



УДК 669.187.526.001.5

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ИСПАРЕНИЯ ЛЕГИРУЮЩИХ ЭЛЕМЕНТОВ ПРИ ЭЛЕКТРОННО-ЛУЧЕВОМ ОПЛАВЛЕНИИ ПОВЕРХНОСТИ ЦИЛИНДРИЧЕСКИХ СЛИТКОВ ИЗ СПЛАВОВ НА ОСНОВЕ ТИТАНА

С. В. Ахонин, А. С. Миленин, А. Н. Пикулин

Разработана математическая модель испарения легирующих элементов при электронно-лучевом оплавлении цилиндрических слитков из сплавов на основе титана. В рамках предложенной модели получены зависимости химического состава оплавленной зоны слитка от мощности электронно-лучевых пушек и угловой скорости вращения слитка. Адекватность модели подтверждена экспериментальными данными, полученными при оплавлении поверхности цилиндрических слитков из сплава Ti-6Al-4V.

Mathematical model of evaporation of alloying elements in electron beam surface melting of cylindrical ingots made from titanium-base alloys has been developed. Within the scope of the offered model the dependencies of chemical composition of the melted zone of ingot on power of electron beam guns and angular rate of ingot rotation were obtained. Adequacy of model was confirmed by experimental data obtained in surface melting of cylindrical ingots from alloy Ti-6Al-4V.

Ключевые слова: электронно-лучевое оплавление; цилиндрический слиток; оплавляемая зона; химический состав; испарение

Введение. Для удаления различных дефектов поверхности слитков, получаемых способами специальной электрометаллургии, в ИЭС им. Е. О. Патона разработана технология электронно-лучевого оплавления (ЭЛО) поверхности слитков [1]. Предложенная технология позволяет устранить поверхностные дефекты полностью [2], что подтверждается как исследованиями качества слитков методами неразрушающего контроля, так и прямым изучением макроструктуры темплетов оплавленных слитков (рис. 1).

Отличительной особенностью технологии ЭЛО является то, что оплавление проходит в высоком вакууме, в результате чего легирующие элементы сплава, имеющие высокую упругость пара, испаряются достаточно интенсивно, что может привести к изменению химического состава оплавленного слоя. Поэтому важной задачей оптимизации процесса ЭЛО поверхности слитка является обеспечение соответствия химического состава сплава в поверхностной оплавляемой зоне требованиям стандартов.

Задачу оптимизации процесса ЭЛО решали методами математического моделирования на примере оплавления цилиндрических слитков титанового сплава Ti-6Al-4V. Основным легирующим элементом этого сплава является алюминий — элемент с высокой упругостью пара. Поэтому предложенная модель рассматривает процессы испарения алюминия из сплава титана.

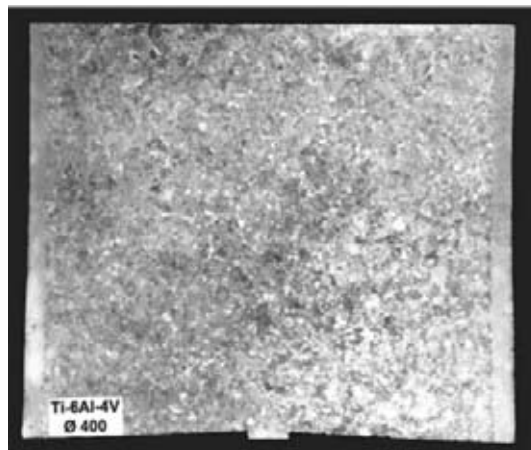


Рис. 1. Продольный темплет слитка титанового сплава, поверхность которого оплавлена способом ЭЛО



Технология ЭЛО. Суть предложенной технологии ЭЛО заключается в нагреве и расплавлении поверхностного слоя слитка электронными лучами вдоль его образующей одновременно по всей длине. Фокальному пятну электронных лучей придают форму удлиненного эллипса, большая ось которого направлена вдоль образующей. При этом слиток вращается вокруг продольной оси.

Технологическая схема оплавления слитков реализована на базе специализированной электронно-лучевой установки УЭ-185, для нагрева слитка используют три электронно-лучевые пушки [3].

Моделирование процесса испарения легирующих элементов сплава и определение химического состава металла в зоне оплавления. Для определения концентрации алюминия в оплавляемой зоне требуется составить уравнения материального баланса, т. е. соотношений, отображающих суммарный массообмен через границу исследуемой области. В данном случае рассматривается область жидкого металла в поверхностной зоне слитка, т. е. жидкая ванна.

В системе отсчета, связанной с жидкой ванной, можно выделить следующие потоки вещества: металл первоначального состава, протекающий через границу фаз твердая фаза–жидкость; испаряющийся металл, проходящий через границу фаз жидкость–газообразная фаза; металл конечного состава, следующий через границу фаз жидкость–твердая фаза. Сумма этих потоков характеризует изменение во времени массы вещества в области жидкого металла. Кроме того, принято, что концентрации элементов непосредственно в жидкой ванне равны конечным концентрациям соответствующих элементов в оплавляемой зоне слитка. Поэтому уравнения материального баланса будут иметь вид

$$\begin{cases} \frac{d(\rho V[\text{Al}]_t)}{dt} = m[\text{Al}]_0 - S\pi_{\text{Al}} - m_1[\text{Al}]_1, \\ \frac{d(\rho V[\text{Ti}]_t)}{dt} = m[\text{Ti}]_0 - S\pi_{\text{Ti}} - m_1[\text{Ti}]_1, \end{cases} \quad (1)$$

где $[M]_0$, $[M]_1$ — массовая концентрация соответствующих элементов в оплавляемой зоне до и после прохождения луча; ρ — плотность сплава, $\text{кг}/\text{м}^3$; S — площадь поверхности жидкого металла, м^2 ; V — объем ванны жидкого металла, м^3 ; m — масса металла, проходящего через границу фаз твердая фаза–жидкость в единицу времени, $\text{кг}/\text{с}$; m_1 — масса металла, проходящего через границу фаз жидкость–твердая фаза в единицу времени, $\text{кг}/\text{с}$; π_{Al} , π_{Ti} — удельная скорость испарения соответственно алюминия и титана с поверхности жидкой ванны, $\text{кг}/(\text{с}\cdot\text{м}^2)$.

Удельная скорость испарения с поверхности жидкого металла определяется уравнениями Ленгмюра [4]:

$$\pi_i = k_i X_i, \quad (2)$$

где $k_i = \alpha_i \gamma_i P_i^0 \sqrt{\frac{M_i}{2\pi RT}}$ — константа скорости испарения; α_i — коэффициент конденсации; γ_i — коэффициент активности; P_i^0 — равновесное давление

паров элемента, Па; M_i — молярная масса элемента, $\text{кг}/\text{моль}$; X_i — мольная доля элемента у поверхности раствора; $R = 8,314 \text{ Дж}/(\text{моль}\cdot\text{К})$ — универсальная газовая постоянная; T — абсолютная температура расплава, К.

Для титана и алюминия зависимости равновесного давления паров от температуры соответственно имеют следующий вид [5]:

$$\log(P_{\text{Ti}}^0(T)) = -\frac{22946}{T} + 10,581 - 0,373 \log(T);$$

$$\log(P_{\text{Al}}^0(T)) = -\frac{16379}{T} + 9,979 - 0,335 \log(T).$$

На основе выражения (2) для реальных сплавов, в которых концентрация титана значительно превосходит концентрацию алюминия, удельная скорость испарения элементов с поверхности жидкой ванны имеет вид [6]

$$\begin{cases} \pi_{\text{Ti}} \cong k_{\text{Ti}} \left(1 - \frac{M_{\text{Ti}}}{M_{\text{Al}}} [\text{Al}]\right), \\ \pi_{\text{Al}} \cong \left(\frac{1}{\beta_{\text{Al}} \rho} + \frac{M_{\text{Al}}}{M_{\text{Ti}} k_{\text{Al}}}\right)^{-1} [\text{Al}], \end{cases}$$

где β_{Al} — коэффициент массопереноса алюминия в жидком титане, $\text{м}/\text{с}$.

Скорость поступления металла в жидкую ванну вычисляется исходя из геометрических параметров как отношение массы металла оплавляемой зоны ко времени одного оборота, и определяется выражением

$$m = Hl \left(R_c - \frac{H}{2}\right) \rho \omega, \quad (3)$$

где H — глубина проплавления, м ; l — длина слитка, м ; L — длина жидкой ванны, м ; R_c — радиус слитка, м ; ω — угловая скорость вращения слитка, $\text{рад}/\text{с}$.

С учетом того, что диаметр слитка значительно превосходит глубину проплавления, формула (3) приобретает вид

$$m \cong HR_c l \rho \omega.$$

Большую часть времени процесс оплавления проходит в режиме, приближенном к стационарному, что можно объяснить постоянной во времени массой вещества в жидкой ванне. Математически это означает равенство нулю производных по времени

$$\frac{d(\rho V[\text{Al}]_t)}{dt} = \frac{d(\rho V[\text{Ti}]_t)}{dt} = 0.$$

С учетом указанного система уравнений материального баланса (1) принимает следующий вид:

$$\begin{cases} m[\text{Al}]_0 - S \left(\frac{1}{\beta_{\text{Al}} \rho} + \frac{M_{\text{Al}}}{M_{\text{Ti}} k_{\text{Al}}}\right)^{-1} [\text{Al}]_1 - m_1[\text{Al}]_1 = 0, \\ m(1 - [\text{Al}]_0) - S k_{\text{Ti}} \left(1 - \frac{M_{\text{Ti}}}{M_{\text{Al}}} [\text{Al}]_1\right) - m_1(1 - [\text{Al}]_1) = 0. \end{cases}$$

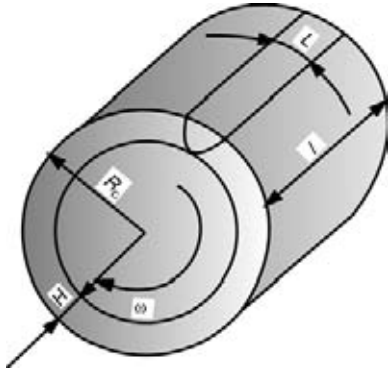


Рис. 2. Геометрические параметры слитка

Решение системы относительно неизвестного $[Al]_1$, таким образом, имеет вид

$$[Al]_1 = \frac{S(\beta - k_{Ti}) + m}{2S \left(\beta - \frac{M_{Ti}}{M_{Al}} k_{Ti} \right)} - \frac{\sqrt{[S(\beta - k_{Ti}) + m]^2 - 4mS(\beta - (M_{Ti}/M_{Al})k_{Ti})}[Al]_0}}{2S(\beta - M_{Ti}/M_{Al}k_{Ti})} \quad (4)$$

где $\beta = \left(\frac{1}{\beta_{Al} \rho} + \frac{M_{Al}}{M_{Ti} k_{Al}} \right)^{-1}$ — суммарный коэффициент массопереноса алюминия в жидком титане.

Очевидно, что поток вещества через границу фаз жидкость–твёрдая фаза значительно превосходит таковой испаряющегося с поверхности жидкого металла, т. е. $\frac{S\pi_i}{m[M]_0} \ll 1$. С учетом этого выражение (4) значительно упрощается:

$$[Al]_1 = \left(1 - \frac{1}{\omega R_c} K \frac{L}{H} \right) [Al]_0, \quad (5)$$

где $K = \frac{1}{\rho} \left(\left(\frac{1}{\beta_{Al} \rho} + \frac{M_{Al}}{M_{Ti} k_{Al}} \right)^{-1} - k_{Ti} \right)$.

Подстановка в уравнение (5) длины ванны жидкого металла L , глубины проплавления H позволяет получить значения конечного состава оплавленной зоны слитка при соответствующих параметрах процесса ЭЛО.

В реальном производственном цикле для достижения требуемого качества оплавленной поверхности может потребоваться несколько оборотов слитка. На основе формулы (5) можно получить соотношение для вычисления концентрации алюминия в металле оплавленной зоны при произвольном количестве оборотов слитка, что позволяет учесть фактор многократного прохождения электронных лучей по поверхности при оптимизации производственного цикла. Зависимость массовой концентрации алюминия в оплавленной зоне после n оборотов имеет вид

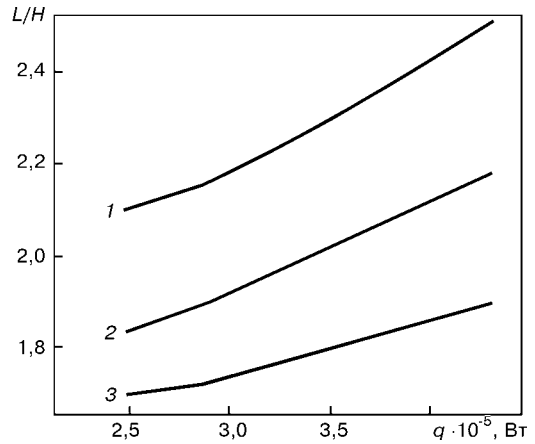


Рис. 3. Зависимость отношения длины жидкой ванны к глубине проплавления от суммарной мощности электронно-лучевых пушек при различных значениях угловой скорости вращения слитка, рад/с: 1 — 0,0060; 2 — 0,0045; 3 — 0,0030. Здесь и на рис. 4–6 $R_c = 0,2$ м; $l = 2$ м; $n = 3$

$$[Al]_n = \left(1 - \frac{1}{\omega_1 R_c} K_1 \frac{L_1}{H_1} \right) \left(1 - \frac{1}{\omega_2 R_c} K_2 \frac{L_2}{H_2} \right) \dots \left(1 - \frac{1}{\omega_n R_c} K_n \frac{L_n}{H_n} \right) [Al]_0. \quad (6)$$

Если пренебречь малыми величинами высоких порядков, выражение (6) можно представить таким образом:

$$[Al]_n = \left(1 - \frac{1}{\omega_1 R_c} K_1 \frac{L_1}{H_1} - \frac{1}{\omega_2 R_c} K_2 \frac{L_2}{H_2} - \dots - \frac{1}{\omega_n R_c} K_n \frac{L_n}{H_n} \right) [Al]_0. \quad (7)$$

Следует отметить, что если угловая скорость вращения слитка и суммарная мощность электронных пушек в процессе оплавления остаются постоянными и, кроме того, можно пренебречь процессом теплонасыщения (например, в случае небольшого количества оборотов), то формула (7) принимает вид

$$[Al]_n = \left(1 - \frac{n}{\omega R_c} K \frac{L}{H} \right) [Al]_0. \quad (8)$$

Для получения зависимостей длины жидкой ванны и глубины проплавления (рис. 2) от технологических и физико-химических параметров процесса ЭЛО использован теоретико-экспериментальный метод Н. Н. Рыкалина [7, 8]. Для соответствия этого метода предложенному процессу ЭЛО дополнительно учтены распределение энергии в фокальном пятне; перегрев металла жидкой ванны; теплонасыщение слитка в процессе ЭЛО.

Анализ тепловых процессов позволяет оценить зависимость отношения длины жидкой ванны к ее глубине, фигурирующее в соотношениях (5)–(8), от различных технологических параметров. Так, например, зависимость L/H от мощности (рис. 3)

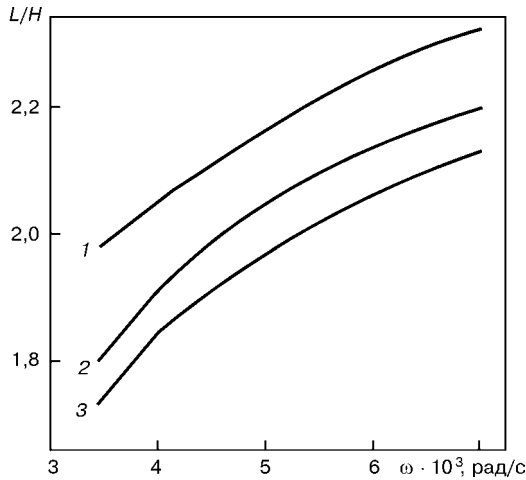


Рис. 4. Зависимость отношения длины жидкой ванны к глубине проплавления от угловой скорости вращения при различных значениях суммарной мощности электронно-лучевых пушек, Вт: 1 – 330770; 2 – 297000; 3 – 276700

имеет явную нелинейность в области малых значений мощностей, тогда как в области высоких мощностей эта зависимость с высокой степенью точности аппроксимируется линейной функцией. Зависимость L/H от угловой скорости вращения слитка (рис. 4) имеет существенно нелинейный характер, что обуславливается спецификой распространения тепла от движущегося источника.

Коэффициент активности алюминия γ_{Al} в общем случае является функцией температуры металла жидкой ванны. В рамках модели Редлиха–Кистера зависимость γ_{Al} от температуры выражается следующим образом [9]:

$$\gamma_{Al} = \exp(\Delta \bar{G}_{Al}^{ex}/RT),$$

где $\Delta \bar{G}_{Al}^{ex}$ – парциальная избыточная свободная энергия, имеющая в данном случае вид

$$\Delta \bar{G}_{Al}^{ex} = X_{Ti}(1 - X_{Al}) \sum_{n=0}^2 L_{Al, Ti}^{(n)} (X_{Al} - X_{Ti})^n + 2X_{Al} X_{Ti}^2 [L_{Al, Ti}^{(1)} + L_{Al, Ti}^{(2)} (X_{Al} - X_{Ti})]. \quad (9)$$

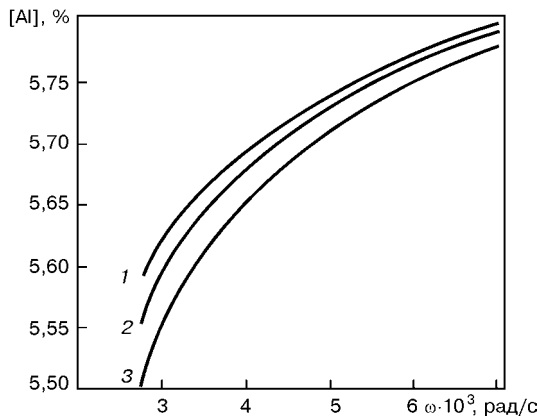


Рис. 5. Зависимость массовой концентрации алюминия в оплаиваемой зоне от угловой скорости вращения слитка при различных значениях суммарной мощности электронно-лучевых пушек, Вт: 1 – 250000; 2 – 297000; 3 – 350000. Здесь и на рис. 6, 7 начальная концентрация алюминия в слитке составляет 6 %

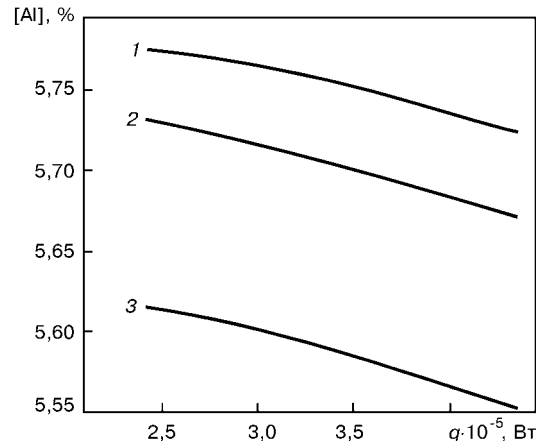


Рис. 6. Зависимость массовой концентрации алюминия в оплаиваемой зоне от суммарной мощности электронно-лучевых пушек при различных значениях угловой скорости вращения слитка, рад/с: 1 – 0,0060; 2 – 0,0045; 3 – 0,0030

Модельные параметры жидких фаз $L_{Al, Ti}^{(n)}$ для системы Al–Ti, фигурирующие в выражении (9), следующие:

$$\begin{cases} L_{Al, Ti}^{(0)} = -108250 + 38T, \\ L_{Al, Ti}^{(1)} = -6000 + 5T, \\ L_{Al, Ti}^{(2)} = 15000. \end{cases}$$

Таким образом, используя соотношение (7), можно оценить массовую концентрацию алюминия в оплаиваемой зоне при различных технологических параметрах ЭЛО. Так, зависимость концентрации алюминия от угловой скорости вращения (рис. 5) является существенно нелинейной с асимптотическим поведением в области значительных скоростей. Характер зависимости концентрации алюминия от эффективной мощности теплового нагрева (рис. 6) существенно зависит от угловой скорости вращения слитка: при больших скоростях вращения эта зависимость квазилинейна, но при малых скоростях проявляется значительная нелинейность в области высоких мощностей теплового нагрева.

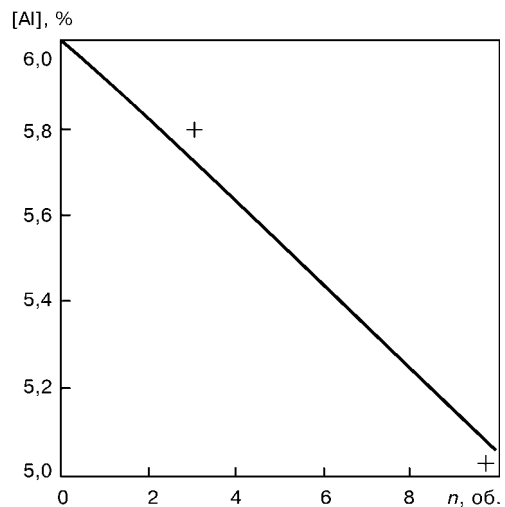


Рис. 7. Зависимость массовой концентрации алюминия в оплаиваемой зоне от количества оборотов (плюсом обозначены экспериментальные данные, сплошной линией – результаты расчета согласно математической модели)



Проверка адекватности модели. Правильность предложенной модели проверяли на основе экспериментальных данных, полученных в результате оплавления цилиндрического слитка сплава Ti-6Al-4V, проведенного в следующем режиме:

суммарная мощность источника, Вт.....	297000
радиус слитка, м.....	0,2
длина слитка, м.....	2
скорость вращения, рад/с.....	0,0045
начальная концентрация алюминия в слитке, %.....	6
количество оборотов.....	3
коэффициент массопереноса алюминия в жидком титане, м/с.....	$1 \cdot 10^{-5}$

Химический анализ состава слитка, полученного при данных технологических параметрах, показал, что содержание алюминия в оплавленной зоне составляет $[Al]_3 = 5,79 \%$.

Предложенный подход позволяет получить зависимость содержания алюминия в оплавляемой поверхностной зоне от количества оборотов слитка (рис. 7). Зависимость является квазилинейной с небольшой нелинейностью в области значительного количества оборотов.

Количеству оборотов $n = 3$ соответствует массовая концентрация алюминия в исследуемой зоне $[Al]_3 = 5,72 \%$.

Для экспериментального подтверждения соотношения (6) при большом количестве оборотов было дополнительно проведено оплавление цилиндрического слитка при аналогичных технологических параметрах, но при количестве оборотов $n = 10$.

Согласно соотношению (6), массовая концентрация алюминия $[Al]_{10}$ в оплавляемой зоне составляет $5,06 \%$. Химический анализ состава металла исследуемой области показал, что в данном случае $[Al]_{10} = 5,02 \%$.

Таким образом, результаты в рамках описанной модели соответствуют экспериментальным данным с погрешностью $1,7 \%$.

Выводы

1. Разработана математическая модель, позволяющая описать процессы испарения легирующих элементов при оплавлении цилиндрических слитков из сплавов на основе титана.

2. Предложенный подход дает возможность получить соотношения, связывающие концентрацию легирующих элементов в оплавляемой зоне слитка с технологическими параметрами процесса ЭЛО, вплоть до аналитических решений.

3. Данная модель отражает соответствующие физико-химические процессы с достаточной степенью точности.

4. Допустимый диапазон изменения технологических параметров, при которых предложенная модель адекватна экспериментальным данным, достаточен для описания реального процесса ЭЛО.

1. *Электронно-лучевая плавка* / Б. Е. Патон, Н. П. Тригуб, Д. А. Козлитин и др. — Киев: Наук. думка, 1997. — С. 181–198.
2. *Электронно-лучевое оплавление слитков титана* / А. Н. Пикулин, Г. В. Жук, Н. П. Тригуб, С. В. Ахонин // *Соврем. электрометаллургия*. — 2003. — № 4. — С. 17–19.
3. *Электронно-лучевая установка УЭ-185 для оплавления поверхностного слоя слитков* / Н. П. Тригуб, Г. В. Жук, А. Н. Пикулин и др. // Там же. — 2003. — № 3. — С. 12–14.
4. *Жуховицкий А. А., Шварцман Л. А.* Физическая химия. — М.: Металлургия, 1976. — 543 с.
5. *Свойства неорганических соединений.* Справочник / А. И. Ефимов, Л. П. Белорукова, И. В. Василькова, В. П. Чечев. — Л.: Химия, 1983. — 392 с.
6. *Mathematical modeling of aluminum evaporation during electron-beam cold-hearth melting of Ti-6Al-4V ingots* / S. V. Akhonor, N. P. Trigub, V. N. Zamkov, S. L. Semiatin // *Metallurgical and Materials Transaction*. — 2003. **34 b**, № 8. — P. 447–454.
7. *Рыкалин Н. Н.* Тепловые основы сварки. — М.: Изд-во АН СССР, 1947. — Ч. 1. — С. 150–170.
8. *Рыкалин Н. Н.* Расчеты тепловых процессов при сварке. — М.: Машгиз, 1951. — С. 80–89.
9. *Иванченко Н. В., Устинов А. И., Мохорт В. А.* Термодинамический анализ испарения в вакууме титана и никеля из сплава Ti-Ni // *Соврем. электрометаллургия*. — 2003. — № 3. — С. 15–18.

Ин-т электросварки им. Е. О. Патона НАН Украины, Киев

Поступила 08.09.2004

НОВАЯ КНИГА

НАНО-2004:

Тезисы 1-й Всероссийской конференции по наноматериалам (16–17 декабря 2004 г., Москва, ИМЕТ РАН). — М.: Учеба, 2004. — 228 с.

В сборнике представлено около 250 тезисов докладов, заслушанных на конференции по четырем секциям:

- I секция — «Нанопорошки и материалы на их основе»;
- II секция — «Наноструктурные пленки и покрытия в конструкционных и функциональных материалах»;
- III секция — «Объемные наноматериалы»;
- IV секция — «Физико-химические процессы в наноматериалах».

