

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ МОДИФИЦИРОВАННОЙ МЕТАЛЛИЧЕСКОЙ КАПЛИ ПРИ РАСТЕКании НА ПОДЛОЖКЕ

В.Н. Попов

popov@itam.nsc.ru

А.Н. Черепанов

ancher@itam.nsc.ru

ИТПМ СО РАН, Новосибирск, Российская Федерация

Аннотация

Проведено численное моделирование процессов при падении капель расплавленного металла на подложку. Рассмотрено затвердевание на металлической поверхности бинарного сплава алюминия, модифицированного активированными тугоплавкими наноразмерными частицами, которые являются центрами зарождения кристаллической фазы. Сформулирована математическая модель, описывающая термо- и гидродинамические явления в капле при взаимодействии с твердой подложкой, гетерогенное зародышеобразование в процессе охлаждения расплава и последующую кристаллизацию. Течение в жидкости описано уравнениями Навье — Стокса в приближении Буссинеска. Положение свободной границы расплава зафиксировано частицами-маркерами, перемещающимися с локальной скоростью жидкости. На поверхности контакта расплав–подложка учтено термическое сопротивление. Гидродинамическая задача рассмотрена в условиях кристаллизации расплавленного металла. Описаны температурные режимы, кинетика роста твердой фазы в затвердевающем сплаве алюминия при различных размерах формирующихся сплэтов. Установлено удовлетворительное совпадение формы сплэта, полученного по результатам численного моделирования, с имеющимися экспериментальными данными. Подтверждена адекватность модели кристаллизации при наличии ультрадисперсных тугоплавких частиц в бинарном сплаве. Определено, что независимо от размера капли имеет место объемная кристаллизация металла. Установлено, что

Ключевые слова

Численное моделирование, металлическая капля, подложка, модифицирование, сплав алюминия, наноразмерные тугоплавкие частицы, кристаллизация

при большой скорости соударения капли с подложкой за время растекания расплава возможно образование небольшой доли твердой фазы

Поступила 19.02.2019

© Автор(ы), 2019

Работа выполнена в рамках Программы фундаментальных научных исследований государственных академий наук на 2013–2020 годы (проект № 0323-2018-0012)

Введение. Одним из простых и доступных способов нанесения стойких защитных покрытий на поверхность деталей либо восстановления геометрии их изношенных поверхностей является газопламенное напыление расплавленных частиц различных (медных, алюминиевых, цинковых и др.) сплавов [1]. При газопламенном напылении происходит последовательная укладка отдельных сплэтов — растекшихся и затвердевших на обрабатываемой поверхности капель расплава, и очевидно, что обеспечение высоких механических и прочностных свойств покрытий во многом определяется их высокой дисперсностью и однородностью кристаллического зерна [2, 3].

Сплавы алюминия (Al + Si) широко используют в автомобильной и аэрокосмической отраслях. В настоящее время одну из главных проблем представляет повышение прочности алюминия, которая может быть увеличена механизмом измельчения зерна при добавлении в расплав ультрадисперсных тугоплавких частиц. В качестве модификаторов могут использоваться предварительно специально подготовленные тугоплавкие наноразмерные частицы (SiC, TiC, TiN и др.), которые даже при относительно малой массовой доле в расплаве, не более 0,05 %, позволяют увеличить число центров кристаллизации [4, 5]. В настоящее время существует несколько публикаций, посвященных экспериментальным исследованиям влияния ультрадисперсных тугоплавких частиц в сплавах алюминия на измельчения зерна в слитке и повышение прочности затвердевшего металла [6–9]. Экспериментально подтверждено уменьшение среднего размера зерна в затвердевшем слитке, способствовавшее улучшению прочностных свойств металла [6]. В ходе исследований изменена температура в металле во время его кристаллизации [7, 10].

Обеспечение высоких механических и прочностных свойств алюминиевых покрытий на поверхностях деталей и конструкций во многом должно обуславливаться структурой нанесенных сплэтов. Для получения мелкого зерна в затвердевшем металле необходимо возникновение как можно большего числа центров кристаллизации в расплаве, что достигается вве-

дением в напыляемый материал модифицирующих компонентов [2]. Применение такой технологии дает возможность повысить эксплуатационные свойства восстанавливаемых деталей и их поверхностного слоя. При совершенствовании методов нанесения стойких защитных покрытий актуально детальное исследование происходящих процессов. В связи с этим использование численного моделирования часто является единственным способом, позволяющим получить представление о рассматриваемых процессах при сопоставлении получаемых результатов с имеющимися экспериментальными данными.

Результаты численных исследований неравновесной объемной кристаллизации модифицированной металлической капли на холодной подложке приведены в [11]. Предложена математическая модель и рассмотрена кинетика кристаллизации однокомпонентного расплава. Выявлено существование переохлаждения в начальной стадии кристаллизации, величина которого зависит от размера частиц и интенсивности охлаждения.

3D-Моделирование процессов при послойном наложении металлических капель на поверхность подложки проведено в [12]. Получена оценка термического сопротивления на поверхности контакта расплава с подложкой. Результаты численного моделирования взаимодействия капель расплавленного алюминиевого сплава (Al + Si) и стальной пластины сравнивались с данными, полученными при экспериментах, однако кинетика кристаллизации, во многом влияющая на структуру затвердевшего металла, не рассмотрена.

Математическая модель кристаллизации двухкомпонентного сплава предложена в [13]. Однако по результатам анализа представленных в этой работе результатов определено, что модель не описывает эвтектическую кристаллизацию в малых объемах металла и имеет узкую область применения. Поэтому адекватное и точное описание процессов при затвердевании многокомпонентных сплавов остается актуальной задачей.

В настоящей работе рассмотрен процесс растекания и затвердевания на подложке капли двухкомпонентного сплава алюминия системы Al + Si, модифицированного активированными тугоплавкими наноразмерными частицами, которые являются центрами зарождения и роста кристаллической фазы. Сформулирована математическая модель, описывающая термо- и гидродинамические явления в капле при ее соударении с твердой подложкой и кинетику кристаллизации в процессе охлаждения расплава. Использовано полученное по результатам экспериментов значение термического сопротивления на поверхности контакта расплав–подложка [12]. Гидродинамические процессы рассмотрены в условиях затвердевания ме-

талла. Определены кинетика роста твердой фазы и температурные режимы в затвердевающем расплаве при различных размерах формирующихся сплэтов. Проведено сравнение формы сплэтов, полученных по результатам численного моделирования, с имеющимися данными [12], а также подтверждена адекватность предложенной модели кристаллизации при наличии ультрадисперсных тугоплавких частиц в сплаве алюминия имеющимися в литературе результатами экспериментов [10].

Математическая модель и алгоритм реализации. Предполагается, что сферическая частица расплава диаметром d_0 соударяется с подложкой под прямым углом к ее поверхности со скоростью v_0 и растекается по поверхности (рис. 1). Расплав модифицирован тугоплавкими наноразмерными частицами, которые служат активными центрами кристаллизации и их массовое содержание m_p не превышает 0,05 %. Диаметр частиц d_p много меньше размера капли, поэтому они не влияют на теплофизические характеристики расплава.

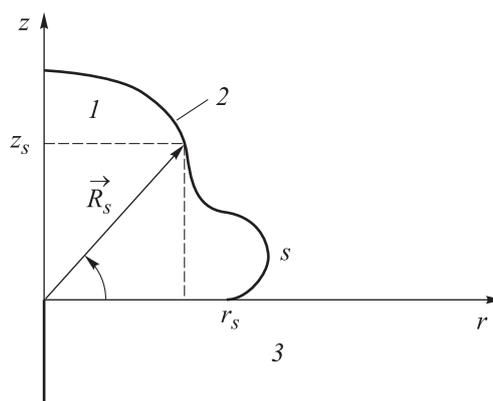


Рис. 1. Схема деформирующейся капли после соударения с подложкой:

1 — капля; 2 — свободная поверхность расплава; 3 — подложка

Для численного моделирования поведения расплава после его соударения с поверхностью подложки используются уравнения Навье — Стокса для вязкой несжимаемой жидкости. Значения теплофизических характеристик материала капли в жидком и твердом состояниях полагаются постоянными и равными средним значениям в рассматриваемых интервалах значений температуры. Поверхность подложки плоская и абсолютно смачиваемая. Динамический угол контакта в перемещающейся точке соприкосновения поверхности капли и твердой поверхности определяется из решения задачи. Температура подложки ниже температуры

кристаллизации металла. Радиационным теплообменом на поверхности подложки пренебрегаем.

С учетом принятых допущений уравнения движения жидкости и неразрывности в цилиндрической системе координат (r, z) , согласно схеме, приведенной на рис. 1, имеют вид

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial r} + v \frac{\partial u}{\partial z} &= -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial r} + \frac{1}{\rho} \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \mu \frac{\partial u}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial z} \right) - \mu \frac{u}{r^2} \right]; \\ \frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial r} + v \frac{\partial v}{\partial z} &= -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial z} + \frac{1}{\rho} \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \mu \frac{\partial v}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu \frac{\partial v}{\partial z} \right) \right] - g; \\ \frac{1}{r} \frac{\partial r u}{\partial r} + \frac{\partial v}{\partial z} &= 0. \end{aligned} \quad (1)$$

Здесь u, v — компоненты вектора скорости вдоль координат r и z ; t — время; p — давление; μ — динамическая вязкость, значение которой для жидкой и дисперсной сред определяется, согласно [14], по формуле

$$\mu = \begin{cases} \mu_0 & \text{при } f_s \equiv 0; \\ \mu_0 \exp[5f_s/3(1-f_s)] & \text{при } 0 < f_s \leq 0,4, \end{cases}$$

где f_s — доля твердой фазы в расплаве при кристаллизации (если $f_s > 0,4$, то $u = 0, v = 0$).

Начальные условия ($t = 0$) для уравнений (1) $u = 0, v = -v_0, p = 4\sigma/d_0 + p_a$, где σ — поверхностное натяжение расплавленного металла; p_a — атмосферное давление.

Граничные условия для гидродинамической задачи при $r = 0$ определены как $u = 0, r \left(\frac{\partial v}{\partial r} \right) = 0, r \left(\frac{\partial p}{\partial r} \right) = 0$, а на свободной поверхности жидкой частицы —

$$\begin{aligned} \left(p - 2\sigma K - 2\mu \frac{\partial u}{\partial r} \right) n_r - \mu \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial v}{\partial r} \right) n_z &= 0; \\ \left(p - 2\sigma K - 2\mu \frac{\partial v}{\partial z} \right) n_z - \mu \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial v}{\partial r} \right) n_r &= 0. \end{aligned}$$

Здесь n_r, n_z — компоненты единичного вектора нормали \mathbf{n} к свободной поверхности капли по осям r и z ; K — кривизна поверхности капли,

$$K = \frac{r^2(r'z'' - z'r'') + [(r')^2 + (z')^2]rz'}{2r^2[(r')^2 + (z')^2]^{3/2}},$$

где штрих обозначает производную относительно длины дуги s (см. рис. 1).

До начала затвердевания материала капли на поверхности подложки ($z = 0$) и далее на границе расплав–твердая фаза выполняются условия прилипания $u = 0, v = 0$.

Уравнение, описывающее перенос теплоты в капле:

$$\frac{\partial T}{\partial t} + u \frac{\partial T}{\partial r} + v \frac{\partial T}{\partial z} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r a_e \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(a_e \frac{\partial T}{\partial z} \right) + \frac{\kappa}{c_2} \frac{\partial f_s}{\partial t}, \quad (2)$$

где a_e — локальное значение коэффициента температуропроводности, $a_e = a_1$ при $f_s = 0$, $a_e = a_2$ при $f_s = 1$, $a_e = a_1(1 - f_s) + a_2f_s$ в случае $0 < f_s < 1$ и $u = 0, v = 0$ при $f_s > 0,4$. Здесь $a_i = \lambda_i / (c_i \rho_i)$ — температуропроводность жидкой ($i = 1$) и твердой ($i = 2$) фаз материала капли, материала подложки ($i = 3$); λ, c, ρ — теплопроводность, теплоемкость и плотность; κ — удельная теплота плавления.

Перенос теплоты в подложке описывается уравнением

$$\frac{\partial T}{\partial t} = a_3 \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r \frac{\partial T}{\partial r} + \frac{\partial^2 T}{\partial r^2} \right). \quad (3)$$

Начальные значения ($t = 0$) температуры и доли твердой фазы в расплаве $T = T_{10}$ и $f_s = 0$, температура подложки $T = T_{30}$.

Граничное условие на поверхности соприкосновения капли и подложки $z = 0, r \leq r_c(t)$ согласно [12]:

$$\lambda_i \frac{\partial T}{\partial z} \Big|_{0+} = \lambda_3 \frac{\partial T}{\partial z} \Big|_{0-} = \frac{1}{R_{res}} (T|_{0+} - T|_{0-}), \quad i = 1, 2,$$

где R_{res} — тепловое сопротивление; $r_c(t)$ — радиус пятна контакта (см. рис. 1).

Теплообмен между поверхностью капли и окружающей средой

$$\lambda_i \frac{\partial T}{\partial \mathbf{n}} = \varepsilon \sigma_0 (T_{30}^4 - T^4),$$

где ε — степень черноты материала; σ_0 — постоянная Стефана — Больцмана.

Условия симметрии в капле и подложке ($r = 0$): $r(\partial T / \partial r) = 0$.

Граничные условия на нижней ($z = -h_s, 0 \leq r \leq r_c$), верхней несмоченной ($z = 0, r > r_c$) и боковой ($r > r_3, -h_s \leq z \leq 0$) поверхностях подложки имеют вид

$$\lambda_3 \frac{\partial T}{\partial z} = 0.$$

Здесь h_s, r_3 — толщина и радиус подложки ($2r_3 \gg d_0$).

Предполагается, что рост кристаллической фазы подчиняется нормальному механизму и определяется линейной зависимостью скорости роста от переохлаждения $\dot{R} = K_v \Delta T$ [4, 15], где R — радиус кристалла, точка означает производную по времени; K_v — физическая константа; $\Delta T = T_l - T$, T_l — температура ликвидуса.

Полагая, что рост твердой фазы происходит одновременно на всех наноразмерных частицах в области переохлажденного расплава начиная со времени $t = t_0$, когда температура достигла исходной температуры ликвидуса T_{l0} , согласно [16], определяем f_s соотношением

$$f_s = 1 - \exp\left\{-\frac{4}{3} \pi N_p R^3\right\}, \quad (4)$$

где $R(r, z, t) = r_p + \int_{t_0}^t K_v \Delta T d\tau$, $r_p = d_p/2$; N_p — число наночастиц в единице объема. Переохлаждение $\Delta T = T_l - T$ имеет вид

$$\Delta T = T_A - \frac{\beta C_0}{(1 - f_s)^{1-k}} - T.$$

Здесь температура ликвидуса T_l аппроксимирована линейной зависимостью от концентрации C растворенного компонента (Si); T_A — температура плавления чистого металла-растворителя (Al); β — модуль коэффициента наклона линии ликвидуса на диаграмме состояния Al + Si. Концентрацию легирующего компонента определяем из уравнения неравновесного рычага [15] $C = C_0 / (1 - f_s)^{1-k}$, где C_0 — исходная концентрация; k — коэффициент распределения растворенного компонента (Si). Рост твердой фазы α -компоненты (алюминия) сплава Al + Si происходит в температурном интервале $T_{l0} \geq T \geq T_E$, где $T_{l0} = T_A - \beta C_0$, T_E — температура эвтектики. Величина $\partial f_s / \partial t$ определяется как

$$\frac{\partial f_s}{\partial t} = 4\pi N_p K_v (1 - f_s) R^2 (T_l - T).$$

При расчетах кристаллизации в уравнении (2) для k используется значение удельной теплоты плавления α -компоненты (алюминия) сплава. Полагаем, что при $T = T_E$ доля твердой фазы равна $f_{s\alpha}$.

После охлаждения металла до температуры эвтектики происходит затвердевание β -компоненты сплава. Ввиду малой взаимной растворимости алюминия и кремния полагаем, что при дальнейшем охлаждении расплава рост твердой фазы подчиняется нормальному механизму, характеризуемому константой роста K_e . Доля твердой фазы f_{se} в затвердевающем эвтектическом расплаве определяется соотношением

$$f_{se} = 1 - \exp\left\{\frac{4}{3}\pi N_p(R^3 - R_\alpha^3)\right\}, \quad (5)$$

где $R(r, z, t) = R_\alpha + \int_{t_E}^t K_e(T_E - T)d\tau$ — радиус зародыша, растущего после момента времени $t = t_E$, когда температура расплава достигла температуры

T_E ; $R_\alpha(r, z, t_E) = r_p + \int_{t_0}^{t_E} K_v \Delta T d\tau$. При расчетах кристаллизации эвтек-

тики в уравнении (2) вместо k используется k_{Si} — удельная теплота плавления для Si и формула

$$\frac{\partial f_{se}}{\partial t} = 4\pi N_p K_e (1 - f_{se}) R^2 (T_E - T).$$

Эвтектическая кристаллизация проходит в диапазоне $T_E > T \geq T_{end}$, где T_{end} — температура полного затвердевания расплава. Доля твердой фазы f_s в процессе полного затвердевания сплава определяется как $f_s = f_{s\alpha} + f_{se}$.

Алгоритм решения основан на использовании конечно-разностной аппроксимации уравнений Навье — Стокса и теплопереноса. В области перемещения капли строится пространственная сетка: $r_i = ih_r$, $i = 0, \dots, I$, $z_j = jh_z$, $j = 0, \dots, J$. Стороны ячеек обозначаются целыми значениями индексов i, j , а центры — полуцелыми значениями $i - 1/2$ и $j - 1/2$. Область неустановившихся течений расплава ограничивается системой последовательно пронумерованных частиц-маркеров, расположенных по контуру капли, которые перемещаются с локальной скоростью жидкости. Определено шесть вариантов пересечения ячейки движущейся границей жидкости, различное сочетание которых используется при расчетах. В подложке применяется сетка вида $r_i = ih_r$, $i = 0, \dots, I$, $z_j = -jh_{zp}$, $j = 0, \dots, J_p$. Распределение температуры описывается значениями в узлах сетки,

составляющие скоростей u , v определяются в серединах боковых граней ячеек, а давление p — в центрах ячеек [18–20].

При аппроксимации уравнений (1) используется неявная конечно-разностная схема. Аппроксимация вязкостных членов осуществляется со вторым порядком точности. Для выполнения требования монотонности схемы пространственные производные в левой части уравнений аппроксимируются с учетом знака скорости в окрестности узла сетки. Основное критическое замечание может сводиться к тому, что погрешность аппроксимации имеет порядок $O(\tau, h)$, однако окончательная проверка численного метода сводится к сравнению полученного результата с данными соответствующего физического эксперимента. Обоснованность применения таких аппроксимаций обсуждалась многими авторами (см. [21] и имеющуюся там библиографию).

Давление и поле скоростей, соответствующие моменту времени t_n , определяются из поэтапного решения системы (1). Первоначально, с использованием значений скоростей с предшествующего временного шага в уравнениях количества движения находились составляющие поля скоростей. Далее, с использованием метода искусственной сжимаемости [20] рассчитывалось давление. Проводилось несколько итераций для согласования найденных скоростей и давления внутри капли и в граничных ячейках до выполнения неравенства $\max |\nabla \cdot \mathbf{u}| \leq \gamma$, где \mathbf{u} — вектор скорости в расплавленном металле с компонентами u , v в радиальном и осевом направлениях (в твердом металле $u = 0$, $v = 0$); γ — заданное малое число ($\gamma = 10^{-4}$). Решение алгебраических систем, получаемых при аппроксимации уравнений движения, осуществляется итерационным методом сопряженных градиентов.

После определения скоростей вычисляется температурное поле в двух сопряженных областях в капле и подложке по уравнениям (2)–(5). Для аппроксимации уравнений используется неявная конечно-разностная схема. Пространственные производные в левой части уравнения (2) в области расплавленного металла аппроксимируются с учетом знака скорости в окрестности каждого узла сетки для выполнения требования о монотонности схемы, имеющей порядок $O(\tau, h)$. В области затвердевшего расплава и подложке исходная задача аппроксимируется с порядком $O(\tau, h^2)$. Решение алгебраических систем, получаемых при аппроксимации уравнений теплопереноса, осуществляется итерационным методом. Для согласования температурных полей в расчетных областях применяется метод простой итерации.

Соотношения

$$r_m^{n+1} = r_m^n + u_m^n \tau_{n+1}; \quad z_m^{n+1} = z_m^n + v_m^n \tau_{n+1}; \quad m = 1, \dots, M(t_n),$$

используются для вычисления новых координат маркеров r_m^{n+1} , z_m^{n+1} на $(n+1)$ -м временном шаге. Здесь u_m^n , v_m^n — скорости перемещения частиц, определенные в соответствии со скоростями жидкости в ближайшей окрестности каждой из них; $M(t_n)$ — число маркеров в момент времени t_n . На каждом временном шаге проводится удаление или добавление частиц для их равномерного расположения по контуру капли и вводится новая нумерация ($M(t_n) \approx 2500$).

Временной шаг τ_{n+1} для проведения расчетов в момент t_{n+1} определяется по соотношению

$$\tau_{n+1} = \frac{\min\{h_r, h_z\}}{K_0 \max_m \{|u_m^n|, |v_m^n|\}},$$

$K_0 \geq 1$ (при расчетах $K_0 = 20$).

Адекватность модели и алгоритма ее реализации подтверждена качественным и количественным совпадением результатов расчетов с данными физических экспериментов [10, 12, 17].

Результаты численных экспериментов. Численное исследование динамики растекания и кристаллизации модифицированной металлической капли на подложке проводилось при следующих параметрах. Исходные данные для капли сплава Al + 6,5 % Si [10, 12, 22]: $d_0 = 3,92 \cdot 10^{-3}$, $6 \cdot 10^{-5}$ м; $v_0 = 3, 50$ м/с; $\mu_0 = 0,00109$ кг/(м·с); $\sigma = 1,07$ Н/м; $c_1 = 1000$ Дж/(кг·К); $\lambda_1 = 70$ Вт/(м·К); $\rho_1 = 2,57 \cdot 10^3$ кг/м³; $\kappa = 3,89 \cdot 10^5$ Дж/кг; $c_2 = 1000$ Дж/(кг·К); $\lambda_2 = 152,5$ Вт/(м·К); $\rho_2 = 2,57 \cdot 10^3$ кг/м³; $\kappa_{Si} = 1,64 \cdot 10^5$ Дж/кг; $T_0 = 903$ К, $T_A = 933$ К, $T_l = 886,85$ К; $T_E = 850$ К; $\beta = 7,1$ К/%; $C_0 = 6,5$ % масс., $k = 0,14$, $K_v = 0,005$ м/(с·К); $K_e = 0,005$ м/(с·К); $\varepsilon = 0,4$; $p_a = 10^5$ Н/м²; $\sigma_0 = 5,7 \cdot 10^{-8}$ Вт/(м²·К⁴). Размер модифицирующих наночастиц $d_p = 10^{-7}$ м, плотность $\rho_p = 5440$ кг/м³, концентрация $m_p = 0,03$ % масс. Для подложки (сталь) [12]: $h_s = 2 \cdot 10^{-3}$ м, $r_3 = 1,5 \cdot 10^{-2}$ м, $1,5 \cdot 10^{-3}$ м, $T_{30} = 473$ К, $c_3 = 550$ Дж/(кг·К), $\rho_3 = 7,8 \cdot 10^3$ кг/м³; $\lambda_3 = 25,1$ Вт/(м·К), $R_{res} = 1,64 \cdot 10^{-6}$ (м²·К)/Вт. Параметры сетки: $I = 440$, $J = 200$, $J_p = 100$.

Для проверки модели кристаллизации рассмотрено объемное затвердевание алюминиевого сплава Al + 6,5 % Si в цилиндрической форме с инокулированными тугоплавкими наноразмерными частицами TiN

в количестве 0,03 % от массы (объемная концентрация наночастиц $N_p = 2,7 \cdot 10^{17} \text{ 1/м}^3$). При расчетах для определения начальных и граничных условий использовались условия эксперимента, в котором фиксировалось изменение температуры при остывании и кристаллизации в центре цилиндрической отливки диаметром 34 мм и высотой 51 мм [10]. Результаты, полученные при численном моделировании и в процессе замеров на опытной установке, приведены на рис. 2. Результаты расчетов хорошо коррелируют с данными физического эксперимента и свидетельствуют о том, что предложенная модель удовлетворительно описывает реальный физический процесс кристаллизации модифицированного сплава при принятых значениях кинетических констант роста.

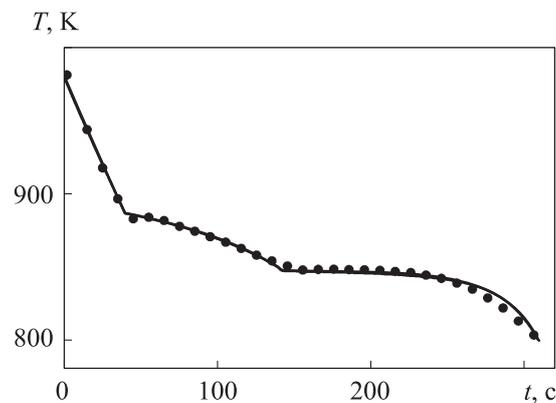


Рис. 2. Изменение температуры при охлаждении и кристаллизации сплава Al + 6,5 % Si:

точки — эксперимент; сплошная линия — расчет

Полученная по результатам расчетов динамика деформации капли диаметром $3,92 \cdot 10^{-3}$ м при $v_0 = 3$ м/с приведена на рис. 3. Расплав модифицирован наноразмерными частицами. Рассчитанные контуры меняющейся свободной поверхности капли для различных моментов времени сравниваются с результатами, представленными в работе [12] и полученными при формировании сплэта в сходных условиях. Определено, что при растекании капли толщина сформировавшегося сплэта в центральной части составляет 0,23 мм, а кристаллизация металла происходит в течение 6,45 мс. После того как расплав, примыкающий к подложке, затвердевает, расходящееся течение жидкости в верхнем слое образует валик на периферии формирующегося сплэта. Движение расплава происходит до тех пор, пока растущая твердая фаза не образует кристаллический каркас.

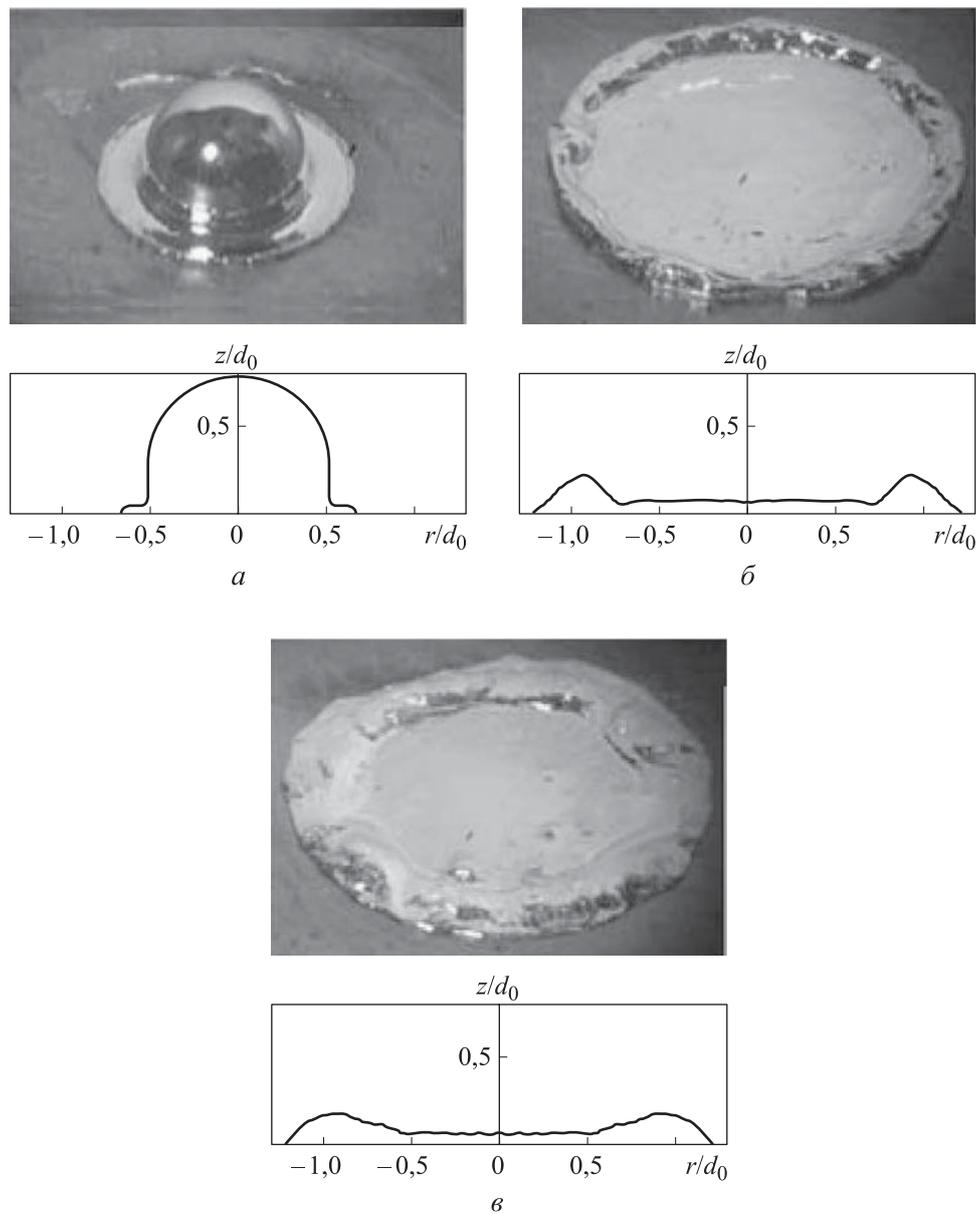


Рис. 3. Динамика поверхности капли после соприкосновения с подложкой при 0,3 (а), 3 (б) и 7 мс (в)

Изменение температуры, переохлаждения расплава, доли твердой фазы в металле за первые 15 мкс в точке соприкосновения с подложкой ($r = 0$) показано на рис. 4. Переохлаждение определяется как $\Delta T = T_l - T$ при $T_{l0} \geq T \geq T_E$ и $\Delta T = T_E - T$ в случае $T_E > T \geq T_{end}$. После контакта расплава с подложкой перегрев снимается в течение 0,15 мкс и происходит переохлаждение металла ниже температуры ликвидуса T_l более чем

на 4 К (рис. 4, а, б). Время метастабильного состояния, когда доля кристаллической фазы практически равна нулю, составляет около 0,1 мкс. Кристаллизация α -компоненты (Al) сплава Al + Si вблизи подложки происходит в течение 4 мкс, достигает значения $f_{s\alpha} = 0,494$, и после небольшого переохлаждения расплава ($\approx 0,1$ К) начинается эвтектическая кристаллизация β -компоненты (Si). Полное затвердевание завершается к моменту времени 11 мкс (см. рис. 4).

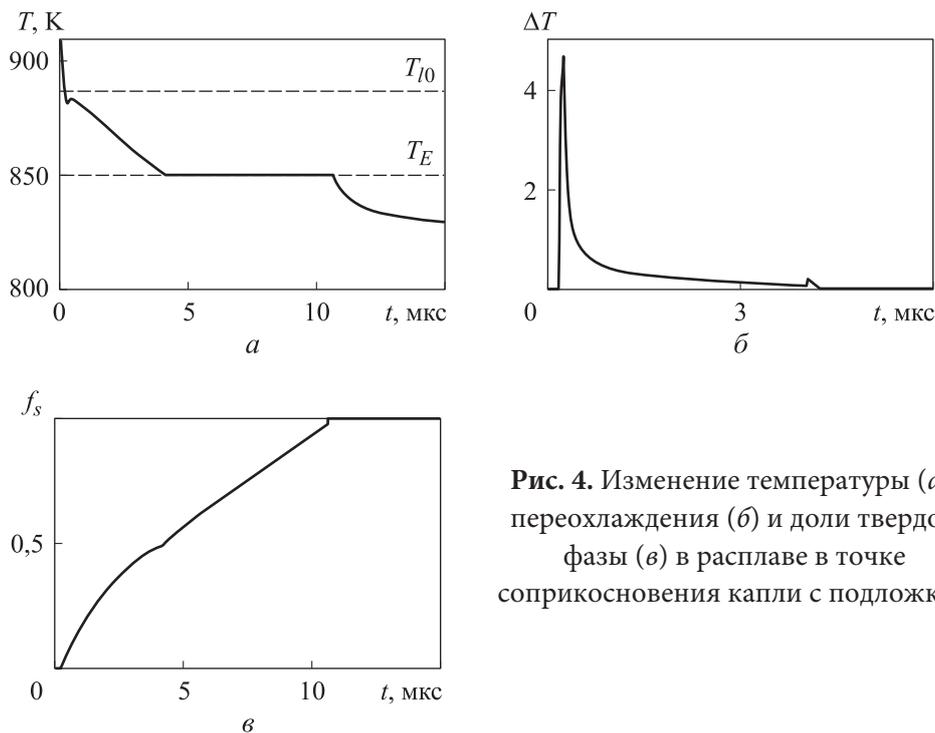


Рис. 4. Изменение температуры (а), переохлаждения (б) и доли твердой фазы (в) в расплаве в точке соприкосновения капли с подложкой

Изменение доли твердой фазы и температуры в слое металла толщиной 0,23 мм вблизи подложки при $r = 0$ в различные моменты времени показано на рис. 5. Согласно полученным результатам, за период времени 15 мкс у поверхности соприкосновения с подложкой образуется двухфазная зона толщиной 0,02 мм (рис. 5, а). Перегрев в расплавленном металле на расстоянии 0,1 мм от подложки сохраняется, так как происходит приток теплоты в ходе движения расплава (рис. 5, б). К моменту времени 0,5 мс в расплаве у поверхности подложки образуется слой затвердевшего металла толщиной 30 мкм, а ширина двухфазной зоны составляет 70 мкм (рис. 5, в).

Изменение температуры и доли твердой фазы в металле до полного затвердевания расплава в точке соприкосновения с подложкой $z = 0$ мм и в плоскости $z = 0,23$ мм при $r = 0$ представлено на рис. 6. По мере того как

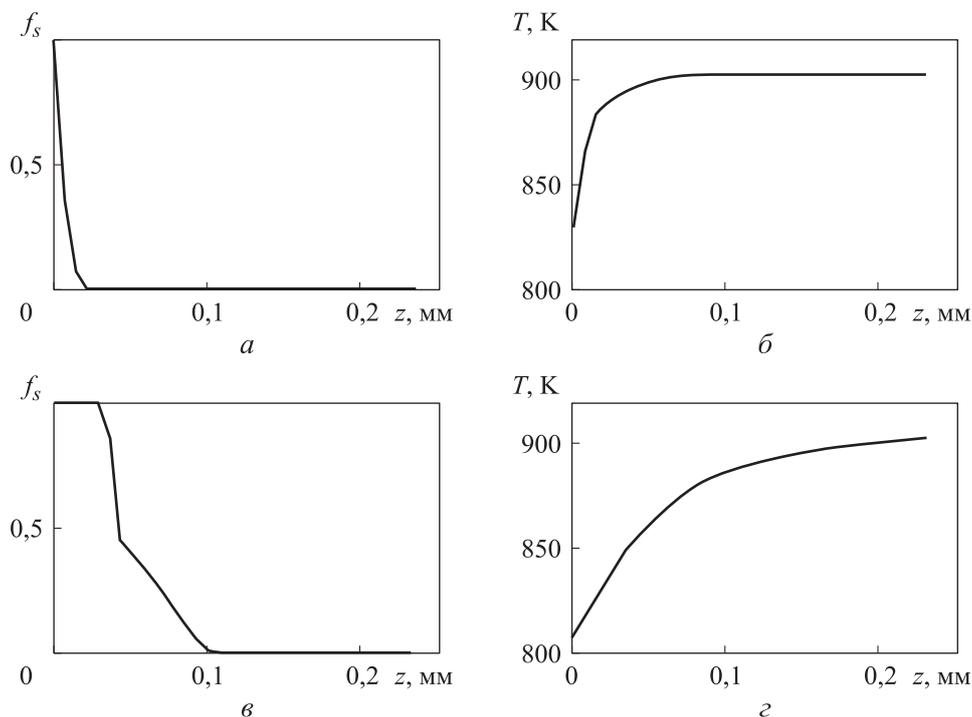


Рис. 5. Распределение доли твердой фазы (а, в) и температуры (б, г) в слое металла вблизи плоскости соприкосновения с подложкой в течение 15 мкс (а, б) и 0,5 мс (в, г)

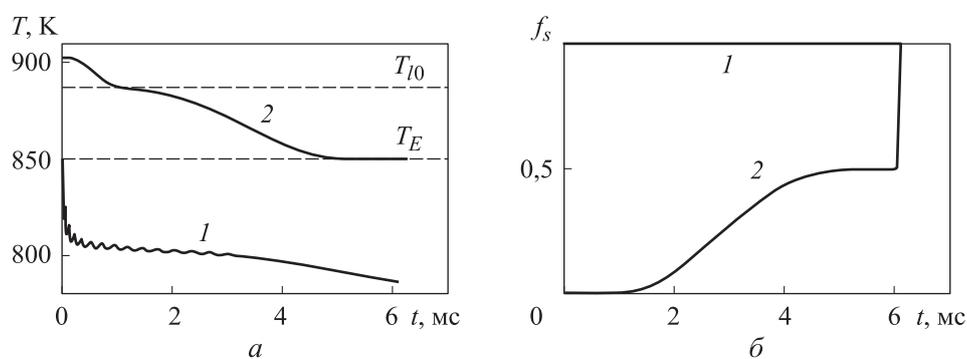


Рис. 6. Изменение температуры (а) и доли твердой фазы (б) в расплаве у подложки (1) и в плоскости свободной поверхности (2) формирующегося сплэта

движение жидкости в вертикальном направлении замедляется, а слой металла становится тоньше, к моменту времени 1 мс в точке $z = 0,23$ мм перегрев снимается. Рост твердой фазы начинается при переохлаждении металла ниже температуры ликвидуса не более чем на 0,01 К, время метастабильного состояния кристаллической фазы составляет около 0,4 мс

(см. рис. 6), кристаллизация α -компоненты сплава длится около 4,3 мс, а эвтектическая кристаллизация β -компоненты — 0,75 мс (рис. 6, б). С момента снятия перегрева в расплаве кристаллизация происходит во всем объеме незатвердевшего металла.

Переохлаждение, темп кристаллизации и время затвердевания существенно меняются с удалением от подложки (см. рис. 4, 6). Особенностью кинетики кристаллизации является наличие различных значений переохлаждений на температурных кривых. При этом температура рекалесценции (температура, при которой происходит локальное выравнивание интенсивностей выделения скрытой теплоты кристаллизации и ее отвод в затвердевшую корку металла и подложку) растет в направлении к свободной поверхности. В результате этого возникает осцилляция температуры и возможен даже нагрев нижних затвердевших слоев капли (рис. 6, а).

На форму сформировавшегося сплэта в основном влияют скорость падения капли на поверхность и ее размер. От температуры подложки существенно зависят переохлаждение, темп кристаллизации и время затвердевания расплава [11]. Полученная при расчетах динамика деформации капли диаметром $d_0 = 6 \cdot 10^{-5}$ м при $v_0 = 50$ м/с и совпадении остальных условий с рассмотренными выше показана на рис. 7. Растекание металла происходит в течение 2 мкс, а толщина сформировавшегося сплэта в центральной части составляет 4,5 мкм.

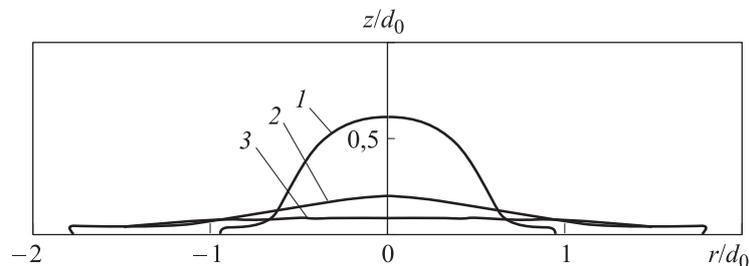


Рис. 7. Форма капли после соприкосновения с подложкой при 0,5 (1), 1,5 (2), 2,0 мкс (3)

Изменение температуры, переохлаждения расплава и доли твердой фазы в затвердевающем металле на поверхности соприкосновения с подложкой и в плоскости $z = 4,5$ мкм формирующегося сплэта при $r = 0$ показано на рис. 8. У поверхности подложки перегрев снимается в течение 0,04 мкс, время метастабильного состояния около 0,07 мкс, кристаллизация α -компоненты сплава происходит за 2,8 мкс, а полное затвердевание — за 3,7 мкс, максимальное переохлаждение 7,5 К, переохлаждение для начала эвтектической кристаллизации 0,15 К. В центральной точке на поверхности

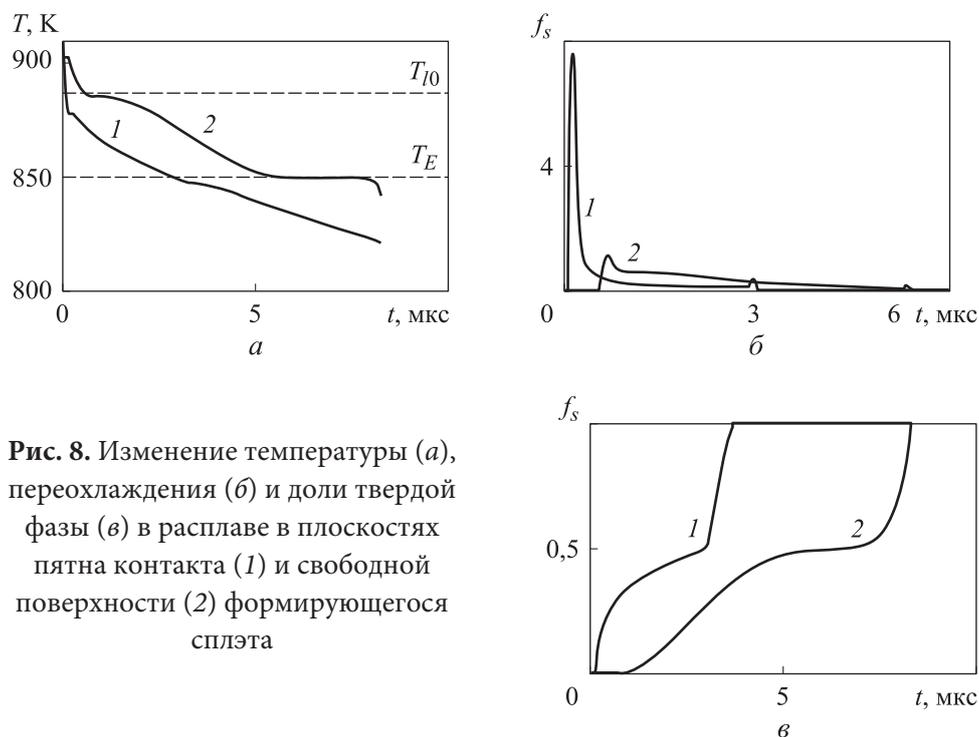


Рис. 8. Изменение температуры (а), переохлаждения (б) и доли твердой фазы (в) в расплаве в плоскостях пятна контакта (1) и свободной поверхности (2) формирующегося сплэта

формирующегося сплэта продолжительность метастабильного состояния составляет 0,42 мкс, кристаллизация α -компоненты происходит за 5 мкс, а эвтектическая кристаллизация β -компоненты — за 2,25 мкс, максимальное переохлаждение 1,2 К.

Во время деформации капли температура расплава на ее свободной поверхности фактически не меняется, а движение жидкости способствует переносу теплоты в направлении подложки, в которую оно отводится. Когда слой металла на подложке становится тонким, скорость в вертикальном направлении снижается, перегрев в расплаве снимается и с 1,5 мкс кристаллизация происходит во всем объеме металла. К моменту времени, когда движение жидкости прекращается (2 мкс), во всем ее объеме существует твердая фаза с долей, не превышающей 0,4 (рис. 9).

Особенность кинетики кристаллизации — наличие двух максимумов переохлаждений на температурных кривых, которые могут принимать значения от нескольких градусов до десятых долей градуса. Особенности изменения переохлаждения расплава и существование второго максимума при эвтектической кристаллизации, который особенно заметен в области интенсивного отвода теплоты вблизи поверхности соприкосновения с подложкой, продемонстрированы на рис. 8, б. Более высокие значения скорости охлаждения способствуют большим значениям переохлаждений.

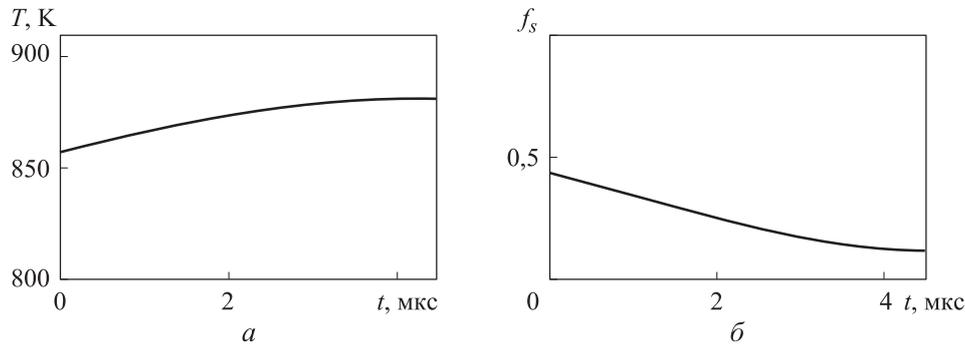


Рис. 9. Изменения температуры (а) и доли твердой фазы (б) в металле растекшейся капли от плоскости соприкосновения с подложкой до свободной поверхности

Ввиду того, что переохлаждения имеют относительно небольшие значения, на основании данных работы [11] можно сделать следующий вывод: гомогенного зарождения кристаллической фазы во время формирования сплэта не происходит.

Заключение. Предложена математическая модель, описывающая процессы деформации и неравновесной кристаллизации жидкой капли бинарного сплава с модифицирующими тугоплавкими наноразмерными частицами при ее соударении с подложкой. Рассчитанные размеры затвердевшего на подложке сплэта и температурные режимы кристаллизации сплава удовлетворительно согласуются с известными экспериментальными данными.

Проведено численное моделирование кинетики затвердевания жидкой капли бинарного сплава (Al + Si), модифицированного наноразмерными частицами, после ее соударения с твердой подложкой. Описаны особенности кристаллизации расплава в зависимости от размеров капли и, как следствие, режимов теплообмена с подложкой. Установлено, что при большой скорости соударения капли с подложкой за время растекания расплава возможно образование лишь небольшой доли твердой фазы. Определено, что независимо от размера капли имеет место объемно-последовательная кристаллизация металла.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Корнев В.Н., Родичев А.Ю., Семенов А.В. Методы восстановления и упрочнения деталей газопламенным напылением. *Сварочное производство*, 2014, № 2, с. 40–43.
- [2] Solonenko O.P., Kudinov V.V., Smirnov A.V., et al. Micro-metallurgy of splats: theory, computer simulation and experiment. *JSME Int. J. Ser. B*, 2005, vol. 48, iss. 3, pp. 366–380. DOI: <https://doi.org/10.1299/jsmeb.48.366>

- [3] Ильиных С.А., Кирнос И.В., Крашанинин В.А. и др. Физико-химические свойства покрытий, получаемых дозвуковым и сверхзвуковым плазменным напылением порошков металлов и их композиций. *Известия вузов. Порошковая металлургия и функциональные покрытия*, 2015, № 1, с. 49–54.
DOI: <https://doi.org/10.17073/1997-308X-2015-1-49-54>
- [4] Фомин В.М., Черепанов А.Н., ред. Плазмохимический синтез ультрадисперсных порошков и их применение для модифицирования металлов и сплавов. Новосибирск, Наука, 1995.
- [5] Cherepanov A.N., Poluboyarov V.A., Solonenko O.P., et al. Impact of mechanical activation and modification of initial powder with refractory nanoparticles on the properties of plasma-sprayed coatings. In: *Progress in plasma processing of materials 2003*. Begell House Inc., 2003, pp. 507–513.
- [6] Borodianskiy K., Zinigrad M., Gedanken A. Aluminum A356 reinforcement by carbide nanoparticles. *JNanoR*, 2011, vol. 13, pp. 41–46.
DOI: <https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/JNanoR.13.41>
- [7] Kuzmanov P.M., Popov S.I., Yovkov L.V., et al. Investigation the effect of modification with nanopowders on crystallization process and microstructure of some alloys. *AIP Conf. Proc.*, 2017, vol. 1893, iss. 1, art. 030104. DOI: <https://doi.org/10.1063/1.5007562>
- [8] Bozhanova N.M., Panov I.T., Manolov V.K., et al. Modification of properties of aluminum protective a nodes by nanopowder materials. *Thermophys. Aeromech.*, 2018, vol. 25, iss. 5, pp. 759–764. DOI: <https://doi.org/10.1134/S0869864318050128>
- [9] Lazarova R., Bojanova N., Dimitrova R., et al. Influence of nanoparticles introducing in the melt of aluminum alloys on castings microstructure and properties. *Inter. Metalcast.*, 2016, vol. 10, iss. 4, pp. 466–476. DOI: <https://doi.org/10.1007/s40962-016-0033-7>
- [10] Popov S., Manolov V., Cherepanov A. Mathematical modelling of crystallization of metal alloys. *Comptes rendus de l'Academie Bulgare des Science*, 2012, vol. 65, no. 4, pp. 441–448.
- [11] Cherepanov A.N., Popov V.N., Solonenko O.P. Numerical analysis of the spreading and crystallization dynamics of the modified metal droplet on the substrate. *Thermophys. Aeromech.*, 2008, vol. 15, iss. 3, pp. 483–489.
DOI: <https://doi.org/10.1134/S0869864308030141>
- [12] Xue M., Heichal Y., Chandra S., et al. Modeling the impact of a molten metal droplet on a solid surface using variable interfacial thermal contact resistance. *Mater. Sci.*, 2007, vol. 42, iss. 1, pp. 9–18. DOI: <https://doi.org/10.1007/s10853-006-1129-x>
- [13] Popov S., Manolov V., Kuzmanov P., et al. Mathematical model of crystallization of multicomponent alloy at presence of nanoparticles. *J. Mater. Sci. Technol.*, 2014, vol. 22, no. 3, pp. 167–174.
- [14] Мастрюков Б.С. Теплофизика металлургических процессов. М., МИСиС, 1996.
- [15] Flemings M.C. *Solidification processing*. McGraw-Hill, 1974.
- [16] Баландин Г.Ф. Основы теории формирования отливки. Ч. 2. М., Машиностроение, 1979.

- [17] Попов В.Н. Моделирование затвердевания металлической капли на холодной подложке. *Математическое моделирование*, 2001, т. 13, № 9, с. 119–127.
- [18] Harlow F.H., Welch J.E. Numerical calculation of time-depend viscous incompressible flow of fluid with free surface. *Phys. Fluids.*, 1965, vol. 8, iss. 12, pp. 2182–2189. DOI: <https://doi.org/10.1063/1.1761178>
- [19] Patankar S.V., Spalding D.B. A calculation procedure for heat, mass and momentum transfer in three-dimensional parabolic flows. *Int. J. Heat Mass Trans.*, 1972, vol. 15, iss. 10, pp. 1787–1806. DOI: [https://doi.org/10.1016/0017-9310\(72\)90054-3](https://doi.org/10.1016/0017-9310(72)90054-3)
- [20] Chorin A.J. A numerical method for solving incompressible viscous flow problems. *J. Comput. Phys.* 1967, vol. 137, iss. 2, pp. 118–125. DOI: <https://doi.org/10.1006/jcph.1997.5716>
- [21] Roache P. Computational fluid dynamics. Hermosa Publ., 1976.
- [22] Зиновьев В.Е. Теплофизические свойства металлов при высоких температурах. М., Metallurgia, 1989.

Попов Владимир Николаевич — д-р физ.-мат. наук, старший научный сотрудник, главный научный сотрудник ИТПМ СО РАН (Российская Федерация, 630090, Новосибирск, ул. Институтская, д. 4/1).

Черепанов Анатолий Николаевич — д-р физ.-мат. наук, профессор, главный научный сотрудник ИТПМ СО РАН (Российская Федерация, 630090, Новосибирск, ул. Институтская, д. 4/1).

Просьба ссылаться на эту статью следующим образом:

Попов В.Н., Черепанов А.Н. Численное моделирование кристаллизации модифицированной металлической капли при растекании на подложке. *Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер. Естественные науки*, 2019, № 6, с. 18–39.

DOI: 10.18698/1812-3368-2019-6-18-39

NUMERICAL SIMULATION OF CRYSTALLIZATION OF A MODIFIED METAL DROP DURING METAL SPREADING ON A SUBSTRATE

V.N. Popov

popov@itam.nsc.ru

A.N. Cherepanov

ancher@itam.nsc.ru

Siberian branch of Russian Academy of Sciences, Khristianovich Institute of Theoretical and Applied Mechanics, Novosibirsk, Russian Federation

Abstract

The purpose of the research was to numerically simulate the processes when melting drops fall on a substrate. The paper deals with the solidification on the metal surface of a binary aluminum alloy modified by

Keywords

Numerical simulation, metal drop, substrate, modification, aluminum alloy, nanosized refractory particles, crystallization

activated refractory nanosized particles, which are the centers of crystalline phase nucleation. We formulated a mathematical model which describes the thermo- and hydrodynamic phenomena in the drop upon interaction with a solid substrate, heterogeneous nucleation during melt cooling, and subsequent crystallization. The flow in a liquid is described by the Navier — Stokes equations in the Boussinesq approximation. The position of the free boundary of the melt is fixed by marker particles moving with the local liquid velocity. On the melt — substrate contact surface, thermal resistance is taken into account. The hydrodynamic problem is considered under conditions of crystallization of molten metal. The temperature conditions and the kinetics of the growth of the solid phase in the solidifying aluminum alloy are described for various sizes of formed splats. Satisfactory agreement was found between the shape of the splat obtained by the results of numerical simulation and the available experimental data. The adequacy of the crystallization model in the presence of ultradisperse refractory particles in a binary alloy is confirmed. It was determined that, regardless of the size of the drop, bulk crystallization of the metal takes place. It was found that at a high rate of collision of a drop with a substrate during the melt spreading, a small fraction of the solid phase can be formed

Received 19.02.2019

© Author(s), 2019

The work was carried out as part of the Program of Fundamental Scientific Research of State Academies of Sciences for 2013–2020 (project no. 0323-2018-0012)

REFERENCES

- [1] Korenev V.N., Rodichev A.Yu., Semenov A.V. Rework and strengthening techniques of parts by gas-flame sputtering. *Svarochnoe proizvodstvo*, 2014, no. 2, pp. 40–43 (in Russ.).
- [2] Solonenko O.P., Kudinov V.V., Smirnov A.V., et al. Micro-metallurgy of splats: theory, computer simulation and experiment. *JSME Int. J. Ser. B*, 2005, vol. 48, iss. 3, pp. 366–380. DOI: <https://doi.org/10.1299/jsmeb.48.366>
- [3] Il'inykh S.A., Kirnos I.V., Krashaninin V.A., et al. Physicochemical properties of coatings fabricated by subsonic and supersonic plasma deposition of powders of metals and their compositions. *Izvestiya vuzov. Poroshkovaya metallurgiya i funktsional'nye pokrytiya* [Universities' Proceedings. Powder Metallurgy and Functional Coatings], 2015, no. 1, pp. 49–54 (in Russ.). DOI: <https://doi.org/10.17073/1997-308X-2015-1-49-54>

- [4] Fomin V.M., Cherepanov A.N., eds. *Plazmokhimicheskiy sintez ultradispersnykh poroshkov i ikh primeneniye dlya modifitsirovaniya metallov i splavov* [Plasma chemical synthesis of ultradisperse powders and their application for modified metals and alloys]. Novosibirsk, Nauka Publ., 1995.
- [5] Cherepanov A.N., Poluboyarov V.A., Solonenko O.P., et al. Impact of mechanical activation and modification of initial powder with refractory nanoparticles on the properties of plasma-sprayed coatings. In: *Progress in plasma processing of materials 2003*. Begell House Inc., 2003, pp. 507–513.
- [6] Borodianskiy K., Zinigrad M., Gedanken A. Aluminum A356 reinforcement by carbide nanoparticles. *JNanoR*, 2011, vol. 13, pp. 41–46.
DOI: <https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/JNanoR.13.41>
- [7] Kuzmanov P.M., Popov S.I., Yovkov L.V., et al. Investigation the effect of modification with nanopowders on crystallization process and microstructure of some alloys. *AIP Conf. Proc.*, 2017, vol. 1893, iss. 1, art. 030104. DOI: <https://doi.org/10.1063/1.5007562>
- [8] Bozhanova N.M., Panov I.T., Manolov V.K., et al. Modification of properties of aluminum protective a nodes by nanopowder materials. *Thermophys. Aeromech.*, 2018, vol. 25, iss. 5, pp. 759–764. DOI: <https://doi.org/10.1134/S0869864318050128>
- [9] Lazarova R., Bojanova N., Dimitrova R., et al. Influence of nanoparticles introducing in the melt of aluminum alloys on castings microstructure and properties. *Inter. Metalcast.*, 2016, vol. 10, iss. 4, pp. 466–476. DOI: <https://doi.org/10.1007/s40962-016-0033-7>
- [10] Popov S., Manolov V., Cherepanov A. Mathematical modelling of crystallization of metal alloys. *Comptes rendus de l'Academie Bulgare des Science*, 2012, vol. 65, no. 4, pp. 441–448.
- [11] Cherepanov A.N., Popov V.N., Solonenko O.P. Numerical analysis of the spreading and crystallization dynamics of the modified metal droplet on the substrate. *Thermophys. Aeromech.*, 2008, vol. 15, iss. 3, pp. 483–489.
DOI: <https://doi.org/10.1134/S0869864308030141>
- [12] Xue M., Heichal Y., Chandra S., et al. Modeling the impact of a molten metal droplet on a solid surface using variable interfacial thermal contact resistance. *Mater. Sci.*, 2007, vol. 42, iss. 1, pp. 9–18. DOI: <https://doi.org/10.1007/s10853-006-1129-x>
- [13] Popov S., Manolov V., Kuzmanov P., et al. Mathematical model of crystallization of multicomponent alloy at presence of nanoparticles. *J. Mater. Sci. Technol.*, 2014, vol. 22, no. 3, pp. 167–174.
- [14] Mastryukov B.S. *Teplofizika metallurgicheskikh protsessov* [Thermal physics of metallurgic processes]. Moscow, MISIS Publ., 1996.
- [15] Flemings M.C. *Solidification processing*. McGraw-Hill, 1974.
- [16] Balandin G.F. *Osnovy teorii formirovaniya otlivki. Ch. 2* [Foundation of cast forming theory. P. 2]. Moscow, Mashinostroenie Publ., 1979.
- [17] Popov V.N. Modelling of the solidification of a metal drop on a cold substrate. *Matematicheskoe modelirovanie*, 2001, vol. 13, no. 9, pp. 119–127 (in Russ.).

[18] Harlow F.H., Welch J.E. Numerical calculation of time-depend viscous incompressible flow of fluid with free surface. *Phys. Fluids.*, 1965, vol. 8, iss. 12, pp. 2182–2189.

DOI: <https://doi.org/10.1063/1.1761178>

[19] Patankar S.V., Spalding D.B. A calculation procedure for heat, mass and momentum transfer in three-dimensional parabolic flows. *Int. J. Heat Mass Trans.*, 1972, vol. 15, iss. 10, pp. 1787–1806. DOI: [https://doi.org/10.1016/0017-9310\(72\)90054-3](https://doi.org/10.1016/0017-9310(72)90054-3)

[20] Chorin A.J. A numerical method for solving incompressible viscous flow problems. *J. Comput. Phys.* 1967, vol. 137, iss. 2, pp. 118–125.

DOI: <https://doi.org/10.1006/jcph.1997.5716>

[21] Roache P. Computational fluid dynamics. Hermosa Publ., 1976.

[22] Zinovyev V.E. Теплофизические свойства металлов при vysokikh temperaturakh [Thermal physical properties of metals at high temperatures]. Moscow, Metallurgiya Publ., 1989.

Popov V.N. — Dr. Sc. (Phys.-Math.), Senior Researcher, Chief Researcher, Siberian branch of Russian Academy of Sciences, Khristianovich Institute of Theoretical and Applied Mechanics (Institutskaya ul. 4/1, Novosibirsk, 630090 Russian Federation).

Cherepanov A.N. — Dr. Sc. (Phys.-Math.), Professor, Chief Researcher, Siberian branch of Russian Academy of Sciences, Khristianovich Institute of Theoretical and Applied Mechanics (Institutskaya ul. 4/1, Novosibirsk, 630090 Russian Federation).

Please cite this article in English as:

Popov V.N., Cherepanov A.N. Numerical simulation of crystallization of a modified metal drop during metal spreading on a substrate. *Herald of the Bauman Moscow State Technical University, Series Natural Sciences*, 2019, no. 6, pp. 18–39 (in Russ.).

DOI: [10.18698/1812-3368-2019-6-18-39](https://doi.org/10.18698/1812-3368-2019-6-18-39)