УДК 519.6:621.7

МОДЕЛИРОВАНИЕ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ В ПОВЕРХНОСТНОМ СЛОЕ МЕТАЛЛА, МОДИФИЦИРОВАННОМ НАНОЧАСТИЦАМИ ПРИ ИМПУЛЬСНОМ ИНДУКЦИОННОМ НАГРЕВЕ

В. Г. Щукин, В. Н. Попов, О. А. Шмагунов

Институт теоретической и прикладной механики им. С. А. Христиановича СО РАН, 630090 Новосибирск, Россия E-mails: shchukin@itam.nsc.ru, popov@itam.nsc.ru, shmag@itam.nsc.ru

Проведено численное моделирование процессов кристаллизации при модифицировании поверхностного слоя сплава на основе железа (Fe–C) после импульсного воздействия высокочастотным электромагнитным полем для нагрева и плавления подложки. С помощью математической модели, описывающей термодинамические явления, исследуются процессы разогрева, плавления и последующего затвердевания металла. Постулируется, что наноразмерные тугоплавкие частицы, равномерно распределенные по объему расплава, при его переохлаждении способствуют быстрой кристаллизации за счет гетерогенного зародышеобразования. Установлено, что условия зародышеобразования и кристаллизации существенно различаются в объеме расплава и максимальное количество центров кристаллизации возникает в зонах, где отвод тепла происходит с наибольшей скоростью. Получена оценка распределения дисперсности кристаллической структуры в объеме затвердевшего металла.

Ключевые слова: численное моделирование, модифицирование металла, импульсный индукционный нагрев, теплоперенос, наноразмерные тугоплавкие частицы, гетерогенное зародышеобразование, кристаллизация, сплав на основе железа.

DOI: 10.15372/PMTF20220403

Введение. Сплавы железа используются практически во всех отраслях современного производства. Для улучшения эксплуатационных свойств деталей и конструкций широко применяется легирование или модифицирование поверхностного слоя металла при воздействии энергии лазерного излучения либо высокочастотного индукционного поля [1, 2]. Перспективным методом управления структурообразованием является внесение в расплавленный металл наноразмерных тугоплавких частиц, что способствует гетерогенному зародышеобразованию при затвердевании [3, 4]. Использование такой технологии позволяет увеличить количество центров кристаллизации и измельчить составляющие затвердевшего металла. В качестве модификаторов используются наноразмерные частицы тугоплавких соединений (нитриды, карбиды, карбонитриды и др.). Экспериментально подтверждено уменьшение среднего размера зерна в металле, приводящее к улучшению его прочностных свойств [5, 6]. В [2] экспериментально исследовано влияние лазерной обра-

Работа выполнена в рамках государственного задания Института теоретической и прикладной механики СО РАН (номер государственной регистрации 121030500137-5).

[©] Щукин В. Г., Попов В. Н., Шмагунов О. А., 2022

ботки с применением наноразмерных частиц на поверхностное упрочнение углеродистой стали и установлено, что микротвердость увеличивается в три раза, а износостойкость модифицированного слоя — на 40 % по сравнению с исходным сплавом. Однако процессы кристаллизации модифицированного расплава исследованы недостаточно.

Для управления процессом получения нано- и микроразмерных структур при затвердевании металлов в различных технологических процессах необходимо изучить механизмы зарождения и затвердевания кристаллов. Численное моделирование, широко используемое при исследовании природных и технологических процессов, часто является единственным способом получить представление о закономерностях протекания этих процессов. В настоящее время большинство работ, посвященных исследованию процессов кристаллизации расплавов металлов и сплавов, основаны на классической теории нуклеации и роста частиц, обобщенной в [7]. Так, расчеты скоростей нуклеации различных фаз при быстром охлаждении расплава Ni-B, проведенные в рамках этой теории, позволили объяснить некоторые экспериментальные данные о конечной макроструктуре сплава [8]. В [9] численное моделирование затвердевания модифицированного металла проведено для случая, когда все наноразмерные частицы в расплаве становятся центрами кристаллизации. Однако экспериментальные данные [5] частично это не подтвердили. Попытки описания гетерогенного зародышеобразования предпринимаются уже в течение длительного времени (см., например, [10]), однако широкого распространения при исследовании кристаллизации в реальных технологических процессах эти модели не получили.

В работах [11, 12] при исследовании процессов гетерогенного зародышеобразования и кристаллизации бинарных сплавов алюминия и железа с диаграммами состояний эвтектического типа использована математическая модель затвердевания металла, модифицированного тугоплавкими наноразмерными частицами. С использованием результатов численного моделирования описаны особенности кинетики гетерогенного зародышеобразования и кристаллизации расплава в цилиндрических тиглях. Показано, что результаты численных расчетов удовлетворительно согласуются с данными экспериментальных исследований. Однако вопрос о применимости предложенного подхода для исследования затвердевания сплавов в различных технологических процессах поверхностной обработки до сих пор не решен. Поэтому разработка моделей затвердевания многокомпонентных сплавов, описывающих процессы зародышеобразования и кристаллизации в широком диапазоне исходных параметров, и апробация этих моделей при изучении процессов затвердевания металлов в различных условиях остается актуальной задачей.

В настоящей работе исследуются процессы кристаллизации сплава Fe — 0.49~% C, модифицированного тугоплавкими наноразмерными частицами в результате воздействия на поверхность образца мощного импульса высокочастотного электромагнитного поля. Описываются разогрев и плавление металла, теплоперенос в расплаве и далее, после окончания действия импульса, зарождение и увеличение объема твердой фазы. Распределение частиц модифицирующего материала, проникающего в расплавленный металл с поверхности подложки, полагается однородным по объему расплава, что подтверждается результатами ряда теоретических и экспериментальных исследований [2, 9]. Сформулирована математическая модель, описывающая гетерогенное зародышеобразование и последующую кристаллизацию первичной фазы расплава (Fe). Определены кинетика роста твердой фазы и температурные режимы в затвердевающем металле. С увеличением объема твердой фазы металла температура ликвидуса изменяется в зависимости от концентрации растворенного углерода в расплаве согласно правилу неравновесного рычага. С использованием результатов численного моделирования оцениваются характеристики процесса затвердевания, а также применимость модели кристаллизации при наличии наноразмерных частиц в бинарном сплаве на основе железа.



Рис. 1. Схема воздействия индукционного импульса: 1 — индуктор, 2 — металлическая подложка, 3 — частицы модифицирующего материала, 4 — расплав, 5 — граница зоны расплава

Математическая модель. Схема воздействия короткого импульса высокочастотного электромагнитного поля на металлическую подложку приведена на рис. 1. Цилиндрическая головка индуктора электромагнитного поля расположена над плоской поверхностью пластины из сплава железа, и зазор между ними очень мал. Импульс переменного тока высокой частоты f, пропускаемого через индуктор, имеет продолжительность t_H . Индукционное воздействие осуществляется через область радиусом r_0 . Технологически это осуществимо при использовании концентраторов магнитного поля [13], которые расположены вокруг головки индуктора и обеспечивают значительное увеличение максимального значения плотности энергопоглощения p_0 на поверхности металлической подложки при его равномерном распределении в узкой области, соответствующей размерам рабочей зоны индуктора, и резком уменьшении на краях этой области. Распределение электромагнитной энергии в металле может быть описано эмпирическими формулами, используемыми в инженерных расчетах индукционных нагревателей [14]. Под воздействием энергии индуцированных в подложке вихревых токов металл нагревается и плавится. Фазовый переход происходит при температуре плавления материала подложки T_{l0} . Поверхность подложки покрыта слоем специально подготовленных наноразмерных плакированных частиц тугоплавкого соединения, которые, проникая в расплав, способствуют возникновению центров кристаллизации [2, 6]. Полагается, что в образовавшейся жидкой лунке под действием капиллярных и термогравитационных сил развивается конвективное течение, способствующее однородному распределению частиц в расплаве. После завершения действия импульса за счет теплообмена с окружающей средой и отвода тепла в неразогревшийся материал подложки расплавленный металл остывает и кристаллизуется.

С целью упрощения задачи положим значения теплофизических характеристик материала подложки в жидком, твердом и двухфазном состояниях одинаковыми и равными табличным значениям при температурах, близких к температуре в точке плавления. Поскольку характерный размер l_p проникающих в расплав частиц значительно меньше размера образующейся лунки расплава, а их массовая доля m_p не превышает 0,1 %, теплофизические параметры расплава с инокуляторами и чистого сплава корректно положить равными. Процесс плавления металла описывается в приближении Стефана. Будем полагать, что при рассматриваемых режимах нагрева плоская форма свободной поверхности жидкости обусловлена малыми значениями конвективных скоростей. Положение границ r_g , z_g расчетной области выбирается таким образом, чтобы они не оказывали влияния на исследуемые процессы в зоне плавления и кристаллизации.

Распределение температурного поля в твердом и жидком материалах подложки описывается уравнениями теплопереноса в цилиндрической системе координат (r, z). В период действия импульса электромагнитного поля уравнение теплопереноса имеет вид

$$c_p \rho T_t = \lambda \nabla^2 T + \frac{p_0}{r_0} \chi(r, z), \qquad 0 \leqslant r \leqslant r_g, \quad -z_g \leqslant z \leqslant 0, \quad 0 < t \leqslant t_H.$$
(1)

При плавлении материала скорость v_n для каждой точки границы расплав — твердая фаза определяется из условия

$$\varkappa \boldsymbol{v}_n = \lambda \Big(\frac{\partial T}{\partial \boldsymbol{n}} \Big|_{T=T_{l0}-} - \frac{\partial T}{\partial \boldsymbol{n}} \Big|_{T=T_{l0}+} \Big),$$

где n — единичный вектор нормали. После завершения действия импульса распространение тепла в подложке описывается уравнением

$$c_p \rho T_t = \lambda \nabla^2 T + \varkappa \rho(f_s)_t, \qquad 0 \leqslant r \leqslant r_g, \quad -z_g \leqslant z \leqslant 0, \quad t > t_H.$$
⁽²⁾

В уравнениях (1), (2) T — температура; t — время; $0 \leq f_s \leq 1$ — доля твердой фазы в материале; $\chi(r, z)$ — безразмерная функция, описывающая распределение энерговыделения в подложке; \varkappa — удельная теплота плавления; c_p , ρ , λ — удельная теплоемкость, плотность и теплопроводность материала подложки; p_0 — удельная мощность, поглощаемая единицей площади поверхности нагреваемого тела в круговой области радиусом r_0 .

Положим, что центральная точка "пятна" индукционного воздействия радиусом r_0 расположена в точке поверхности с координатами (0,0). В этом случае распределение энерговыделения по толщине пластины в уравнении (1) согласно [14] можно описать следующими соотношениями:

$$\chi(r,z) = e^{2z/\Delta_1}, \qquad T(r,0) \leqslant T_{\mathrm{K}}, \quad r \leqslant r_0, \quad z \leqslant 0,$$

$$\chi(r,z) = \begin{cases} e^{2z/\Delta_2}, & -z_{\mathrm{K}}(r) \leqslant z \leqslant 0, \\ e^{-2z_{\mathrm{K}}/\Delta_2} e^{2(z+z_{\mathrm{K}})/\Delta_1}, & z < -z_{\mathrm{K}}(r), \end{cases} \qquad T(r,0) > T_{\mathrm{K}}, \quad r \leqslant r_0.$$

Здесь $\Delta_1 = \sqrt{\rho_{e1}/(\pi\mu_0\mu_1 f)}$ — глубина проникания тока в материал (толщина скинслоя); μ_0 , μ_1 — магнитная постоянная и относительная магнитная проницаемость сплава при температуре ниже точки магнитных превращений $T_{\rm K}$ (точка Кюри), соответственно; ρ_{e1} — удельное электрическое сопротивление, f — рабочая частота генератора поля; $z_{\rm K}(r)$ — расстояние от поверхности подложки до точки, в которой температура магнитных превращений равна $T = T_{\rm K}$. При достижении температуры магнитных превращений относительная магнитная проницаемость уменьшается до значения $\mu_2 = 1$, а удельное электрическое сопротивления ρ_{e2} , вследствие чего глубина проникания тока в материал увеличивается и становится равной $\Delta_2 = \sqrt{\rho_{e2}/(\pi\mu_0\mu_2 f)}$.

Граничные условия для уравнений (1), (2) зададим в следующем виде. На оси симметрии выполняется условие

$$r\frac{\partial T}{\partial r} = 0, \qquad r = 0, \quad -z_g \leqslant z \leqslant 0.$$
 (3)

На удаленной боковой границе расчетной области теплообмен полагается пренебрежимо малым:

$$\lambda \frac{\partial T}{\partial r} = 0, \qquad r = r_g, \quad -z_g \leqslant z \leqslant 0. \tag{4}$$

На поверхности пластины (z = 0) в период действия источника нагрева $(t \leq t_H)$ в области индукционного воздействия $(0 \leq r \leq r_0)$ теплообменом с окружающей средой также можно пренебречь вследствие очень малого размера зазора между индуктором и подложкой и влияния взаимооблучения:

$$\lambda \frac{\partial T}{\partial z} = 0,\tag{5}$$

а вне этой области ($r_0 < r \leqslant r_g$) теплообмен осуществляется посредством конвекции и излучения:

$$\lambda \frac{\partial T}{\partial z} = \alpha (T_{env} - T). \tag{6}$$

После завершения действия импульса $(t > t_H)$ теплоотвод путем конвекции и излучения (6) наблюдается на всей поверхности подложки $(0 \leq r \leq r_g)$. На нижней границе расчетной области $(z = -z_g)$ имеем

$$\lambda \frac{\partial T}{\partial z} = \alpha (T - T_{env}), \qquad 0 \leqslant r \leqslant r_g.$$
⁽⁷⁾

Здесь $\alpha = \alpha_r + \alpha_{con}$ — коэффициент теплообмена; $\alpha_r = \varepsilon \sigma_{\rm B} (T^2 + T_{env}^2) (T + T_{env})$ — коэффициент теплообмена путем излучения; $\sigma_{\rm B}$ — постоянная Стефана — Больцмана; ε — степень черноты материала подложки; T_{env} — температура окружающей среды; α_{con} — коэффициент конвективного теплообмена.

Начальная температура подложки (t = 0) равна $T = T_0$.

При плавлении материала подложки в расплав проникают хорошо смачиваемые тугоплавкие наноразмерные частицы. Согласно [10] в этом случае условия для гомогенного зародышеобразования в расплавленном объеме металла не успевают возникнуть, так как наличие затравок способствует интенсивному гетерогенному зародышеобразованию и последующему росту кристаллической фазы. В предположении, что частицы-инокуляторы имеют форму куба, скорость образования зародышей кристаллов в сплаве определяется по формуле

$$I = n_s \frac{k_{\rm B}T}{h} \exp\Big(-\frac{E + \Delta G^*}{k_{\rm B}T}\Big),$$

где $n_s = 6n_p l_p^2/l_a^2$ — максимальная концентрация нуклеационных участков в единице объема расплава; $n_p = m_p \rho/(100\rho_p l_p^3)$ — объемная концентрация наноразмерных частиц в расплаве; ρ — плотность материала подложки; ρ_p — плотность вещества частицы; l_p — длина ребра частицы; l_a — межатомное расстояние в расплаве; h — постоянная Планка; $k_{\rm B}$ — постоянная Больцмана; E — энергия активации процесса диффузии в расплаве; $\Delta G^* = \pi \sigma_{12} R_0^2 (1 - \cos \varphi)^2 (2 + \cos \varphi)/3$ — энергия Гиббса образования критического зародыша; $R_0 = 2\sigma_{12} T_{l0}/(\varkappa \rho \Delta T)$ — критический радиус зародыша; σ_{12} — поверхностное натяжение на поверхности раздела зародыш — расплав; $\Delta T = T_l - T$ — величина переохлаждения; T_l — температура ликвидуса, соответствующая текущему составу расплава; φ — величина угла смачивания, или контактного угла, влияющая на работу по образования нию зародышей на гранях кубических наночастиц.

Увеличение объемной доли твердой фазы f_s в процессе затвердевания жидкого металла начиная с момента времени t_{l0} , когда температура в данной точке уменьшилась до значения T_{l0} , описывается уравнением, подобным уравнению, введенному Колмогоровым [15]:

$$f_s(r, z, t) = 1 - \exp\left(-\int_{t_{l_0}}^t N(r, z, \tau) V_s(r, z, \tau) \, d\tau\right),$$

где $V_s(r, z, t) = (4\pi/3)(R_{\alpha}^3 - R_{e0}^3)$ — объем твердой фазы, образовавшейся на одной наноразмерной частице. Будем полагать, что увеличение объема кристаллической фазы определяется нормальным механизмом и линейной зависимостью скорости роста от величины переохлаждения: $\partial R_{\alpha}/\partial t = K_{\alpha} \Delta T$ [7]. (Здесь K_{α} — кинетическая константа [6, 7];

$$R_{\alpha}(r,z,t) = R_{e0} + \int_{t_{l0}}^{t} K_{\alpha} \Delta T \, d\tau$$
 — радиус кристалла; $R_{e0} = (1,5/\pi)^{1/2} l_p$ — начальный ради-

ус эквивалентной сферической частицы, площадь поверхности которой равна поверхности кубической наночастицы-затравки.) Зная изменения во времени скорости нуклеации I и доли твердой фазы f_s , нетрудно вычислить количество центров кристаллизации первичной фазы, или α -фазы, образовавшихся при затвердевании сплава к моменту времени t:

$$N(r, z, t) = \int_{t_{l0}}^{t} I(r, z, \tau) (1 - f_s(r, z, \tau)) \, d\tau.$$

Согласно [7] зависимость величины переохлаждения расплава $\Delta T=T_l-T$ от степени затвердевания можно описать формулой

$$\Delta T = T_A - \beta_0 C_0 / (1 - f_s)^{1 - k} - T.$$

Здесь температура ликвидуса T_l аппроксимирована ее зависимостью от концентрации растворенного компонента (углерода); T_A — температура плавления чистого металларастворителя (Fe); β_0 — модуль коэффициента наклона линии ликвидуса на диаграмме состояния Fe–C. Массовая доля растворенного компонента определяется уравнением неравновесного рычага $C = C_0/(1 - f_s)^{1-k}$ [7], где C_0 — исходная массовая доля компонента; k — коэффициент распределения растворенного компонента. Увеличение объема твердой фазы железа происходит в температурном интервале $T_{l0} \ge T \ge T_E$, где $T_{l0} = T_A - \beta_0 C_0$; T_E — температура эвтектики. Будем полагать, что при $T = T_E$ объемная доля твердой фазы равна f_{sE} .

Заметим, что в бинарном сплаве (в рассматриваемом случае в сплаве Fe–C) первичной твердой фазой (α -фазой), кристаллизующейся при остывании расплава, являются зерна аустенита. Эвтектика, или β -фаза, кристаллизуется в конце процесса затвердевания, и, поскольку доля эвтектики в углеродистых сталях мала, в данной модели при выполнении условия $T = T_E$ доля твердой фазы в расплаве f_s скачкообразно увеличивается от значения $f_s = f_{sE}$ до значения $f_s = 1$.

Результаты численных экспериментов. Численные исследования проводились при следующих значениях параметров: $r_0 = 5$ мм, $z_g = 2,25$ мм, $r_g = 7,5$ мм, $t_H = 50$ мс, $T_{env} = 300$ K, $T_0 = 300$ K, $\alpha_{con} = 100$ BT/(M²·K), $p_0 = 5,2 \cdot 10^9$ BT/M², f = 1200 кГц, $\rho = 7100$ кг/M³, $c_p = 680$ Дж/(кг·K), $\lambda = 30$ BT/(M·K), $\varkappa = 2,77 \cdot 10^5$ Дж/кг, $T_A = 1803$ K, $T_{l0} = 1758$ K, $T_E = 1420$ K, $\beta_0 = 91,7$ (%)⁻¹, $C_0 = 0,49$ %, k = 0,5, $K_{\alpha} = 10^{-3}$ м/(с·K), $\varepsilon = 0,5, \sigma_{\rm B} = 5,67 \cdot 10^{-8}$ Дж/(с·M²·K⁴), $\mu_0 = 4\pi \cdot 10^{-7}$ Гн/м, $\mu_1 = 14, \rho_{e1} = 5,2 \cdot 10^{-7}$ Ом·м, $\mu_2 = 1, \rho_{e2} = 1,0 \cdot 10^{-6}$ Ом·м, $T_{\rm K} = 1041$ K, $\rho_p = 5440$ кг/м³ (TiN), $m_p = 0,03$ %, $l_p = 8 \cdot 10^{-8}$ м, $l_a = 2,9 \cdot 10^{-10}$ м, $E = 9,6 \cdot 10^{-20}$ Дж, $\sigma_{12} = 0,2$ Дж/м², $k_{\rm B} = 1,38 \cdot 10^{-23}$ Дж/K, $h = 6,626 \cdot 10^{-34}$ Дж·с. Поскольку величина угла смачивания, необходимая для выполнения условия равномерного перемешивания наночастиц в расплаве, должна быть достаточно малой, в расчетах было принято $\varphi = 5^{\circ}$ [11, 12].

Для реализации настоящей модели, включающей уравнения теплопереноса и граничные условия (1)–(7), применялся конечно-разностный алгоритм. Расчетная область разбивалась на $I \times K$ одинаковых ячеек. Использовались переменные временные шаги τ вдоль



Рис. 2. Распределения температуры на поверхности подложки (a) и по ее толщине при r = 0 (b) в различные моменты времени: 1 - t = 50 мс, 2 - t = 77 мс; штриховая линия — $T_{l0} = 1758$ К

оси t. Системы разностных уравнений строились посредством неявной аппроксимации балансных соотношений, получаемых интегрированием уравнений (1), (2) с учетом соответствующих граничных условий. Распределение температуры задавалось ее значениями в узлах сетки.

Используется следующий порядок действий. На текущем временном шаге вычисляется распределение температуры в подложке под воздействием энергии высокочастотного электромагнитного поля. При выполнении условия появления жидкой фазы устанавливаются границы области фазового перехода из твердого состояния в жидкое. При охлаждении расплава определяются количество центров кристаллизации α -фазы, доля затвердевшего металла и границы двухфазной области. Решение алгебраических систем, получаемых при аппроксимации уравнений тепломассопереноса, осуществлялось с помощью итерационных методов. После отключения источника энергии решение задачи продолжается вплоть до момента полного затвердевания расплавленного металла. Вычисления проводились на пространственных сетках $I \times K = 120 \times 108$. Значение временного шага при разогреве и плавлении материала подложки равно $\tau = 10^{-5}$ с, на стадии зародышеобразования и кристаллизации — $\tau = 10^{-8}$ с.

На рис. 2 приведены расчетные радиальные распределения температуры на поверхности подложки и по ее толщине вдоль оси симметрии r = 0 в моменты времени t = 50 мс (завершение действия импульса) и t = 77 мс (полное затвердевание).

Результаты расчетов показали, что к моменту завершения действия импульса равномерный нагрев поверхности подложки до температуры, на 20 % превышающей температуру в точке плавления (T = 2110 K), достигается в широкой области внутри зоны воздействия источника: $0 \le r \le 0.75r_0 = 3.75$ мм (кривая 1 на рис. 2,a). Выделение энергии происходит в основном в узком поверхностном слое (-0.5 мм $< z \le 0$ при r = 0), температура которого значительно больше температуры ферромагнитного перехода $T_{\rm K} = 1041$ K (кривая 1 на рис. $2, \delta$). Толщина этого слоя приближенно совпадает с толщиной "горячего" скин-слоя Δ_2 , в котором происходит диссипация энергии электромагнитного поля. При выбранных расчетных параметрах задачи получаем оценку величины Δ_2 (в метрах)

$$\Delta_2 = \sqrt{\frac{\rho_{e2}}{\pi\mu_0 f}} = \sqrt{\frac{10^{-6}}{\pi \cdot 4\pi \cdot 10^{-7} \cdot 1, 2 \cdot 10^6}} \approx 0.45 \cdot 10^{-3}.$$



Рис. 3. Распределения температуры (a) и объемной доли твердой фазы (б) в подложке в различные моменты времени затвердевания расплава: $1 - t - t_H = 0, 2 - t - t_H = 5 \text{ мс}, 3 - t - t_H = 10 \text{ мс}, 4 - t - t_H = 15 \text{ мс}, 5 - t - t_H = 20 \text{ мс}, 6 - t - t_H = 25 \text{ мс}, 7 - t - t_H = 25,5 \text{ мс}$

Как следствие, температура принимает максимальные значения на обрабатываемой поверхности, резко уменьшается по мере удаления от нее, поэтому разогрева подложки по всей толщине не происходит. Лунка расплава ограничена на поверхности окружностью радиусом $r \approx 0.85r_0 = 4.25$ мм; глубина проплавления по центру круга равна $|z| \approx 0.230$ мм. К моменту полного затвердевания температура на границах расчетной области $r = r_g$, $z = z_g$ практически не изменяется по сравнению с начальным значением $T_0 = 300$ К.

Рассмотрим более подробно процессы, происходящие в остывающем металле после завершения действия импульса. На рис. 3 приведены распределения температуры и объемной доли твердой фазы по толщине подложки в ее центральном сечении r = 0 в различные моменты времени, начиная с $t = t_H$ до момента полного затвердевания расплава. После отключения источника энергии температурные градиенты в расплаве уменьшаются, металл остывает, чему способствует низкая начальная температура подложки (см. рис. 3, *a*). На поверхности z = 0 перегрев в расплаве ($T > T_{l0} = 1758$ K) сохраняется в течение 9 мс. По мере отвода тепла из расплава происходит его переохлаждение вблизи границы фазового перехода, что создает условие для формирования двухфазной зоны, фронт которой последовательно перемещается от дна лунки к поверхности подложки (см. рис. $3, \delta$). При этом протяженность двухфазной зоны увеличивается с нескольких микрометров в начальный период кристаллизации, когда перегрев в зоне расплава максимален и соответственно наиболее высоки значения градиента температуры и скорости охлаждения на фронте кристаллизации, до значения, равного глубине проплавления подложки 230 мкм. Так, к моменту полного снятия перегрева $(t - t_H \approx 9 \text{ мc})$ лунка расплава по всей глубине находится в двухфазном состоянии (кривая 3 на рис. $3, \delta$). Далее происходит объемное затвердевание металла. Так как тепло, выделяющееся при кристаллизации, отводится в затвердевший, но еще разогретый металл, скорости охлаждения и роста объема твердой фазы постепенно уменьшаются. Полное затвердевание расплава происходит в течение 25,5 мс (кривая 7 на рис. 3,б).

Характерные для внутренних точек зоны расплава результаты расчетов динамики температуры, доли твердой фазы, величины переохлаждения, скорости зародышеобразования и количества центров кристаллизации в точке с координатами r = 0, z = -0.17 мм приведены на рис. 4. Видно, что после отключения источника энергии перегрев в этой точке с нимается за время, приблизительно равное 3,1 мс: температура при этом уменьшается



Рис. 4. Зависимости температуры T и объемной доли твердой фазы $f_s(a)$, переохлаждения $\Delta T(\delta)$, скорости зародышеобразования I и объемной концентрации центров кристаллизации $N(\epsilon)$ от времени

от значения T = 1863 K до значения $T = T_{l0} = 1758$ K (см. рис. 4,*a*), и далее происходит переохлаждение расплава до температуры, равной температуре ликвидуса и соответствующей расплаву с исходным содержанием углерода. Длительность метастабильного состояния, когда доля кристаллической фазы практически равна нулю при отличном от нуля переохлаждении, приближенно равна 50 мкс. Увеличение объема твердой фазы за счет образования в расплаве на гранях наночастиц-инокуляторов зародышей кристаллов α -фазы (Fe) сплава со значительной скоростью начинается при достижении величины переохлаждения порядка 0,85 K (см. рис. $4, \delta$). Весь процесс зародышеобразования продолжается приблизительно 20 мкс. Однако процесс зарождения центров кристаллизации приобретает взрывной характер в области максимальных значений переохлаждения $\Delta T \geqslant 1,2$ K, сохраняющихся в течение 5 мкс. На рис. 4, в показано изменение скорости образования и количества центров кристаллизации в интервале времени 3,1 ÷ 3,3 мс. При образовании в расплаве значительного объема твердой фазы происходит выделение скрытой теплоты кристаллизации, величина переохлаждения уменьшается до значений, меньших 1,2 К, приблизительно через 3,17 мс после отключения источника нагрева зародышеобразование прекращается и число образовавшихся центров кристаллизации N не меняется.

Процесс дальнейшего затвердевания обусловлен исключительно свободным ростом образовавшихся частиц твердой фазы. Кристаллизация α -фазы сплава продолжается приблизительно 20 мс, ее объемная доля достигает значения $f_{sE} = 0.972$ при охлаждении до



Рис. 5. Распределения объемной концентрации центров кристаллизации N(a)и характерных размеров зерен $d_0(\delta)$ по толщине подложки на различных расстояниях от центра r, а также радиальное распределение размеров зерен на поверхности подложки (6):

 $1-r=0,\,2-r=2,\!625$ мм, $3-r=3,\!125$ мм, $4-r=3,\!625$ мм, $5-r=4,\!125$ мм

температуры эвтектики $T_E = 1420$ К (см. рис. 4,*a*). В процессе активного зародышеобразования величина переохлаждения быстро уменьшается с 0,5 до 0,2 К, а затем, в период медленного роста зерен, до очень малых значений $\Delta T < 0,01$ К. В точке с координатами r = 0, z = -0,17 мм металл полностью затвердевает через 23 мс после окончания действия импульса.

На рис. 5 представлены распределения количества N образовавшихся центров кристаллизации и характерных размеров кристаллов d_0 в различных сечениях полностью затвердевшего сплава. Для оценки последних используется формула $d_0 = (\sqrt{2} / N)^{1/3}$ [11]. Результаты расчетов показывают, что скорость зародышеобразования максимальна в тех областях расплава, где происходит наиболее интенсивный отвод тепла в металл, не разогретый в процессе индукционного нагрева до температуры T_{l0} . Наибольшее количество центров кристаллизации образуется вблизи поверхности расплав — твердая фаза. По мере удаления от начального положения границы фазового перехода концентрация N уменьшается и вблизи свободной поверхности расплава (z = 0) принимает минимальное значение в каждом сечении (см. рис. 5, a). В итоге наиболее крупные кристаллы образуются в узком слое вблизи поверхности лунки расплава, где размер зерен может достигать 12 мкм (см. рис. 5, б). Количество центров кристаллизации меняется также в радиальном направлении: на поверхности подложки на периферии зоны расплава $(r = 0.825r_0 = 4.125 \text{ мм})$ $N \approx 9 \cdot 10^{15} \text{ м}^{-3}$, а в общирной центральной части этой зоны $(r < 0.625r_0 = 3.125 \text{ мм})$ их концентрация уменьшается на порядок: $N \approx 9 \cdot 10^{14} \text{ м}^{-3}$. Соответственно размеры зерен в центральной области зоны нагрева превышают их размеры в периферийной зоне в два раза (12 и 6 мкм) (см. рис. 5, ϵ). Таким образом, ввиду того что условия зародышеобразования и кристаллизации внутри остывающего расплава существенно различаются, имеет место существенное различие размеров зеренной структуры в объеме затвердевшего металла.

Заключение. В работе выполнено численное моделирование и подтверждена возможность использования энергии импульса высокочастотного индукционного поля при модифицировании расплавленного металла наноразмерными частицами тугоплавких соединений с целью улучшения его составляющих после затвердевания. Преимуществом использования импульсного индукционного нагрева является возникновение большой области, в которой величина перегрева расплава постоянна. Это способствует формированию в поверхностном слое металла зоны, в которой зеренные структуры имеют один и тот же размер. Результаты расчетов свидетельствуют о том, что скорость зародышеобразования и характерные размеры образовавшихся кристаллов существенно различаются и зависят от интенсивности отвода тепла из расплавленного металла. Максимальное количество центров кристаллизации возникает в областях, где отвод тепла происходит наиболее интенсивно.

Поскольку в данной работе не рассматриваются механизмы взаимодействия частиц модифицирующего материала, расположенных на поверхности подложки, с расплавом, а формула скорости гетерогенного зародышеобразования [10] не описывает в полной мере все особенности процесса, представленные результаты позволяют сделать только качественные оценки. Однако такие оценки могут использоваться для получения дополнительной информации о формировании структуры модифицированного металла.

ЛИТЕРАТУРА

- Poate J. M. Surface modification and alloying by laser, ion, and electron beams / J. M. Poate, G. Foti, D. C. Jacobson. N. Y.: Plenum Press, 1983.
- 2. Черепанов А. Н., Дроздов В. О., Маликов А. Г. и др. Влияние наноструктурированных порошковых композиций на характеристики поверхностного слоя стали при лазерной обработке // Тяжелое машиностроение. 2016. № 6. С. 2–4.
- Fletcher N. H. Size effect in heterogeneous nucleation // J. Chem. Phys. 1958. V. 29, iss. 3. P. 572–576.
- Greer A. L. Overview: Application of heterogeneous nucleation in grain-refining of metals // J. Chem. Phys. 2016. V. 145. 211704.
- Cherepanov A. N., Ovcharenko V. T. Effect of nanostructured composite powders on the structure and strength properties of the high temperature inconel 718 alloy // Phys. Metals Metallography. 2015. V. 116, N 12. P. 1279–1284.
- Сабуров В. П. Плазмохимический синтез ультрадисперсных порошков и их применение для модифицирования металлов и сплавов / В. П. Сабуров, А. Н. Черепанов, М. Ф. Жуков, Г. В. Галевский. Новосибирск: Наука. Сиб. издат. фирма, 1995.
- 7. Flemings M. C. Solidification processing. N. Y.: McGraw-Hill, 1974.
- Chen Y. Z., Liu F., Yang G. C., Zhou Y. H. Nucleation mechanisms involving in rapid solidification of undercooled Ni_{80.3}B_{19.7} melts // Intermetallics. 2011. V. 19. P. 221–224. DOI: 10.1016/j.intermet.2010.08.010.

- Попов В. Н., Черепанов А. Н., Щукин В. Г. Моделирование модифицирования поверхностного слоя металла наночастицами при импульсном индукционном нагреве // Вестн. Моск. гос. техн. ун-та им. Н. Э. Баумана. Сер. Естеств. науки. 2018. № 2. С. 82–96. DOI: 10.18698/1812-3368-2018-2-82-96.
- Turnbull D. Formation of crystal nuclei in liquid metals // J. Appl. Phys. 1950. V. 21. P. 1022–1028.
- 11. Попов В. Н., Черепанов А. Н., Щукин В. Г. Моделирование затвердевания бинарного сплава на основе железа, модифицированного наноразмерными частицами // Теплофизика и аэромеханика. 2020. Т. 27, № 3. С. 475–482.
- 12. Popov V. N., Cherepanov A. N. Modeling of the alloy solidification modified by refractory nano-size particles // Europ. Phys. J. Spec. Topics. 2020. V. 229, N 2/3. P. 467–474.
- Li F., Ning J., Wang T., Liang S. Y. Analytical modeling and sensitivity analysis of the temperature distribution in the planar scanning induction heating based on 2D moving heat source // J. Mech. Sci. Technol. 2019. V. 33, N 10. P. 5093–5102. DOI: 10.1007/s12206-019-0948-z.
- Rudnev V. Handbook of induction heating / V. Rudnev, D. Loveless, R. Cook, M. Black. N. Y.: Marcell Dekker, Inc., 2003.
- 15. Колмогоров А. Н. К статистической теории кристаллизации металлов // Изв. АН СССР. Сер. Мат. 1937. Т. 1, № 3. С. 355–359.

Поступила в редакцию 19/IV 2021 г., после доработки — 10/XI 2021 г. Принята к публикации 29/XI 2021 г.