

ЛИТЕРАТУРА

1. Гура П.С., Сысун В.И. Ионно-плазменное азотирование поверхности сталей в индукционном разряде с плоской катушкой // Вестник воронежского государственного технического университета – 2013, Том.9, Номер:6-1, С. 82-85.
2. Герасимов С.А., Крукович М.Г., Бадерко Е.А., Клочков Н.П. Моделирование процесса ионного азотирования // Наука и Образование – Научное издание МГТУ ИМ. Н.Э. Баумана – 2013, Номер:1, С. 313-332.
3. Mufu Yan, Qingchang Meng, Jihong Yan. Mathematical Models and computer simulation of nitrogen concentration profiles in pulse plasma nitride layers // J. Mater. Sci. Technol. – 2003, Vol.19 Suppl.1, P. 164-166.
4. S. R. Hosseini, F. Ashrafizadeh, A. Kermanpur. Calculation and experimentation of the compound layer thickness in gas and plasma nitriding of iron // Iranian Journal of Science & Technology, Transaction B: Engineering – 2010, Vol. 34, No. B5, P. 553-566.
5. Лейви А.Я., Талала К.А., Яловец А.П.. Диффузионный массоперенос при плазменной обработке металлов // 11-я Международная конференция «Взаимодействие излучений с твердым мелом», 23-25 сентября 2015 г. Минск, Беларусь. – С. 65-66.
6. Akhmadeev Yu.H., Lopatin I.V., Koval N.N., Schanin P.M., Kolobov Yu.R., Vershinin D.S., Smolyakova M.Yu. Influence of Plasma-Forming Gas Composition on Nitriding in Non-Selfsustained Glow Discharge with Large Hollow Cathode // 10th International Conference on Modification of Materials with Particle Beams and Plasma Flows. Tomsk. 19-24, September 2010. P. 228-231.
7. Жигунов В.В., Лавит А.И., Математическое моделирование диффузии с учетом появления и исчезновения фаз // Известия Тульского государственного университета, Естественные науки. 2013. Вып. 1. С. 202–214.
8. V.I. Dimitrov, J.D. Haen, G.Knuyt, C.Quaeyhaegens, L.M. Stals. Modeling of nitride layer formation during plasma nitriding of iron // Computation Materials Science 15 – 1999, P. 22-34.

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕРМОДИФФУЗИОННЫХ ПРОЦЕССОВ ПРИ ВОЗДЕЙСТВИИ ИНТЕНСИВНЫХ ПОТОКОВ ЭНЕРГИИ НА МЕТАЛЛИЧЕСКУЮ ПОВЕРХНОСТЬ

Чан Ми Ким Ан

Научный руководитель: Коваль Т.В.

(г. Томск, Национальный исследовательский Томский политехнический университет)

e-mail: tranmykiman@gmail.com

MATHEMATICAL MODELING OF THERMAL DIFFUSION PROCESSES IN SURFACE OF ALLOY UNDER INFLUENCE OF INTENSE FLOW OF ENERGY

Tran My Kim An

Scientific adviser: T. V. Koval

(Tomsk, National Research Tomsk Polytechnic University)

Abstract: This paper proposes a mathematical model and results of process computer modeling thermal diffusion processes in surface of alloy меди-железа (Cu-Fe) under influence of intense energy flow.

Key words: thermal diffusion, mathematical model, computer modeling, partial diffusion coefficient, partial differential equations in Matlab.

Введение

Термодиффузия (термическая или тепловая диффузия) – молекулярный перенос вещества, связанный с наличием в среде (растворе или смеси) градиента температуры. При термодиффузии концентрация компонентов в областях повышенной и пониженной температуры различна [1]. Термодиффузия часто встречается в природе, а также имеет множество приложений в технике, например, определение состава нефти и разделения ее компонентов, нанесение различных покрытий на изделия из металлов, рассмотрение эффекта теплового насоса и т.п.

С развитием компьютерной технологии и компьютерных математических пакетов компьютерное моделирование стало мощным и эффективным исследованным инструментом в физике, астрофизике, механике, химии, биологии, экономике, социологии, метеорологии, других науках и прикладных задачах в различных областях. Компьютерные модели используются для получения новых знаний о моделируемом объекте или для приближенной оценки поведения систем, слишком сложных для аналитического исследования. Обладая рядом преимуществ [2], компьютерные модели прочее, удобнее и нагляднее исследовать в силу их возможности проводить т. н. вычислительные эксперименты, в тех случаях, когда реальные эксперименты затруднены из-за финансовых или физических препятствий, или могут дать непредсказуемый результат.

В настоящее время перспективными являются методы поверхностного упрочнения, использующих концентрированные потоки энергии и обеспечивающие формирование в поверхностном слое высокопрочных структур. Материалы на основе железо-медь (сталь-медь) нашли широкое применение в отраслях промышленности благодаря повышенной коррозионной стойкости во влажной атмосфере и растворе солей. Одним из способов модификации поверхности осуществляется в 2 этапа. На первом этапе проводится электровзрывное легирование поверхности образца путем электрического взрыва медных фольг толщиной до 20 мкм. В результате формируется слой распыляемого материала и распределение его концентрации внутри образца. На втором этапе проводится высокоинтенсивная электронно-пучковая обработка поверхности легирования, сопровождаемая плавлением поверхностного слоя, высокоскоростной кристаллизацией расплава и диффузионными процессами. При этом характеристики поверхностных слоев существенно зависят от количества импульсов воздействия и плотности потока энергии, концентрации легированного элемента. Поток энергии создается низкоэнергетическим электронным пучком (10-20 эВ), что позволяет рассматривать поверхностный источник воздействия.

Цель работы данной работы является построение математической модели термодиффузионных процессов в приповерхностных слоях железа, предварительно легированного медью, при воздействии импульсными потоками энергии (с плотностью 15 ... 30 Дж/см²).

Математическая постановка

Математическое моделирование термодиффузионных процессов включает в себя задачи теплопроводности и диффузии.

Уравнение теплопроводности [3]:

$$c\rho \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda(T) \frac{\partial T}{\partial x} \right) \quad (1)$$

где c – удельная теплоемкость [Дж/(Кг·К)]; ρ – плотность [Кг/м³]; T – температура [К]; t – время [с]; $\lambda(T)$ – коэффициент теплопроводности [Вт/(м·К)].

При решении задачи теплопроводности применяется методика сглаживания, предложенная в работе А. А. Самарского [4], которая заключается в том, что вместо температуры плавления используются интервалы температур, в которых материал находится в двухфазных состояниях. В этом случае

$$c\rho = \begin{cases} c_s\rho_s, & T < T_s - \Delta T_s \\ c_s\rho_s + \frac{L_s(T - T_s)}{T_s \Delta T_s}, & T_s - \Delta T_s \leq T \leq T_s \\ c_L\rho_L, & T > T_s \end{cases} \quad (2)$$

$$\lambda(T) = \begin{cases} \lambda_s, & T < T_s - \Delta T_s \\ \lambda_s + \frac{(\lambda_L - \lambda_s)(T - T_s)}{\Delta T_s}, & T_s - \Delta T_s \leq T \leq T_s \\ \lambda_L, & T > T_s \end{cases} \quad (3)$$

где s, L – твердое, жидкое состояние, T_s – температура плавления железа, ΔT_s – температурные интервалы, в котором модель находится в двухфазном состоянии, L_s – скрытая теплота плавления железа.

Эффективные величины теплофизических параметров $P = \{c, \rho, \lambda, L_s\}$ определялись в соответствии с аддитивным законом:

$$P = \frac{P_{Cu} * a + P_{Fe} * b}{a + b} \quad (4)$$

где P_{Cu} и P_{Fe} – соответствующие параметры меди и железа, a и b – соответствующий им процентный состав. В рамках этой работы значения физических параметров (c, ρ, λ, L_s) постоянные и равны соответствующим табличным значениям при определенных состояниях (твердом или жидком) Длина расчетной области L мкм.

Граничные условия модели (3):

$$\text{при } x = 0: \quad \begin{cases} -\lambda(T) \frac{\partial T}{\partial x} = q_0, & t \leq t_0 \\ -\lambda(T) \frac{\partial T}{\partial x} = 0, & t > t_0 \end{cases} \quad (5)$$

$$\text{при } x = L: \quad \frac{\partial T}{\partial x} = 0 \quad (6)$$

где $q_0 = E_s/t_0$ – плотность мощности во время действия импульса t_0 , E_s – плотность энергии потока.

Начальные условия:

$$T(0, x) = T_0, \quad x \in [0, L] \quad (7)$$

Распределение концентрации меди C (массовая концентрация меди [вес.%]) в модели описывается диффузионным уравнением:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D(T) \frac{\partial C}{\partial x} \right) \quad (8)$$

Температурная зависимость коэффициента диффузии в твердой фазе подчиняется закону Аррениуса [5]:

$$D(T) = D_0 \exp\left(-\frac{E}{RT}\right) \quad (9)$$

где D_0 – предэкспонент [$\text{м}^2/\text{с}$]; E – энергия активации [Дж/моль]; $R = 8,31$ – универсальная газовая постоянная [Дж/(моль·К)]; D – парциальный коэффициент диффузии меди в железо [$\text{м}^2/\text{с}$]. Распределение температуры $T(x, t)$ в пространстве и во времени следует из решения задачи теплопроводности (1)–(7). С использованием данных работы [6], коэффициент диффузии запишется в виде:

$$D(T) = 3.6 * 10^{-6} \exp\left(-\frac{65500}{RT}\right). \quad (10)$$

Граничные условия модели (8) – нулевые потоки на обеих границах [7]:

$$\frac{\partial C}{\partial x}(t, x = 0) = 0; \quad \frac{\partial C}{\partial x}(t, x = L) = 0; \quad (11)$$

Начальное условие – распределение концентрации меди в приповерхностной области $l \ll L$ задано функцией,

$$C(0, x) = p_1 x^6 + p_2 x^5 + p_3 x^4 + p_4 x^3 + p_5 x^2 + p_6 x + p_7, \quad x < l,$$

$$C(0, x) = 0, \quad x > l,$$

в соответствии экспериментальному распределению после взрывного легирования.

Результаты моделирования

Модель термодиффузии с системой двух частных дифференциальных уравнений (1)-(11) решалась с применением пакета Matlab (решатель pde (partial differential equations)). Решения задачи теплопроводности (1)-(7) являются входными данными для вычисления коэффициента диффузии $D(T)$ (10) в задаче диффузии.

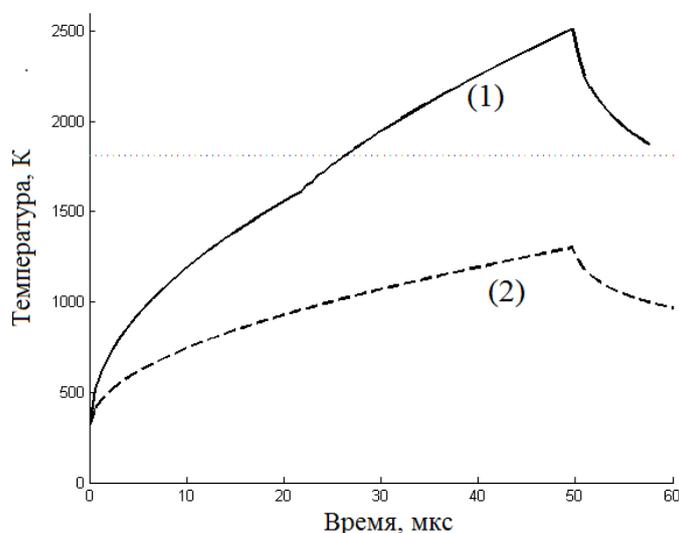


Рис.1. Зависимость температуры поверхности от времени при различных плотностях мощности: (1) – $q_0 = 6 \cdot 10^9$; (2) – $q_0 = 3 \cdot 10^9$ (Вт/м²)

При плотности мощности $q_0 < 3 \cdot 10^9$ (Вт/м²) расплава поверхностных слоев, как видно из рис. 1, не происходит. Поэтому диффузия меди в железо возможна при плотности мощности $q_0 > 3 \cdot 10^9$ (Вт/м²). Перераспределение начальной концентрации меди происходит в области расплава поверхностного слоя сплава FeCu (рис. 2). Использование импульсного режима воздействия потоком энергии позволяет добиться нужной концентрации в приповерхностном слое.

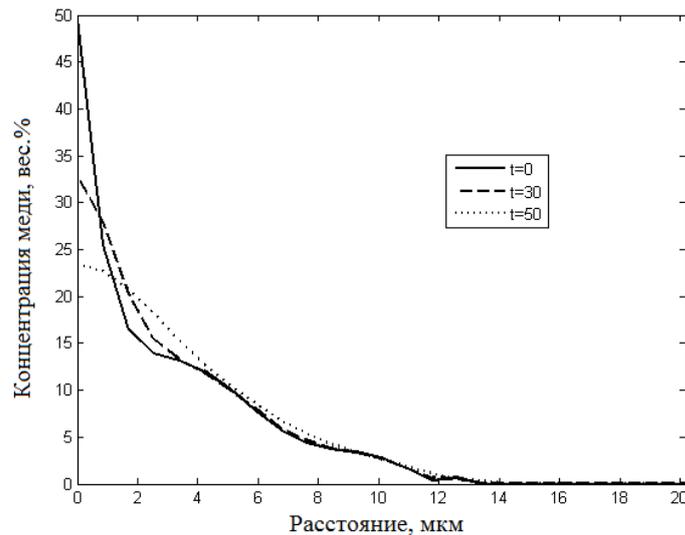


Рис.2. Распределение концентрации меди в модели по времени $t=0$, $t=30$ и $t=50$ (мкс) при длительности импульса $t_0=50$ (мкс), плотности мощности $q_0=0.6 \cdot 10^{10}$ (Вт/м²)

Заключение

Представленная модель позволяет вычислять и прогнозировать температуру сплава и распределение концентрации меди во времени, кроме этого с ее помощью можно анализировать влияние входных параметров на процесс термодиффузии. Данная модель может быть применена для других материалов и других входных условий (начальных и граничных) задач дифференциальных уравнений в частных производных.

ЛИТЕРАТУРА

1. Гапоненко Ю.А., Гончарова О.Н., Пухначев В.В., Современные математические модели конвекции. – М.: ФИЗИМАЛИТ, 2008. – 368 с. ISBN 978-5-9221-0905-5.
2. https://ru.wikipedia.org/wiki/Компьютерное_моделирование
3. Сарычев В.Д., Алсараева К.В., Райков С.В., Иванов Ю.Ф., Невский С.А., Математическая модель воздействия электронных пучков на металлическую поверхность // Известия ВолгГТУ. УДК 669.017 – С.106-109
4. Самарский А.А., Вабищевич П.Н., Вычислительная теплопередача // М.: Едиториал УРСС, 2003. – 784 с.
5. Овчаренко В.Е., Букрина Н.В., Иванов Ю.Ф., Моховиков А.А., Джинчен Ван, Баохай Ю., Импульсное электронно-пучковое облучение металлокерамического сплава в азотсодержащей атмосфере // Известия Томского политехнического университета. 2011. Т. 318. № 2, – С.110-115
6. http://studopedia.su/9_38993_ob-emnoe-diffuzionnoe-vzaimodeystvie-pri-soedinenii-raznoimennih-metallov-i-metallov-s-nemetallicheskim-materialami.html
7. http://ikt.muotr.ru/html2/1/lek1_5.html