

УДК 519.6: 532.517+544.015

## **Моделирование процессов деформации и кристаллизации капли наномодифицированного сплава при соударении с подложкой\***

**В.Н. Попов, А.Н. Черепанов**

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

E-mail: popov@itam.nsc.ru

Исследуется затвердевание бинарного сплава алюминия, модифицированного тугоплавкими наночастицами, рассматриваемыми как активные центры зарождения твердой фазы. Сформулирована математическая модель гетерогенного зародышеобразования и кристаллизации расплава с учетом гидродинамических процессов в капле при ее взаимодействии с твердой поверхностью. Данная термогидродинамическая задача изучается в условиях последовательно-объемной кристаллизации металла. На поверхности контакта расплава с подложкой учитывается термическое сопротивление. Описаны закономерности изменения температуры, зарождения и роста твердой фазы в затвердевающем сплаве алюминия. Приведена оценка распределения дисперсности кристаллической структуры по сечению сплэта.

**Ключевые слова:** капля металла, подложка, сплав алюминия, модифицирование, тугоплавкие наночастицы, гетерогенное зародышеобразование, кристаллизация, численное моделирование.

### **Введение**

Газопламенное напыление расплавленных частиц различных сплавов является одним из простых и доступных способов нанесения защитных покрытий на поверхность деталей [1]. При газопламенном напылении происходит последовательная укладка отдельных сплэтов — затвердевших после растекания по поверхности капель расплава. Известно, что увеличение дисперсности и однородности кристаллического зерна нанесенных покрытий повышает их механические и эксплуатационные свойства [2, 3]. Одним из способов повышения прочности, износо- и коррозионной устойчивости покрытий является модифицирование их наноразмерными тугоплавкими порошками. В настоящее время существует множество публикаций, посвященных экспериментальному исследованию влияния наноразмерных тугоплавких частиц на дисперсность структуры в отливках, сварных соединениях и при поверхностном напылении [4–10]. Было установлено, что небольшие добавки специально подготовленных композиций наноразмерных порошков существенно измельчают структурные составляющие литого металла и повышают его механические и эксплуатационные характеристики. В качестве модификаторов могут служить частицы SiC, TiC, TiN и др.

---

\* Работа выполнена в рамках государственного задания (№ госрегистрации 121030500137-5).

Сплавы алюминия, обладающие хорошими механическими и физическими свойствами, широко используются в различных отраслях. В этой связи повышение прочности изделий и покрытий из алюминия является одной из главных проблем, которую необходимо решить. По результатам исследований влияния ультрадисперсных тугоплавких частиц на свойства сплавов алюминия [6, 9] было установлено значительное уменьшение размера зерна в затвердевшем слитке, приведшее к улучшению прочностных свойств металла. Таким образом, повышение механических и прочностных свойств алюминиевых покрытий на поверхностях деталей и конструкций может быть осуществлено с помощью напыления металла, содержащего наноразмерные тугоплавкие частицы [2].

Значительное число работ, например, [11–19], посвящалось детальному изучению происходящих процессов при совершенствовании методов нанесения защитных покрытий. В некоторых публикациях представлены результаты исследований по нанесению покрытий, содержащих различные модифицирующие материалы [18, 19]. Для капель микронных размеров характерные времена растекания, деформирования, охлаждения, затвердевания сопоставимы и лежат в микросекундном диапазоне. Представляет интерес динамика этих явлений, однако экспериментальное исследование быстропротекающих процессов в капле связано с методическими и техническими трудностями. Эффективным методом изучения динамических процессов является численное моделирование. Актуальной остается также задача создания математических моделей, позволяющих оценивать основные характеристики процессов при затвердевании сплавов после модифицирования.

В работе [12] проводилось трехмерное моделирование процессов при послойном наложении металлических капель на поверхность подложки. Была получена оценка термического сопротивления на поверхности контакта расплав-подложка. Результаты численного моделирования взаимодействия капель расплавленного алюминиевого сплава и стальной пластины сравнивались с данными, полученными в экспериментах, однако кинетика затвердевания, определяющая структуру затвердевшего металла, не рассматривалась.

В работе [17] была предложена математическая модель для численного исследования термо- и гидродинамических процессов при соударении жидкой металлической капли с подложкой. Было проведено исследование влияния скорости соударения, размера капли, перегрева металла, температуры и теплофизических свойств подложки на морфологию затвердевшей частицы, ее высоту, размер контактного пятна и время полного затвердевания. Корректность численного моделирования проверялась сопоставлением результатов расчетов с экспериментальными данными.

Результаты численного моделирования неравновесной объемной кристаллизации наномодифицированной капли жидкого никеля на стальной подложке представлены в работе [18]. Здесь исследовалась динамика формирования сплэта в зависимости от исходных параметров процесса напыления. Было определено, что процесс кристаллизации в начальной стадии характеризуется образованием переохлажденного расплава, величина которого зависит от размера частиц и интенсивности охлаждения.

Кинетика затвердевания капли модифицированного бинарного сплава алюминия на подложке исследовалась в работе [19]. Все модифицирующие наноразмерные частицы рассматривались как центры кристаллизации. Было определено, что особенностью кинетики кристаллизации является наличие двух максимумов переохлаждения в расплаве. Ввиду того, что переохлаждения имеют относительно небольшие величины, был сделан вывод о невозможности гомогенного зарождения кристаллической фазы в наномодифицированном сплаве в процессе формирования сплэта.

В работах [20, 21] была представлена математическая модель затвердевания сплава Al-Si, модифицированного тугоплавкими наноразмерными частицами, включающая в себя описание гетерогенного зародышеобразования. По результатам численного моделирования выявлены особенности кинетики гетерогенного зародышеобразования и кристаллизации расплава в цилиндрическом тигле. Получено удовлетворительное совпадение результатов численных расчетов с экспериментальными данными, что позволяет использовать предложенные в исследованиях [20–22] модели зародышеобразования для изучения кристаллизации металла капли на подложке.

Целью настоящей работы является разработка математической модели и проведение на ее основе численного исследования динамики кристаллизации капли наномодифицированного бинарного сплава системы Al-Si после соударения с твердой подложкой. Сформулирована математическая модель, описывающая термо- и гидродинамические явления в капле при ее соударении и растекании по подложке, гетерогенное зародышеобразование в расплаве и кристаллизацию металла в процессе его охлаждения. Для оценки термического сопротивления на поверхности контакта расплава и подложки использовались экспериментальные данные, полученные в работе [12]. Корректность численной модели и используемых приближений проверялась путем сопоставления с экспериментальными данными. Сравнение морфологии капли в процессе растекания, определенной по результатам численного моделирования, показало удовлетворительное согласование с имеющимися опытными данными [9, 17].

### Математическая модель и алгоритм реализации

Предполагается, что сферическая капля расплава диаметром  $d_0$  соударяется с подложкой под прямым углом к поверхности последней со скоростью  $v_0$  (рис. 1). Расплавленный металл модифицирован плакированными тугоплавкими наноразмерными частицами, характерный размер  $l_p$  которых много меньше размера капли, их массовое содержание  $m_p$  не превышает 0,05 %, а доля твердой фазы в объеме расплава  $f_s \approx 0,0005$  не влияет на его физические характеристики. Для численного моделирования поведения расплава после его соударения с поверхностью подложки используются уравнения Навье–Стокса для вязкой несжимаемой жидкости. Теплофизические параметры материала капли в жидком и твердом состояниях с целью упрощения модели полагаются постоянными и равными их средним значениям в рассматриваемом интервале температур.

Поверхность подложки предполагается плоской и смачиваемой. На поверхности контакта расплава и подложки имеется термическое сопротивление. Температура подложки ниже температуры кристаллизации сплава. Движение расплава в жидко-твердой зоне рассматривается как течение гомогенной жидкости, вязкость ( $\mu$ ) которой зависит от доли растущей твердой фазы ( $f_s$ ). Аналогично этому перенос тепла в этой зоне описывается уравнением конвективного теплопереноса с эффективной теплопроводностью, так же зависящей от доли твердой (жидкой) фазы.

С учетом принятых допущений уравнения движения жидкости и неразрывности в цилиндрической системе координат  $(r, z)$  имеют вид

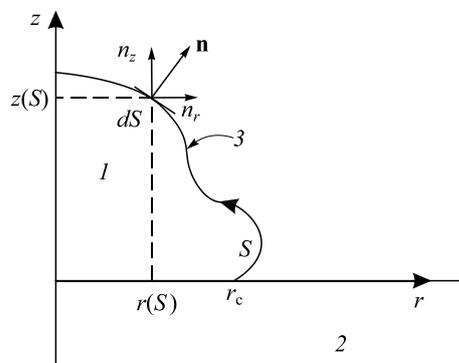


Рис. 1. Схема деформирующейся капли на подложке.

1 — капля, 2 — подложка,  
3 — свободная поверхность расплава.

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

здесь  $u, v$  — компоненты вектора скорости вдоль координат  $r$  и  $z$  соответственно,  $t$  — время,  $p$  — давление,  $\rho$  — плотность,  $\mu$  — динамическая вязкость, значение которой для жидкой и дисперсной сред определяется согласно [23] по формуле

$$\mu = \begin{cases} \mu_0, & f_s \equiv 0, \\ \mu_0 / (1 - 2,5 f_s), & 0 < f_s \leq 0,4. \end{cases}$$

Начальные условия ( $t = 0$ ) для уравнений (1) записываются следующим образом:

$$u = 0, \quad v = -v_0, \quad p = 4\sigma / d_0 + p_a,$$

где  $\sigma$  — поверхностное натяжение металлического расплава,  $p_a$  — атмосферное давление.

Граничные условия для гидродинамической задачи при  $r = 0$  определены как

$$u = 0, \quad r(\partial v / \partial r) = 0, \quad r(\partial p / \partial r) = 0,$$

а на свободной поверхности жидкой частицы —

$$\left( p - 2\sigma K - 2\mu \frac{\partial u}{\partial r} \right) \mathbf{n}_r - \mu \left( \frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial v}{\partial r} \right) \mathbf{n}_z = 0, \quad \left( p - 2\sigma K - 2\mu \frac{\partial v}{\partial z} \right) \mathbf{n}_z - \mu \left( \frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial v}{\partial r} \right) \mathbf{n}_r = 0,$$

где  $\mathbf{n}_r, \mathbf{n}_z$  — компоненты единичного вектора нормали к свободной поверхности капли  $\mathbf{n}$  по осям  $r$  и  $z$  соответственно. Кривизна поверхности капли  $K$  определяется соотношением

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

здесь штрих означает производную относительно длины дуги  $dS$ ,  $S$  — кривая, очерчивающая контур капли от точки  $r_c$  до центральной точки свободной поверхности,  $r_c = r_c(t)$  — радиус контактного пятна,  $r = r(S)$  и  $z = z(S)$  — координаты в цилиндрической системе, описывающие положение точки на кривой  $S$  (рис. 1).

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

$$u = 0, \quad v = 0.$$

Теплоперенос в жидко–твердой зоне капли описывается уравнением

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

где коэффициент эффективной теплопроводности  $a_e = a_l(1 - f_s) + a_s f_s$ ,  $a_i = \lambda_i / (c\rho)$ ,  $i = l, s$ ;  $\lambda$  — теплопроводность,  $c$  — удельная теплоемкость,  $\rho$  — плотность,  $\kappa$  — удельная теплота плавления.

Изменение температуры в подложке определяется уравнением

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

Начальные значения температуры и доли твердой фазы в расплаве ( $t = 0$ ) составляют соответственно

$$T = T_{10} \text{ и } f_s = 0,$$

температура подложки и окружающей среды

$$T = T_{30}.$$

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

$$\lambda_i (\partial T / \partial z)|_{0+} = \lambda_3 (\partial T / \partial z)|_{0-} = (T|_{0+} - T|_{0-}) / R_n, \quad i = l, s,$$

где  $\lambda_i$  — теплопроводность,  $R_n$  — тепловое сопротивление,  $r_c(t)$  — радиус контактного пятна (рис. 1).

Условие теплообмена между поверхностью капли и окружающей средой имеет вид:

$$\lambda_i (\partial T / \partial \mathbf{n}) = \varepsilon \sigma_0 (T_{30}^4 - T^4), \quad i = l, s,$$

где  $\sigma_0$  — постоянная Стефана–Больцмана,  $\varepsilon$  — степень черноты материала.

Условия симметрии в капле и подложке ( $r = 0$ ) записываются как

$$r(\partial T / \partial r) = 0.$$

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

$$\lambda_3 (\partial T / \partial z) = 0,$$

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

Рассматриваемый расплав содержит высокоактивированные смачиваемые тугоплавкие наночастицы, количество которых не превышает 0,05 % по массе. Из результатов работы [18, 19] следует, что гомогенного зародышеобразования в процессе затвердевания такого расплава практически не наблюдается, а зарождение и рост кристаллической фазы происходит лишь на затравках.

Скорость гетерогенного зародышеобразования, согласно [22], определяется соотношением

$$I = K_n \exp \left\{ -\frac{\Delta G^*}{k_B T} \right\}, \quad (4)$$

где  $k_B$  — константа Больцмана,  $\Delta G^*$  — критическая энергия образования гетерогенного зародыша,  $K_n$  — кинетический параметр, зависящий в общем случае от поверхностного натяжения, размеров модифицирующих частиц и числа атомов на их поверхности.

Будем считать, что наночастицы имеют плоские смачиваемые грани, на которых могут образовываться сфероидальные зародыши. Тогда выражение для свободной энергии образования критического радиуса без учета кривизны его поверхности будет иметь вид [20]:

$$\Delta G^* = \pi \sigma_{12} R_0^2 (1 - \cos \theta)^2 (2 + \cos \theta) / 3,$$

где  $R_0 = 2\sigma_{12}T_{l0} / (\kappa\rho\Delta T)$  — критический радиус зародыша,  $\sigma_{12}$  — поверхностное натяжение на границе расплав-зародыш,  $\Delta T = T_l - T$  — переохлаждение,  $T_l$  — текущая температура ликвидуса,  $T_{l0}$  — исходная температура ликвидуса сплава.

Выражение для кинетического параметра  $K_n$  в формуле (4), согласно [22, 24], представим в виде

$$K_n = 10^{39} n_p \frac{n_s}{n_a} \exp \left\{ -\frac{E\Delta T}{k_B T} \right\},$$

где  $E$  — энергия активации процесса диффузии в расплаве,  $n_p$  — число наночастиц в единице объема расплава,  $n_a$  — число атомов металла в единице объема,  $n_s$  — число атомов металла, соприкасающихся с поверхностью нанозатравки. Для оценки величины  $n_s$  примем, что наноразмерные частицы имеют кубическую форму с ребром, равным  $l_p$ , а  $l_a$  — межатомное расстояние в расплаве. Тогда  $n_s = 6(l_p / l_a)^2$ ,  $n_p = m_p \rho / (100 \rho_p l_p^3)$ , где  $m_p$  — массовая концентрация наноразмерных частиц в расплаве (%).

Для вычисления доли растущей твердой фазы воспользуемся модифицированной формулой Колмогорова–Джонсона–Мела–Аврами [25, 26], которую, пренебрегая относительным объемом наночастиц в единице расплава, запишем в виде

$$f_\alpha(r, z, t) = 1 - \exp \left\{ -\int_{t_0}^t I(r, z, t) V_\alpha dt \right\}, \quad (5)$$

где  $V_\alpha$  — объём изолированного кристалла  $\alpha$ -фазы, зародившегося в момент времени  $\tau$ . Полагая, что растущие кристаллы имеют сферическую форму с радиусом  $R_\alpha$ , а их рост подчиняется нормальному механизму ( $\partial R / \partial t = K_\alpha \Delta T$ ), величину  $V_\alpha$  определим по формуле

$$V_\alpha = \frac{4\pi}{3} [R_{e0} + K_\alpha \int_\tau^t \Delta T(r, z, \tau) d\tau]^3,$$

здесь  $R_{e0} = (1,5/\pi)^{1/2} l_p$  — радиус сферической частицы, имеющей площадь поверхности, равную поверхности кубической частицы,  $K_\alpha$  — константа роста кристаллов  $\alpha$ -фазы, для оценки которой использовалась формула [26, 27]

$$K_\alpha = (D\Delta H_\alpha) / (l_\alpha k_B T_A^2),$$

где  $\Delta H_\alpha$  — энтальпия плавления в расчете на один атом,  $D$  — коэффициент диффузии в расплаве,  $T_A$  — температура плавления основного металла.

Уравнение (5) для последующих расчетов представим в виде

$$\frac{\partial f_\alpha}{\partial t} = 4\pi K_\alpha \Delta T(t) (1 - f_\alpha) \int_{t_0}^t I(\tau) [R_{e0} + K_\alpha \int_\tau^t \Delta T(\xi) d\xi]^2 d\tau.$$

Число кристаллов в единице объема затвердевающего сплава в момент времени  $t$  определяется соотношением

$$N(t) = \int_{t_0}^t I(\tau) [1 - f_s(\tau)] d\tau. \quad (6)$$

Примем далее, что после охлаждения сплава до температуры эвтектики  $T_E$  рост  $\alpha$ -кристаллов прекращается. Далее на поверхности  $\alpha$ -кристаллов, число которых согласно формуле (6) составляет в единице объема  $N = N_\alpha(r, z, t_E)$ , происходит формирование  $\beta$ -фазы. Будем полагать, что скорость роста  $\beta$ -фазы пропорциональна локальному переохлаждению —  $\partial R_\beta / \partial t = K_\beta (T_E - T)$ . Ввиду малой взаимной растворимости Al и Si фактически получаем  $K_\alpha = K_{Al}$ ,  $K_\beta = K_{Si}$ , где  $K_{Al}$  и  $K_{Si}$  — кинетические константы роста алюминия и кремния соответственно. Тогда радиус кристалла  $\beta$ -фазы определим как

$$R_\beta(r, z, t) = R_\alpha + \int_{t_E}^t K_\beta (T - T_E) d\tau, \quad R_\alpha(r, z, t_E) = R_{e0} + \int_{t_0}^{t_E} K_\alpha \Delta T d\tau.$$

Доля твердой фазы  $f_\beta$  в затвердевающем эвтектическом расплаве определяется уравнением

$$\frac{\partial f_\beta}{\partial t} = 4\pi N_\alpha K_\beta R_\beta^2 (T_E - T)(1 - f_\beta)$$

с учетом уравнений (2) при  $u = v = 0$  и (6) при  $t = t_E$ . При этом в уравнении (3) вместо  $\kappa$  используется  $\kappa_{Si}$  — удельная теплота плавления кремния. Эвтектическая кристаллизация происходит в диапазоне температур  $T_E > T \geq T_{\text{end}}$ , где  $T_{\text{end}}$  — температура полного затвердевания расплава. Доля твердой фазы  $f_s$  в процессе полного затвердевания сплава определяется как

$$f_s = f_{s\alpha} + f_{s\beta}$$

Характерный размер зерна  $d$  оценивается по формуле  $d = [6/(\pi N)]^{1/3}$ .

Для решения системы (1)–(3) с начальными и граничными условиями используется метод конечных разностей. В области перемещения капли и в подложке строится пространственная сетка вдоль осей  $r$  и  $z$ . Распределение температуры описывается значениями в узлах сетки, составляющие скоростей  $u$ ,  $v$  определяются в серединах боковых граней ячеек, а давление  $p$  — в центрах ячеек [28–30]. При решении задачи о растекании капель по подложке положение свободной поверхности расплава определяется с помощью частиц-маркеров, движущихся с локальной скоростью жидкости. При аппроксимации уравнений (1)–(3) используется неявная конечно-разностная схема. Решение алгебраических систем осуществляется итерационным методом сопряженных градиентов.

Вычисления на каждом временном шаге проводятся в следующей последовательности.

1. Вычисляются новые координаты маркеров, описывающих свободную поверхность капли.

2. Давление и поле скоростей определяются из решения системы (1). Первоначально определяются составляющие поля скоростей. Давление рассчитывается с использованием метода искусственной сжимаемости [29]. Для согласования найденных скоростей и давления внутри капли и в граничных ячейках выполняется несколько итераций.

3. Вычисляется температурное поле в капле и подложке согласно уравнениям (2), (3). Для согласования температурных полей в расчетных областях применяется метод простой итерации.

Адекватность модели и алгоритма ее реализации подтверждена качественным и количественным совпадением результатов расчетов с данными физических экспериментов [9, 17].

### Результаты численных экспериментов

Численное исследование динамики растекания и кристаллизации модифицированной металлической капли на подложке проводилось при следующих параметрах. Исходные данные для сплава Al + 6,5 % Si [8, 9, 12, 20, 21]:  $d_0 = 6 \cdot 10^{-5}$  м,  $v_0 = 50$  м/с,  $\mu = 0,00103$  кг/(м·с),  $c = 1000$  Дж/(кг·К),  $\rho = 2,57 \cdot 10^3$  кг/м<sup>3</sup>,  $\lambda_l = 70$  Вт/(м·К),  $T_{10} = 903$  К,  $\lambda_s = 152,5$  Вт/(м·К),  $\kappa = 3,89 \cdot 10^5$  Дж/кг,  $\kappa_{Si} = 1,64 \cdot 10^5$  Дж/кг,  $\sigma = 1,07$  Н/м,  $T_A = 933$  К,  $T_0 = 886,85$  К,  $T_E = 850$  К,  $\beta = 7,1$  К/%,  $C_0 = 6,5$  % масс,  $k = 0,14$ ,  $K_\alpha = 10^{-3}$  м/(с·К),  $K_\beta = 10^{-3}$  м/(с·К),  $\varepsilon = 0,05$ ,  $\sigma_0 = 5,7 \cdot 10^{-8}$  Вт/(м<sup>2</sup>·К<sup>4</sup>),  $p_a = 10^5$  Н/м<sup>2</sup>, модифицирующие наноразмерные частицы TiN, плотность частиц  $\rho_p = 5440$  кг/м<sup>3</sup>, концентрация  $m_p = 0,03$  % масс,  $l_p = 10^{-7}$  м,  $l_a = 2,86 \cdot 10^{-10}$  м,  $l_c = 4,235 \cdot 10^{-10}$  м,  $D = 10^{-7}$  м<sup>2</sup>/с,  $\Delta H_a = 1,75 \cdot 10^{-20}$  Дж,  $E = 4,2 \cdot 10^{-20}$  Дж,  $\sigma_{12} = 0,093$  Дж/м<sup>2</sup>,  $k_B = 1,38 \cdot 10^{-23}$  Дж/К,  $\theta = 5^\circ$ . Исходные данные для подложки (сталь) [12]:  $h_s = 2 \cdot 10^{-3}$  м,  $r_3 = 1,5 \cdot 10^{-3}$  м,  $T_{30} = 473$  К,  $c_3 = 550$  Дж/(кг·К),  $\rho_3 = 7,8 \cdot 10^3$  кг/м<sup>3</sup>,  $\lambda_3 = 25,1$  Вт/(м·К),  $R_h = 1,64 \cdot 10^{-6}$  м<sup>2</sup>·К/Вт.

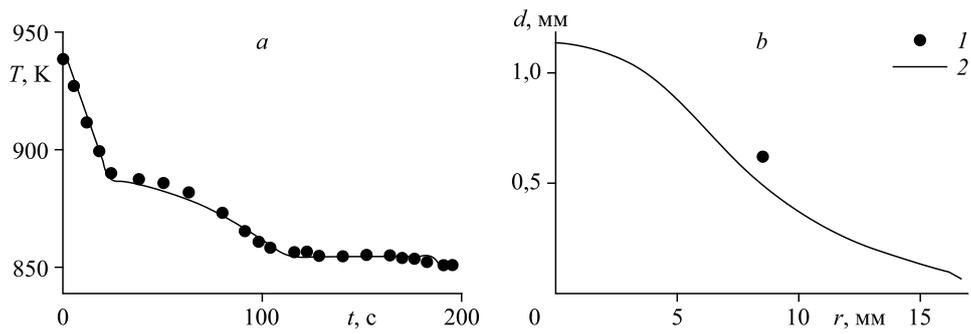


Рис. 2. Изменения температуры при охлаждении металла (а) и размера зерна (b) в поперечном сечении отливки.

1 — данные эксперимента, 2 — результаты расчета.

Для проверки модели кристаллизации было рассмотрено затвердевание в цилиндрическом тигле алюминиевого сплава с частицами TiN в количестве 0,03 % массы. 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 [9, 20, 21]. На рис. 2а отображены результаты, полученные при расчетах и в ходе замеров на опытной установке. На рис. 2b показан размер зеренной структуры металла в поперечном сечении отливки, рассчитанный по формуле  $d = [6/(\pi N)]^{1/3}$  (здесь  $N = N_\alpha(r, z, t_E)$  — число кристаллов в единице объема ( $m^3$ ) затвердевшего сплава), и средний размер зерна, определенный в ходе эксперимента. Результаты расчетов удовлетворительно совпадают с данными физического эксперимента и свидетельствуют о том, что предложенная модель адекватно описывает изменение температуры при кристаллизации модифицированного сплава.

Для проверки адекватности гидродинамической модели и оценки точности получаемых результатов использовались данные работы [17], где в качестве материала капель в эксперименте использовался оловянно-свинцовый сплав эвтектического состава 63 % Sn + 37 % Pb, затвердевающий на медной подложке.

На рис. 3 представлены формы затвердевших капель в зависимости от скорости соударения с подложкой. Видно, что при увеличении скорости соударения площадь

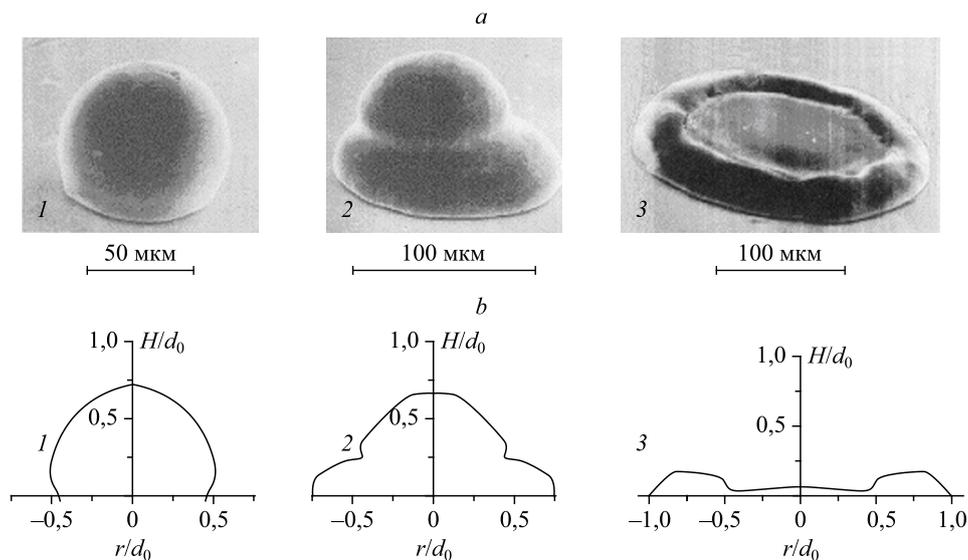
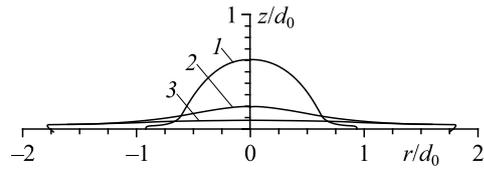


Рис. 3. Экспериментальные (а) и расчетные (b) формы капель диаметром  $d_0 = 68$  мкм, затвердевших на медной подложке.

$v_0 = 0,7$  (1), 1,8 (2), 5 (3) м/с.

Рис. 4. Изменение формы капли диаметром  $d_0 = 6 \cdot 10^{-5}$  м, после соприкосновения с подложкой при  $v_0 = 50$  м/с. Время растекания капли: 0,5 (1), 1,5 (2), 2 (3) мкс.



контактного пятна при полном растекании капли увеличивается, уменьшаются толщина затвердевшей частицы и время ее полного затвердевания. Так, при скорости соударения  $v_0 = 5$  м/с капля диаметром 68 мкм полностью растекается по подложке в течение 28 мкс и принимает форму тонкого диска с кольцевым валиком по периферии. Движение расплава происходит до того момента, когда растущая твердая фаза образует кристаллический каркас. Начавшийся отток жидкости к центру диска не успевает завершиться, так как центральная его зона полностью затвердела. Время полного затвердевания расплава составляет 58 мкс.

На форму сформировавшегося сплэта в основном влияют скорость падения капли и ее размер. От температуры подложки существенно зависят переохлаждение и время затвердевания расплава [18]. Рисунок 4 иллюстрирует полученную при расчетах динамику деформации капли диаметром 60 мкм при  $v_0 = 50$  м/с. Из расчетов следует, что растекание металла происходит в течение 2 мкс, а толщина сформировавшегося сплэта в центральной части составляет 4,5 мкм при средней толщине сплэта  $\approx 3$  мкм.

Рисунок 5 демонстрирует 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  $r = 0$ . Переохлаждение определяется как  $\Delta T = T_l - T$  при  $T_{l0} \geq T \geq T_E$  и  $\Delta T = T_E - T$  в случае  $T_E > T \geq T_{\text{end}}$ . В точке контакта расплава с подложкой перегрев снимается за 0,04 мкс и происходит переохлаждение металла ниже температуры ликвидуса  $T_l$  на 0,8 К (рис. 5а, 5б). Время метастабильного состояния, когда доля кристаллической фазы практически равна нулю, составляет около 0,07 мкс. Кристаллизация  $\alpha$ -фазы вблизи подложки продолжается 4 мкс, а доля твердой фазы в расплаве достигает величины  $f_\alpha = 0,494$ . Далее происходит эвтектическая кристаллизация  $\beta$ -фазы. Полное затвердевание завершается к моменту 4,4 мкс.

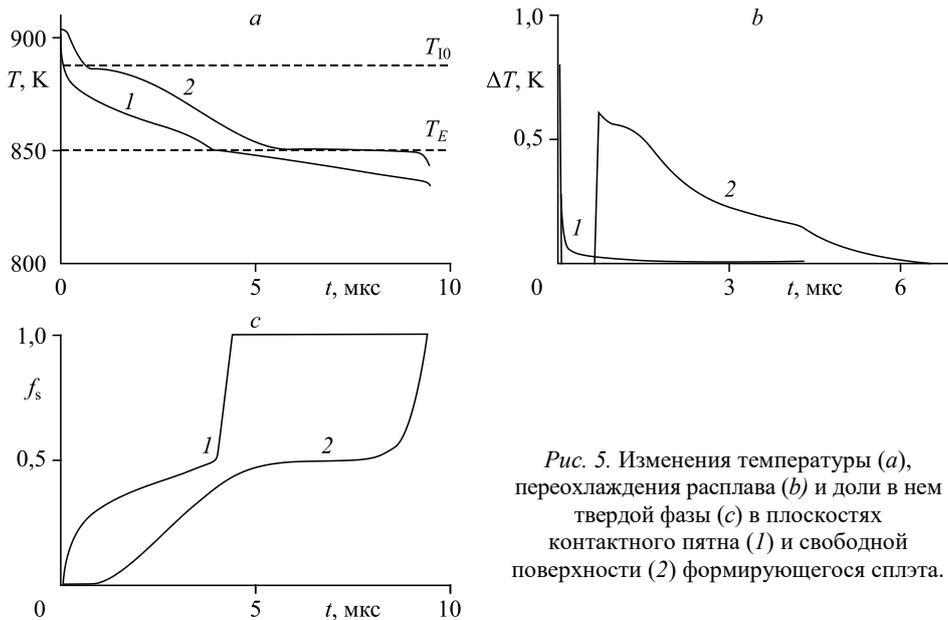


Рис. 5. Изменения температуры (а), переохлаждения расплава (б) и доли в нем твердой фазы (с) в плоскостях контактного пятна (1) и свободной поверхности (2) формирующегося сплэта.

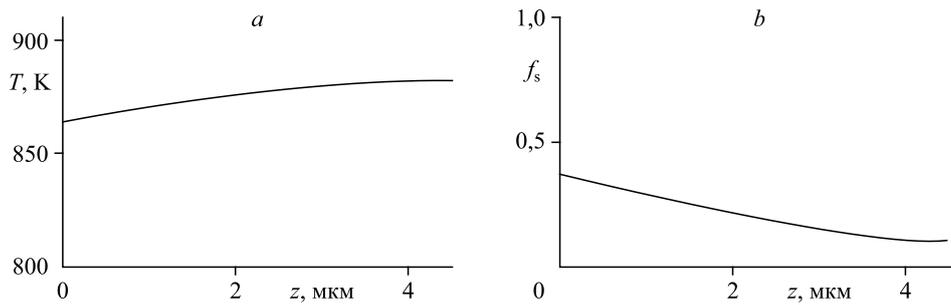


Рис. 6. Распределение температуры (а) и доли твердой фазы (b) в металле от плоскости соприкосновения с подложкой до свободной поверхности растекшейся капли.

Во время деформации капли температура расплава на её свободной поверхности фактически не меняется, а движение жидкости способствует переносу тепла в направлении подложки, в которую оно отводится. По мере того как движение жидкости в вертикальном направлении замедляется, слой металла становится тоньше, и к моменту 0,8 мкс в точке  $z = 4,5$  мкм перегрев снимается. Рост твердой фазы начинается при переохлаждении металла ниже температуры ликвидуса на 0,6 К. Время метастабильного состояния кристаллической фазы составляет около 0,4 мкс, кристаллизация  $\alpha$ -фазы сплава длится около 5,5 мкс, а эвтектическая кристаллизация — 3,2 мкс (рис. 5). С момента снятия перегрева расплава (0,8 мкс) кристаллизация происходит во всем объеме незатвердевшего металла, а граница затвердевшего металла последовательно перемещается от подложки к поверхности формирующегося сплэта.

На рис. 6 представлено распределение температуры и доли твердой фазы в слое металла толщиной 4,5 мкм на подложке ( $r = 0$ ) в момент 2 мкс, когда движение жидкости прекратилось. Согласно полученным данным, перегрев в расплавленном металле отсутствует. Минимальная температура расплава и подложки выше температуры эвтектики  $T_E$ . Во всем объеме расплава присутствует твердая фаза и ее доля в жидкости не превышает 0,4 (рис. 6b).

Переохлаждение, темп кристаллизации и, соответственно, время затвердевания существенно меняются с удалением от подложки (рис. 5, 6). Особенностью кинетики затвердевания является наличие различных величин переохлаждений у подложки и на поверхности растекшейся капли, что указывает на меняющиеся условия зародышеобразования и начала кристаллизации. Рис. 7 иллюстрирует изменение возникших центров кристаллизации и характерного размера кристаллов от плоскости соприкосновения сплэта с подложкой до его свободной поверхности в сечении  $r = 0$ . Наиболее мелкая структура металла находится в области контакта металла с подложкой, где наблюдается наибольшая скорость его охлаждения, что качественно соответствует имеющимся экспериментальными данными [9]. Увеличения переохлаждения расплава при эвтектической кристаллизации не происходит, так как имеет место локальное выравнивание интенсивностей выделения скрытой теплоты кристаллизации и её отвода в затвердевший металл и подложку.

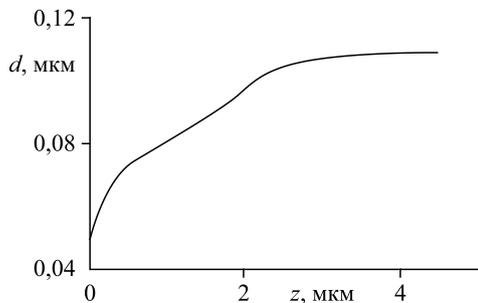


Рис. 7. Изменение характерного размера кристаллов  $d$  в поперечном направлении сплэта при  $r = 0$ .

### Заключение

Предложена математическая модель неизотермического соударения капли модифицированного бинарного сплава (Al-Si) с твердой подложкой. Модель описывает растекание капли по подложке с учетом конвекции расплава в капле, а также процессы гетерогенного зарождения и роста твердой фазы при охлаждении металла. Проведено численное моделирование процессов деформации и неравновесной кристаллизации жидкой капли, содержащей активированные наноразмерные частицы, после её соударения с подложкой. Исследована кинетика гетерогенного зародышеобразования и кристаллизации сплава в процессе его охлаждения. Установлено, что при высоких скоростях соударения капли с подложкой за время ее растекания возможно образование небольшой объемной доли твердой фазы вблизи подложки, однако сплошного слоя затвердевшего металла не возникает. Определено, что в процессе охлаждения сплава происходит последовательно-объемная кристаллизация металла в направлении от подложки к свободной поверхности. Рассчитанные параметры затвердевшего на подложке сплэта — его морфология, высота и диаметр контактного пятна — удовлетворительно согласуются с известными опытными данными.

### Список литературы

1. Pawlowski L. The science and engineering of thermal spray coatings. 2nd ed. John Wiley & Sons Ltd, 2008. 626 p.
2. Solonenko O.P., Kudinov V.V., Smirnov A.V., Cherepanov A.N., Popov V.N. Micro-metallurgy of splats: theory, computer simulation and experiment // JSME Intern. J. Series B. 2005. Vol. 48, No. 3. P. 366–380.
3. Kucukrendeci I., Yetgin S.H. 2013. Coating parameters influences on mechanical properties of coating // J. of Applied Sci. 2013. Vol. 13. P. 645–649.
4. 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 // Progress in Plasma Processing of Materials 2003. N.Y.: Begell House Inc., 2003. P. 507–513.
5. El-Mahallawi I.S., Shash A.Y., Amer A.E. Nanoreinforced cast Al-Si alloys with Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, TiO<sub>2</sub> and ZrO<sub>2</sub> nanoparticles // Metals. 2015. Vol. 5, Iss. 2. P. 802–821.
6. Borodianskiy K., Zinigrad M., Gedanken A. Aluminum A356 reinforcement by carbide nanoparticles // J. of Nano Research. 2011. Vol. 13. P. 41–46.
7. Божанова Н.М., Панов И.Т., Манолов В.К., Черепанов А.Н., Лазарова Р.Л. Модифицирование свойств алюминиевых протекторных анодов нанопорошковыми материалами // Теплофизика и аэромеханика. 2018. Т. 25, № 5. С. 791–796.
8. 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 Conference Proceedings. 2017. Vol. 1893. P. 030104-1–030104-8.
9. Lazarova R., Bojanova N., Dimitrova R. et al. Influence of nanoparticles introducing in the melt of aluminum alloys on castings microstructure and properties // Intern. J. of Metalcasting. 2016. Vol. 10, Iss. 4. P. 466–476.
10. Черепанов А.Н., Оришич А.М., Шанцев В.П. Лазерная сварка металлов и сплавов с применением нанопорошковых модифицирующих добавок. Теория, эксперимент // Физическая мезомеханика. 2013. Т. 16, No. 1. С. 91–104.
11. Tarapaga G., Szekely J. Mathematical modelling of the isothermal impingement of liquid droplet in spray processes // Metall. Trans. 1991. Vol. 22. P. 901–914.
12. Xue M., Heichal Y., Chandra S., Mostaghimi J. Modeling the impact of a molten metal droplet on a solid surface using variable interfacial thermal contact resistance // Mater Sci. 2007. Vol. 42. P. 9–18.
13. Yarin A.L., Weiss D. A. Impact of drops on solid surfaces: self-similar capillary waves, and splashing as a new type of kinematic discontinuity // J. Fluid Mech. 1995. Vol. 283. P. 141–173.
14. Zhao Z., Polikakos D., Fukay J. Heat transfer and fluid mechanics during the collision droplet on a substrate. I. Modeling // Intern. J. Heat Mass Transfer. 1996. Vol. 39, Iss. 13. P. 2771–2789.
15. Zhao Z., Poulidakos D., Fukai J. Heat transfer and fluid dynamics during the collision of a liquid droplet on a substrate. II. Experiments // Intern. J. Heat Mass Transfer. 1996. Vol. 39, Iss. 13. P. 2791–2802.
16. Eggers J., Fontelos M.A., Josserand C., Zaleski S. Drop dynamics after impact on a solid wall: theory and simulations. // Phys. Fluids. 2010. Vol. 22, Iss. 6. P. 062101-1–062101-13.
17. Предтеченский М.Р., Черепанов А.Н., Попов В.Н., Варламов Ю.Д. Исследование динамики соударения и кристаллизации жидкометаллической капли с многослойной подложкой // Прикл. мех. и технич. физика. 2002. Т. 43, № 1. С. 112–123.
18. Черепанов А.Н., Попов В.Н., Солоненко О.П. Численный анализ динамики растекания и кристаллизации модифицированной металлической капли на подложке // Теплофизика и аэромеханика. 2013. Т. 15, № 3. С. 513–519.

19. **Popov V.N., Cherepanov A.N.** Numerical modeling of the modified metal droplet crystallization during spreading on a substrate // Herald of the Bauman Moscow State Technical University. Series Natural Sci. 2019. Vol. 87, Iss. 6. P. 18–39.
20. **Popov V.N., Cherepanov A.N.** Modeling of the alloy solidification modified by refractory nano-size particles // Eur. Phys. J. Special Topics. 2020. Vol. 229, Iss. 2–3. P. 467–474.
21. **Попов В.Н., Черепанов А.Н.** Моделирование процессов кристаллизации наномодифицированного бинарного сплава // Математическое моделирование. 2019. Т. 31, № 11. С. 89–101.
22. **Turnbull D.** Formation of crystal nuclei in liquid metals // J. of Applied Physics. 1950. Vol. 21, Iss. 10. P. 1022–1028.
23. **Abedian B., Kachanov M.** On the effective viscosity of suspensions // Intern. J. of Engng Sci. 2010. Vol. 48, No. 11. P. 962–965.
24. **Flemings M.C.** Solidification processing. New York: McGraw-Hill, 1974. 424 p.
25. **Колмогоров А.Н.** К статистической теории кристаллизации металлов // Изв. АН СССР. 1937. Т. 1, № 3. С. 355–359.
26. **Баландин Г.Ф.** Основы теории формирования отливок. Ч. 2. М.: Машиностроение, 1979. 335 с.
27. **Christian J.W.** The theory of transformations in metals and alloys. Pergamon, 2002. 1200 p.
28. **Harlow F.H., Welch J.E.** Numerical calculation of time-depend viscous incompressible flow of fluid with free surface // Phys. Fluids. 1965. Vol. 8. P. 2182–2189.
29. **Patankar S.V., Spalding D.B.** A calculation procedure for heat, mass and momentum transfer in three-dimensional parabolic flows // Intern. J. Heat Mass Trans. 1972. Vol. 15. P. 1787–1806.
30. **Chorin A.J.** A numerical method for solving incompressible viscous flow problems // J. Comput. Phys. 1967. Vol. 2. P. 12–26.

*Статья поступила в редакцию 29 июня 2020 г.,  
после доработки — 15 февраля 2021 г.,  
принята к публикации 23 марта 2021 г.*