = 0. \quad (9)$$

На поверхности жидкости $z = 0$, $0 \leq r < r_f(t)$:

$$\frac{\partial u}{\partial z} = \frac{\text{Mn}}{\text{Pr}} \frac{\partial \theta}{\partial r} \eta, \quad w = 0, \quad (10)$$

где $r_f(t)$ — радиус лунки расплавленного металла на свободной поверхности. При наличии в расплаве ПАВ для описания поверхностного натяжения используют эмпирическую формулу [14]

$$\sigma = \sigma_0 - k_\sigma(T - T_m) - TR\Gamma_s \ln(1 + KC_s), \quad K = S_l \exp[-\Delta H^0 / (RT)].$$

Здесь σ_0 — поверхностное натяжение в чистом металле в точке плавления; $k_\sigma = -\partial\sigma / \partial T$ — для чистого металла; R — универсальная газовая постоянная; C_s — концентрация примеси ПАВ на поверхности расплава; S_l — константа, соответствующая энтропии сегрегации; ΔH^0 — стандартная теплота адсорбции; Γ_s — избыток примеси в поверхностном слое на единицу площади. Тогда

$$\frac{\partial \sigma}{\partial T} = -k_\sigma - R\Gamma_s \ln(1 + KC_s) - \frac{KC_s}{1 + KC_s} \frac{\Gamma_s \Delta H^0}{T}, \quad (11)$$

отсюда определяют число Марангони $\text{Mn} = -k_\sigma T_m r_0 / (\rho \nu a)$ и η :

$$\eta = 1 + R\Gamma_s \ln(1 + KC_s) / k_\sigma + \frac{KC_s}{1 + KC_s} \frac{\Gamma_s \Delta H^0}{T k_\sigma}.$$

Начальные условия для уравнения теплопереноса (1)

$$\theta = \theta_0, \quad (12)$$

для уравнения (7) (расплавившийся металл)

$$u = 0, \quad w = 0. \quad (13)$$

Предполагается, что хорошо смачиваемые модифицирующие наноразмерные частицы под действием конвективных потоков проникают в глубину проплавленной лунки. Движение и распределение наночастиц в расплаве оценивалось с помощью M -маркеров, начальное положение которых описывается координатами (r_m^0, z_m^0) , $0 \leq r_m^0 \leq 1$, $z_m^0 = -r_p$, $m = 1, \dots, M$. Маркеры перемещаются в соответствии с локально осредненными скоростями в ближайшей окрестности каждого маркера.

Для реализации модели (1)–(13), включающей в себя уравнения Навье — Стокса и конвективного теплопереноса, применялся конечно-разностный алгоритм. Расчетная область была разбита на $I \times K$ ячеек. Шаг вдоль временной переменной τ постоянный. Системы разностных уравнений строились с помощью неявной аппроксимации балансных соотношений, получаемых интегрированием уравнений (1), (2), (7) с учетом соответствующих граничных условий. Распределение температуры описывалось значениями в узлах сетки. При аппроксимации (7) в области расплавившегося материала компоненты скоростей u , w , по аналогии с методами типа *MAC* и *SIMPLE* [19, 20], определялись в серединах боковых граней ячеек, а давление p — в центрах ячеек.

В алгоритме использован следующий порядок действий. Первоначально вычислялось температурное поле в подложке при воздействии энергии высокочастотного электромагнитного поля. После появления жидкой лунки на каждом временном шаге устанавливалась граница фазового перехода. Используя найденные значения температуры в уравнениях количества движения, определялись составляющие поля скоростей. Далее, с использованием метода искусственной сжимаемости [21] рассчитывалось давление. Проводилось несколько итераций для согласования найденных давления и скоростей до выполнения неравенства $\max |\nabla \cdot \mathbf{u}| \leq \gamma$, где γ — заданное малое число. Решение алгебраических систем, получаемых при аппроксимации уравнений движения и теплопереноса, осуществлялось итерационными методами.

Координаты маркеров r_m^n , z_m^n на n -м временном шаге вычислялись с помощью соотношений $r_m^n = r_m^{n-1} + u_m^n \tau$, $z_m^n = z_m^{n-1} + v_m^n \tau$, u_m^n , v_m^n — скорости перемещения частиц, определяемые в соответствии с локально осредненными скоростями в ближайшей окрестности каждой из них. После завершения импульса решение задачи продолжалось до момента исчезновения перегрева в расплавленном металле подложки. Конвективное перераспределение маркеров происходило только в расплаве, а в затвердевшей области фиксировались последние рассчитанные координаты.

Результаты численных экспериментов. Численные исследования проводились при следующих параметрах: $r_0 = 0,001$ м; $z_g = 0,0012$ м; $r_g = 0,0015$ м; $t_H = 70$ мс; $T_c = 300$ К; $T_0 = 300$ К; $p_0 = 6,5 \cdot 10^8$ Вт/м²; $f = 1200$ кГц; $K_v = 2,5 \cdot 10^{-5}$ м/(с·К); $d_p = 5 \cdot 10^{-8}$ м; $N_p = 2,0 \cdot 10^{15}$ 1/м³. Свойства металла [13–15]: $\rho = 7065$ кг/м³;

$c_p = 787$ Дж/(кг·К); $\lambda = 27$ Вт/(м·К); $\kappa = 2,77 \cdot 10^5$ Дж/кг; $\nu = 8,5 \cdot 10^{-7}$ м²/с; $k_\sigma = 4,3 \cdot 10^{-4}$ Н/(м·К); $\beta_p = 1,18 \cdot 10^{-4}$ 1/К; $R = 8314,3$ Дж/(моль·К); $S_l = 3,18 \cdot 10^{-3}$; $\Gamma_s = 1,3 \cdot 10^{-8}$ моль/м²; $\Delta H^0 = -1,88 \cdot 10^8$ Дж/моль; $T_m = 1775$ К; $\varepsilon = 0,7$; $\sigma_0 = 5,7 \cdot 10^{-8}$ Вт/(м²·К⁴); $T_k = 1141$ К; $\mu_1 = 14$; $\rho_{e1} = 5,2 \cdot 10^{-7}$ Ом·м; $\mu_2 = 1$; $\rho_{e2} = 1,0 \cdot 10^{-6}$ Ом·м. Рассматриваемые объемы серы в железе $C_S = 0,001 \dots 0,04$ % (масс.).

Вычисления проводились на пространственных сетках $I \times K$ размерами от 120×150 до 240×300 . Значение временного шага $\tau = 10^{-4}$, $\gamma = 10^{-4}$, $\Delta\theta = 0,001$, $M = 25$.

В части расчетной области, прилегающей к зоне расплавленного металла, на рис. 2 в безразмерных координатах отображены структура течений, траектории движения и распределение модифицирующих частиц при $p_0 = 6,5 \cdot 10^8$ Вт/м², $t_H = 70$ мс и количестве ПАВ (серы) в расплаве 0,01 % (масс.).

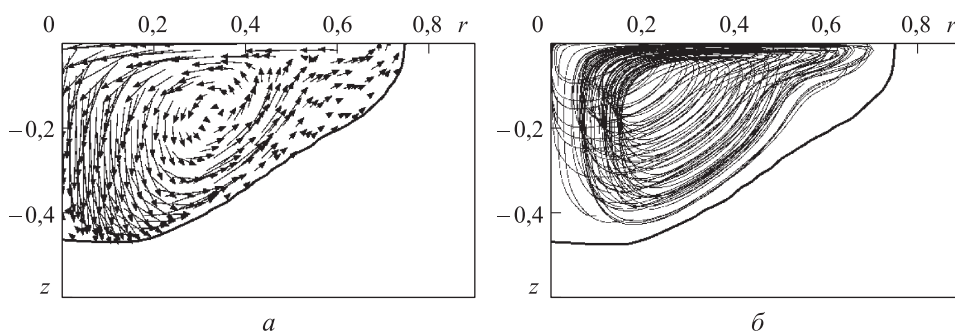


Рис. 2. Поле скоростей (а), траектории и распределение маркеров (б) в расплаве при $q_0 = 6,5 \cdot 10^8$ Вт/м², $t_H = 70$ мс (стрелки на рисунках обозначают направление, а их длина — интенсивность потока)

Поле скоростей в расплаве в момент завершения индукционного воздействия показано на рис. 2, а. Согласно представленным данным, к этому времени формируется большой тороидальный вихрь с направлением течения вблизи свободной поверхности жидкости от границы фазового перехода к центру лунки с интенсивным нисходящим потоком в этой области. Подобная структура течения существует с момента появления расплава до завершения импульса при условии небольшого перегрева его поверхности относительно температуры фазового перехода. Это приводит к тому, что модифицирующие частицы проникают в глубину центральной области лунки, а затем расходящимся потоком с высокой равномерностью распределяются по всему объему расплава (рис. 2, б). Глубина проплавления около 450 мкм. После завершения импульса расплав остывает и затвердевает, чему способствует отвод теплоты с его поверхности и в неразогретый материал. Перемещение наноразмерных частиц происходит, пока существует расплавленный металл. Следует отметить, что незначительный перегрев поверхности расплава способствует сохранению ее плоской формы и позволяет избежать последующей дополнительной обработки.

Распределения безразмерных температуры и функции χ по толщине подложки от ее поверхности в точке максимального разогрева ($r = 0$) показаны на рис. 3, а. В соответствии с представленными результатами глубина проникания тока не превышает толщины рассматриваемой пластины, а основное выделение энергии происходит в слое металла, нагретом выше температуры магнитных превращений ($z = -0,7$). В результате температура принимает максимальные значения на обрабатываемой поверхности и монотонно снижается по мере удаления от нее, нагрева подложки по всей толщине не происходит.

Структура течения в расплаве определяется параметром $\partial\sigma/\partial T$, который может принимать как положительные, так и отрицательные значения, т. е. повышение температуры на каком-либо участке поверхности жидкого металла при постоянной концентрации ПАВ может изменять направление движения потока в расплаве и даже формировать многовихревую структуру течения. Поэтому по результатам анализа формулы (11) и численных экспериментов для различных концентраций ПАВ в металле ($0,001 < C_s \leq 0,04$ %) определены значения температуры нагрева свободной поверхности расплава (рис. 3, б), ниже которых вблизи нее формируется устойчивое течение с направлением от границы фазового перехода к центру лунки, подобное представленному на рис. 2, а.

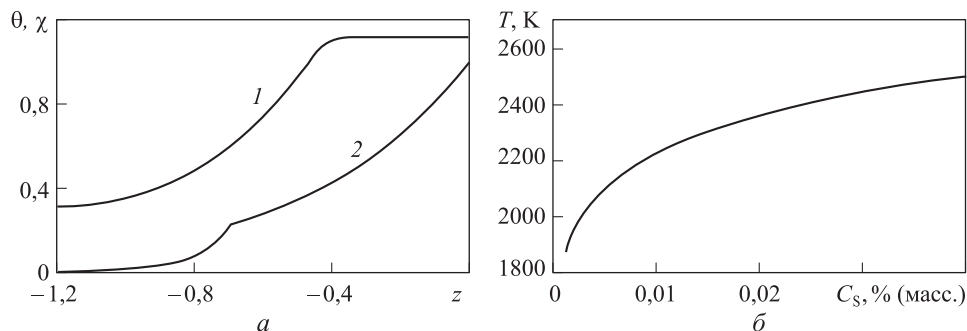


Рис. 3. Изменение температуры θ (1) и функции χ (2) в подложке при $r = 0$ для $q_0 = 6,5 \cdot 10^8$ Вт/м², $t_H = 70$ мс (а) и максимально допустимые значения температуры расплава при различных концентрациях ПАВ в металле для получения однородного распределения модифицирующих частиц (б)

После завершения импульса металл остывает и затвердевает. Продолжительность процесса 15 мс. Перегрев в расплаве продолжается 9,75 мс, и в течение этого времени происходит перемещение наноразмерных частиц. Изменение температуры и положение границы фазового перехода вдоль оси z в подложке при $r = 0$ после завершения импульса до момента снятия перегрева в расплаве приведено на рис. 4. После отключения источника энергии температурные градиенты в жидкости уменьшаются, интенсивность конвекции снижается, металл остывает, чему способствует низкая начальная температура подложки (рис. 4, а). На отвод теплоты требуется время, чем и объясняется задержка в движении границы твердой фазы (рис. 4, б). По мере снятия перегрева происходит объемная и последова-

тельная кристаллизации в направлении к поверхности подложки. Ширина двухфазной зоны может изменяться от 30 мкм в глубине жидкой лунки до 330 мкм на момент исчезновения перегрева в расплавленном металле. Соответственно меняются и ширина зоны метастабильного состояния (15...270 мкм), когда доля кристаллической фазы растет очень медленно и практически близка нулю, и период времени от момента достижения равновесной температуры кристаллизации до момента полного затвердевания материала составляет 2,3...5,25 мс. Все эти особенности можно объяснить постепенно снижающейся скоростью охлаждения, так как теплота отводится в затвердевший нагретый металл.

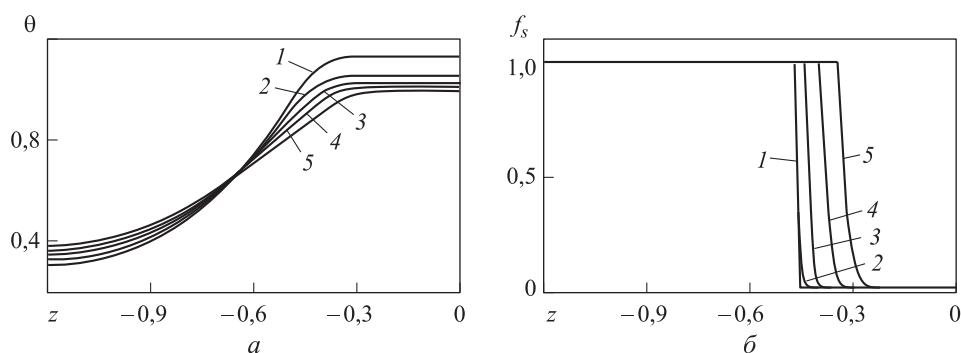


Рис. 4. Изменение температуры (а) и доли твердой фазы (б) в подложке при затвердевании расплава через $t - t_H = 0$ (1), 2,5 (2), 5,0 (3), 7,5 (4) и 9,75 (5) мс

Наряду с изложенным выше определено, что гомогенное зарождение кристаллов при наличии в расплаве высокоактивированных наноразмерных частиц не возникает и не влияет на кинетику кристаллизации, так как при существующих скоростях охлаждения необходимые для этого условия не достигаются.

Заключение. По результатам численного моделирования подтверждена возможность применения энергии импульса высокочастотного индукционного поля для модифицирования расплавленного металла наноразмерными частицами тугоплавких соединений в целях улучшения его структурных составляющих при затвердевании. Результаты расчетов свидетельствуют, что присутствие ПАВ в металле существенно влияет на течения в расплаве и в целом на физические процессы в ходе модифицирования. Для повышения качества обработки поверхностного слоя металла необходимо учитывать его состав и в зависимости от этого выбирать режимы импульса высокочастотного индукционного поля. Использование оптимальных режимов может способствовать гомогенному распределению модифицирующих частиц.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Плазмохимический синтез ультрадисперсных порошков и их применение для модифицирования металлов и сплавов* / В.П. Сабуров, А.Н. Черепанов, М.Ф. Жуков и др. Новосибирск: Наука, 1995. 339 с.

2. Черепанов А.Н., Попов В.Н. Оценка влияния модификации наноразмерными тугоплавкими частицами жаропрочного сплава // Вестник НГУ. Серия: Физика. 2015. Т. 10. № 3. С. 97–102.
3. *Surface treatments by laser technology* / М.А. Montealegre, G. Castro, P. Rey, J.L. Arias, P. Vázquez, M. González // *Contemporary Materials*. 2001. No. 1. P. 19–30.
4. Марусин М.В., Шукин В.Г., Марусин В.В. Поверхностное легирование углеродистой стали медью при высокоэнергетической индукционной обработке // Физика и химия обработки материалов. 2010. № 5. С. 67–70.
5. Марусин В.В. Высокочастотная импульсная закалка (ВИЗ) деталей // *Обработка металлов*. 2004. № 2. С. 14–15.
6. Солоненко О.П., Черепанов А.Н., Марусин В.В., Полубояров В.А. Комбинированные технологии получения перспективных порошковых материалов, нанесения покрытий и упрочнения поверхностных слоев с регулируемой нано- и микроструктурой // Тяжелое машиностроение. 2007. № 10. С. 10–13.
7. Веденов А.А., Гладуш Г.Г. Физические процессы при лазерной обработке материалов. М.: Энергоатомиздат, 1985. 208 с.
8. He X., Fuerschbach P.W., DebRoy T. Heat transfer and fluid flow during laser spot welding of 304 stainless steel // *Journal of Physics D: Applied Physics*. 2003. Vol. 36. No. 12. P. 1388–1398. DOI: 10.1088/0022-3727/36/12/306
9. Seyhan I., Egrý I. The surface tension of undercooled binary iron and nickel alloys and the effect of oxygen on the surface tension of Fe and Ni // *International Journal of Thermophysics*. 1999. Vol. 20. Iss. 4. P. 1017–1028. DOI: 10.1023/A:1022638400507
10. Ribic B., Tsukamoto S., Rai R., DebRoy T. Role of surface active elements during keyhole mode laser welding // *Journal of Physics D: Applied Physics*. 2011. Vol. 44. No. 48. P. 5753–5766. DOI: 10.1088/0022-3727/44/48/485203
11. Черепанов А.Н., Попов В.Н. Численный анализ влияния поверхностно-активного вещества в расплаве на распределение модифицирующих частиц и кристаллизацию при обработке поверхности металла лазерным импульсом // Теплофизика и аэромеханика. 2014. Т. 21. № 3. С. 373–381.
12. Donghua Dai, Dongdong Gu. Influence of thermodynamics within molten pool on migration and distribution state of reinforcement during selective laser melting of AlN/AlSi10Mg composites // *International Journal of Machine Tools & Manufacture*. 2016. Vol. 100. P. 14–24. DOI: 10.1016/j.ijmachtools.2015.10.004
13. Sahoo P., DebRoy T., McNallan M.J. Surface tension of binary metal–surface active solute systems under conditions relevant to welding metallurgy // *Metallurgical Transactions B*. 1988. Vol. 19. Iss. 3. P. 483–491. DOI: 10.1007/BF02657748
14. Ehlen G., Ludwig A., Sahm P.R. Simulation of time-dependent pool shape during laser spot welding: Transient effects // *Metallurgical and Materials Transactions A*. 2003. Vol. 34. Iss. 12. P. 2947–2961. DOI: 10.1007/s11661-003-0194-x
15. Павлов Н.А. Инженерные тепловые расчеты индукционных нагревателей. М.: Энергия, 1978. 120 с.
16. Будак Б.М., Соловьева Е.Н., Успенский А.Б. Разностный метод со сглаживанием коэффициентов для решения задач Стефана // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 1965. Т. 5. № 5. С. 828–840.

17. *Marangoni convection during free electron laser nitriding of titanium* / D. Höche, S. Müller, G. Rapin, et al. // *Metallurgical and Materials Transactions B*. 2009. Vol. 40. Iss. 4. P. 497–507. DOI: 10.1007/s11663-009-9243-1
18. *Баландин Г.Ф.* Основы теории формирования отливки. Ч. 1. Тепловые основы теории. Затвердевание и охлаждение отливки. М.: Машиностроение, 1979. 335 с.
19. *Harlow F.H., Welch J.E.* Numerical calculation of time-depend viscous incompressible flow of fluid with free surface // *Physics of Fluids*. 1965. Vol. 8. Iss. 12. P. 2182–2189. DOI: 10.1063/1.1761178
20. *Patankar S.V., Spalding D.B.* A calculation procedure for heat, mass and momentum transfer in three-dimensional parabolic flows // *International Journal of Heat and Mass Transfer*. 1972. Vol. 15. Iss. 10. P. 1787–1806. DOI: 10.1016/0017-9310(72)90054-3
21. *Chorin A.J.* A numerical method for solving incompressible viscous flow problems // *Journal of Computational Physics*. 1997. Vol. 135. Iss. 2. P. 118–125. DOI: 10.1006/jcph.1997.5716

Попов Владимир Николаевич — д-р физ.-мат. наук, старший научный сотрудник, главный научный сотрудник лаборатории «Термомеханика и прочность новых материалов» Института теоретической и прикладной механики им. С.А. Христиановича СО РАН (Российская Федерация, 630090, Новосибирск, ул. Институтская, д. 4/1).

Черепанов Анатолий Николаевич — д-р физ.-мат. наук, профессор, главный научный сотрудник лаборатории «Термомеханика и прочность новых материалов» Института теоретической и прикладной механики им. С.А. Христиановича СО РАН (Российская Федерация, 630090, Новосибирск, ул. Институтская, д. 4/1).

Щукин Владимир Германович — канд. физ.-мат. наук, ведущий инженер лаборатории «Термомеханика и прочность новых материалов» Института теоретической и прикладной механики им. С.А. Христиановича СО РАН (Российская Федерация, 630090, Новосибирск, ул. Институтская, д. 4/1).

Просьба сослаться на эту статью следующим образом:

Попов В.Н., Черепанов А.Н., Щукин В.Г. Моделирование модифицирования поверхностного слоя металла наночастицами при импульсном индукционном нагреве // *Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер. Естественные науки*. 2018. № 2. С. 82–96. DOI: 10.18698/1812-3368-2018-2-82-96

**SIMULATION OF METAL SURFACE LAYER MODIFICATION
BY NANO-PARTICLES UPON PULSED INDUCTION HEATING**

V.N. Popov

popov@itam.nsc.ru

A.N. Cherepanov

ancher@itam.nsc.ru

V.G. Shchukin

schukin_vg@ngs.ru

**Khristianovich Institute of Theoretical and Applied Mechanics SB,
Russian Academy of Sciences, Novosibirsk, Russian Federation**

Abstract

The purpose of the study was to consider the applicability of high-frequency electromagnetic field for metal heating and melting with a view to its subsequent modification. Two-dimensional numerical simulation of the processes during the modification of the substrate surface metal layer was carried out. The substrate surface was covered with a layer of specially prepared nano-size refractory particles, which become active crystallization centers after the penetration into the melt. The proposed mathematical model is used to consider the processes including heating, phase transition and heat transfer in the molten metal, the nucleation and growth of the solid phase in the presence of a modifier material in the melt. The distribution of the electromagnetic energy in the metal is described by empirical formulae. The melting of the metal is considered at the Stephan's approximation, and during solidification all nano-size particles are assumed to be centers of volume-consecutive crystallization. The flow in the liquid is described by Navier — Stokes equations in Boussinesq approximation. Distribution of nanoparticles in the melt is simulated by moving markers. According to the results of numerical experiments, the flow structure in the melt was evaluated depending upon the amount of surface-active impurities in the metal. The modes of the induction-pulse action are detected: they promote creating the flows for the homogeneous distribution of modifying particles in the melt. Findings of the research show that application of pulses of high frequency electromagnetic field for heating and melting of metals allows modifying the metal deeper in comparison with the use of a laser. Characteristics of the volume and successive crystallization are considered, as well as the growth characteristics of the solid phase. The dimensions of the two-phase zone and the zone of the metastable state are estimated when the proportion of the crystalline phase increases very slowly and is practically close to zero

Keywords

Numerical simulation, metal modification, pulsed induction heating, heat transfer, nano-size refractory particles, crystallization

Received 23.03.2017

© BMSTU, 2018

REFERENCES

- [1] Saburov V.P., Cherepanov A.N., Zhukov M.F., et al. Plazmokhimicheskiy sintez ul'tradispersnykh poroshkov i ikh primeneniye dlya modifitsirovaniya metallov i splavov [Plasma chemical synthesis of ultradisperse powder and its application for metals and alloys modification]. Novosibirsk, Nauka Publ., 1995. 339 p.
- [2] Cherepanov A.N., Popov V.N. Analysis of modification of the heat resistant alloy by nano-size refractory particles. *Vestnik NGU. Seriya: Fizika* [Vestnik NSU. Series: Physics], 2015, vol. 10, no. 3, pp. 97–102 (in Russ.).
- [3] Montealegre M.A., Castro G., Rey P., Arias J.L., Vázquez P., González M. Surface treatments by laser technology. *Contemporary Materials*, 2001, no. 1, pp. 19–30.

- [4] Marusin M.V., Shchukin V.G., Marusin V.V. Surface alloying of carbon steel with Cu under high energy induction treatment. *Fizika i khimiya obrabotki materialov* [Physics and Chemistry of Materials Treatment], 2010, no. 5, pp. 67–70 (in Russ.).
- [5] Marusin V.V. HF impulse hardening of parts. *Obrabotka metallov*, 2004, no. 2, pp. 14–15 (in Russ.).
- [6] Solonenko O.P., Cherepanov A.N., Marusin V.V., Poluboyarov V.A. Combined technologies of emerging powder materials, coating and layer hardening with controlled nano- and micro-structure. *Tyazheloe mashinostroenie*, 2007, no. 10, pp. 10–13 (in Russ.).
- [7] Vedenov A.A., Gladush G.G. Fizicheskie protsessy pri lazernoy obrabotke materialov [Physical processes in process of laser materials treatment]. Moscow, Energoatomizdat Publ., 1985. 208 p.
- [8] He X., Fuerschbach P.W., DebRoy T. Heat transfer and fluid flow during laser spot welding of 304 stainless steel. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 2003, vol. 36, no. 12, pp. 1388–1398. DOI: 10.1088/0022-3727/36/12/306
- [9] Seyhan I., Egry I. The surface tension of undercooled binary iron and nickel alloys and the effect of oxygen on the surface tension of Fe and Ni. *International Journal of Thermophysics*, 1999, vol. 20, iss. 4, pp. 1017–1028. DOI: 10.1023/A:1022638400507
- [10] Ribic B., Tsukamoto S., Rai R., DebRoy T. Role of surface active elements during keyhole mode laser welding. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 2011, vol. 44, no. 48, pp. 5753–5766. DOI: 10.1088/0022-3727/44/48/485203
- [11] Cherepanov A.N., Popov V.N. Numerical analysis of the influence of surface-active substance in the melt on the distribution of modifying particles and crystallization at the treatment of metal surface by a laser pulse. *Thermophysics and Aeromechanics*, 2014, vol. 21, iss. 3, pp. 355–363. DOI: 10.1134/S0869864314030093
- [12] Donghua Dai, Dongdong Gu. Influence of thermodynamics within molten pool on migration and distribution state of reinforcement during selective laser melting of AlN/AlSi10Mg composites. *International Journal of Machine Tools & Manufacture*, 2016, vol. 100, pp. 14–24. DOI: 10.1016/j.ijmachtools.2015.10.004
- [13] Sahoo P., DebRoy T., McNallan M.J. Surface tension of binary metal–surface active solute systems under conditions relevant to welding metallurgy. *Metallurgical Transactions B*, 1988, vol. 19, iss. 3, pp. 483–491. DOI: 10.1007/BF02657748
- [14] Ehlen G., Ludwig A., Sahn P.R. Simulation of time-dependent pool shape during laser spot welding: Transient effects. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 2003, vol. 34, iss. 12, pp. 2947–2961. DOI: 10.1007/s11661-003-0194-x
- [15] Pavlov N.A. Inzhenernye teplovye raschety induktsionnykh nagrevateley [Engineering thermal calculation of induction heaters]. Moscow, Energiya Publ., 1978. 120 p.
- [16] Budak B.M., Sobol'eva E.N., Uspenskii A.B. A difference method with coefficient smoothing for the solution of Stefan problems. *USSR Computational Mathematics and Mathematical Physics*, 1965, vol. 5, no. 5, pp. 59–76. DOI: 10.1016/0041-5553(65)90005-4
- [17] Höche D., Müller S., Rapin G., et al. Marangoni convection during free electron laser nitriding of titanium. *Metallurgical and Materials Transactions B*, 2009, vol. 40, iss. 4, pp. 497–507. DOI: 10.1007/s11663-009-9243-1
- [18] Balandin G.F. Osnovy teorii formirovaniya otlivki. Ch. 1. Teplovye osnovy teorii. Zatverdevanie i okhlazhdenie otlivki [Fundamentals of cast forming theory. Vol. 1. Cast hardening and cooldown]. Moscow, Mashinostroenie Publ., 1979. 335 p.

- [19] Harlow F.H., Welch J.E. Numerical calculation of time-depend viscous incompressible flow of fluid with free surface. *Physics of Fluids*, 1965, vol. 8, iss. 12, pp. 2182–2189. DOI: 10.1063/1.1761178
- [20] Patankar S.V., Spalding D.B. A calculation procedure for heat, mass and momentum transfer in three-dimensional parabolic flows. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 1972, vol. 15, iss. 10, pp. 1787–1806. DOI: 10.1016/0017-9310(72)90054-3
- [21] Chorin A.J. A numerical method for solving incompressible viscous flow problems. *Journal of Computational Physics*, 1997, vol. 135, iss. 2, pp. 118–125. DOI: 10.1006/jcph.1997.5716

Popov V.N. — Dr. Sc. (Phys.-Math.), Senior Researcher Fellow, Chief Researcher Fellow, Laboratory of Thermodynamics and Strength of New Materials, Khristianovich Institute of Theoretical and Applied Mechanics SB, Russian Academy of Sciences (Institutskaya ul. 4/1, Novosibirsk, 630090 Russian Federation).

Cherepanov A.N. — Dr. Sc. (Phys.-Math.), Professor, Chief Researcher Fellow, Laboratory of Thermodynamics and Strength of New Materials, Khristianovich Institute of Theoretical and Applied Mechanics SB, Russian Academy of Sciences (Institutskaya ul. 4/1, Novosibirsk, 630090 Russian Federation).

Shchukin V.G. — Cand. Sc. (Phys.-Math.), Leading Engineer, Laboratory of Thermodynamics and Strength of New Materials, Khristianovich Institute of Theoretical and Applied Mechanics SB, Russian Academy of Sciences (Institutskaya ul. 4/1, Novosibirsk, 630090 Russian Federation).

Please cite this article in English as:

Popov V.N., Cherepanov A.N., Shchukin V.G. Simulation of Metal Surface Layer Modification by Nano-Particles upon Pulsed Induction Heating. *Vestn. Mosk. Gos. Tekh. Univ. im. N.E. Baumana, Estestv. Nauki* [Herald of the Bauman Moscow State Tech. Univ., Nat. Sci.], 2018, no. 2, pp. 82–96 (in Russ.). DOI: 10.18698/1812-3368-2018-2-82-96