



Красношлык Н. А.

## КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕЖФАЗНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В МЕТАЛЛИЧЕСКИХ СПЛАВАХ

*В работе предложена двумерная мезоскопическая модель межфазного взаимодействия в бинарных металлических сплавах. Описаны основные этапы построения данной модели и выполнена ее программная реализация. Полученная компьютерная модель позволяет проводить численное исследование эволюции фазового состава сплава в процессе диффузионного взаимодействия.*

**Ключевые слова:** компьютерное моделирование, мезоскопическая модель, межфазное взаимодействие, интерметаллическая фаза.

### 1. Введение

Интенсивное развитие авиационной, автомобилестроительной, судостроительной, приборостроительной и многих других отраслей промышленности требует создания новых металлических сплавов, к которым выдвигаются более высокие требования жаропрочности, сверхтвердости, тугоплавкости, устойчивости к коррозии, сверхпроводимости.

Все физико-химические и механические свойства сплава определяются имеющимися в его структуре интерметаллическими фазами, которые представляют собой однородную часть сплава, обладающую своим химическим составом, строением и свойствами, а также имеющую границы раздела с другими фазами, при переходе через которые свойства резко меняются. Диффузионный процесс, протекающий при термической или химико-термической обработке сплава, приводит к росту одних и угнетению других фаз. Поэтому для прогнозирования эволюции фазового состава металлических сплавов, а также для управления технологическими процессами получения материалов с заданными свойствами требуется разработка математических моделей, описывающих процессы межфазного взаимодействия интерметаллических фаз при взаимной диффузии.

Использование компьютерного моделирования при исследовании межфазного взаимодействия в металлических сплавах позволит уменьшить время и средства на проведение лабораторных исследований, необходимых для получения сплава с заданными свойствами.

### 2. Анализ литературных данных и постановка проблемы

Одним из подходов при моделировании межфазного взаимодействия в металлических сплавах является рассмотрение системы на мезоскопическом уровне. Сам термин «мезоскопический» введен в физический обиход В. ван Кемпеном в 1976 году и нередко используется совместно с понятиями микро- и макроскопический (от греч. *mikros* — малый, *mesos* — средний, *makros* — большой). Таким образом, мезоскопические модели занимают промежуточное положение между существующими микро- и макро- моделями описания диффузионных процессов. Данные модели применяются

для описания процессов фазообразования и последующего роста промежуточных фаз в металлических системах [1–3], позволяя учитывать различные параметры, как и образовавшихся интерметаллических фаз, так и сплава в целом. Одним из сопутствующих эффектов при взаимной диффузии в металлических сплавах является изменение объема самого образца. Поскольку изменение линейных размеров образца в результате термической обработки металлических сплавов может привести к возникновению внутренних напряжений, которые являются одной из основных причин появления трещин, то в соответствующих математических моделях значение объема следует рассматривать как один из параметров, характеризующих данную систему. Для этого необходимо учитывать различие парциальных мольных объемов компонентов сплава в каждой из промежуточных фаз. Впервые на необходимость учета мольного объема обратили внимание F. Sauer и V. Freise [4], которые определили коэффициент взаимной диффузии, содержащий в качестве параметров значения парциальных мольных объемов компонентов. Описание на макроскопическом уровне процесса межфазного взаимодействия и эффекта Киркендалла при взаимной диффузии в бинарных металлических системах с учетом парциальных мольных объемов рассмотрено в работах [5–9], и может быть применено при построении мезоскопических моделей.

### 3. Объект, цель и задачи исследования

*Объектом исследования* является процесс межфазного взаимодействия в металлическом сплаве при взаимной диффузии.

*Цель работы* состоит в построении двумерной мезоскопической модели межфазного взаимодействия в металлическом сплаве для компьютерного моделирования процессов диффузионного роста промежуточных фаз.

Для достижения указанной цели были поставлены следующие задачи:

1. Разработать мезоскопическую модель межфазного взаимодействия в металлическом сплаве с учетом парциальных мольных объемов компонентов.
2. Выполнить программную реализацию предложенной мезоскопической модели межфазного взаимодействия в металлическом сплаве.

3. Провести компьютерное моделирование межфазного взаимодействия в бинарном сплаве в процессе диффузионного отжига.

**4. Построение мезоскопической модели межфазного взаимодействия в металлическом сплаве**

Рассмотрим бинарную металлическую систему  $A-B$  с двумя  $\alpha$ - и  $\beta$ -фазами, каждая из которых существует в определенном диапазоне концентраций. Моделируемый образец представляет собой прямоугольную двумерную область, разбитую на квадратные ячейки нанометрического размера, характеризующиеся значением концентрации и принадлежностью к фазе. Среди мезоскопических моделей существуют модели, в которых ячейки могут находиться как в однофазном, так и в двухфазном состоянии [1, 3]. В предлагаемой модели каждая мезоячейка в определенный момент времени может принадлежать только к одной из двух фаз, как в работе [2].

Изменение концентрации каждой мезоскопической ячейки системы обусловлено наличием потоков диффундирующих атомов через данную ячейку. Таким образом, каждая из них взаимодействует со своими ближайшими четырьмя соседями, как показано на рис. 1.

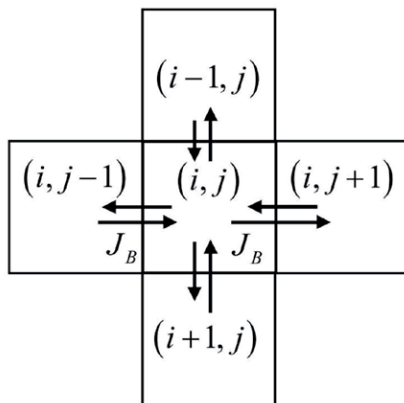


Рис. 1. Диффузионные потоки для  $(i, j)$ -ой мезоскопической ячейки

На основе второго закона Фика получим:

$$\begin{aligned} \frac{\partial c_B}{\partial t} &= -\nabla J_B = -\left(\frac{\partial J_B}{\partial x} + \frac{\partial J_B}{\partial y}\right) = \\ &= -\left(\frac{J_B^{(i,j) \rightarrow (i,j+1)} - J_B^{(i,j-1) \rightarrow (i,j)}}{h} + \frac{J_B^{(i,j) \rightarrow (i-1,j)} - J_B^{(i+1,j) \rightarrow (i,j)}}{h}\right) = \\ &= -\left(\frac{J_B^{(i,j) \rightarrow (i,j+1)} + J_B^{(i,j) \rightarrow (i,j-1)} + J_B^{(i,j) \rightarrow (i-1,j)} + J_B^{(i,j) \rightarrow (i+1,j)}}{h}\right), \end{aligned} \quad (1)$$

где  $c_B$  — концентрация компонента  $B$  (моль  $\cdot$  м $^{-3}$ ),  $J_B^{(i,j) \rightarrow (i\pm 1, j\pm 1)}$  — поток атомов сорта  $B$  из ячейки  $(i, j)$  в одну из четырех соседних ячеек (моль  $\cdot$  м $^{-2} \cdot$  с $^{-1}$ ),  $h$  — линейный размер ячейки (м).

Результирующий поток атомов сорта  $B$  при взаимной диффузии для одномерного случая определяется соотношением:

$$J_B = -\tilde{D} \frac{\partial c_B}{\partial x}, \quad (2)$$

где  $\tilde{D}$  — коэффициент взаимной диффузии (м $^2 \cdot$  с $^{-1}$ ). Парциальные мольные объемы компонентов бинарной системы связаны соотношением:

$$V_m = \Omega_A N_A + \Omega_B N_B, \quad (3)$$

где  $V_m$  — мольный объем (м $^3 \cdot$  моль $^{-1}$ ),  $N_i$  — мольная доля компонента  $i$  ( $0 \leq N_i \leq 1, N_A + N_B = 1$ ),  $\Omega_i = \frac{\partial V_m}{\partial N_i}$  — парциальный мольный объем  $i$ -го компонента (м $^3 \cdot$  моль $^{-1}$ ).

Далее преобразуем уравнение (2), описывающее диффузионный поток, учитывая соотношение (3).

$$\begin{aligned} J_B &= -\tilde{D} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{N_B}{V_m}\right) = -\tilde{D} \frac{1}{V_m^2} \left(\frac{\partial N_B}{\partial x} V_m - N_B \frac{\partial V_m}{\partial x}\right) = \\ &= -\tilde{D} \frac{1}{V_m^2} \left(\frac{\partial N_B}{\partial x} V_m - N_B (\Omega_B - \Omega_A) \frac{\partial N_B}{\partial x}\right) = \\ &= -\tilde{D} \frac{1}{V_m^2} \frac{\partial N_B}{\partial x} (N_A \Omega_A + N_B \Omega_B - N_B \Omega_B + N_B \Omega_A) = \\ &= -\tilde{D} \frac{\Omega_A}{V_m^2} \frac{\partial N_B}{\partial x}. \end{aligned} \quad (4)$$

Подставим выражение для результирующего потока из (4) в уравнение (1), учитывая, что  $\frac{\partial c_B}{\partial t} = \frac{\Omega_A}{V_m^2} \frac{\partial N_B}{\partial t}$ , получим:

$$\begin{aligned} \frac{\partial N_B}{\partial t} &= -\frac{1}{h} \left( -\tilde{D}^{(i,j) \rightarrow (i,j+1)} \cdot \frac{\partial N_B}{\partial x} \Big|_{(i,j) \rightarrow (i,j+1)} - \right. \\ &\quad \left. -\tilde{D}^{(i,j) \rightarrow (i,j-1)} \cdot \frac{\partial N_B}{\partial x} \Big|_{(i,j) \rightarrow (i,j-1)} - \tilde{D}^{(i,j) \rightarrow (i+1,j)} \cdot \frac{\partial N_B}{\partial y} \Big|_{(i,j) \rightarrow (i+1,j)} - \right. \\ &\quad \left. -\tilde{D}^{(i,j) \rightarrow (i-1,j)} \cdot \frac{\partial N_B}{\partial y} \Big|_{(i,j) \rightarrow (i-1,j)} \right), \end{aligned} \quad (5)$$

где градиенты концентрации на границе между ячейками  $(i, j)$  и  $(i\pm 1, j\pm 1)$ :

$$\frac{\partial N_B}{\partial x} \Big|_{(i,j) \rightarrow (i,j\pm 1)}, \quad \frac{\partial N_B}{\partial y} \Big|_{(i,j) \rightarrow (i\pm 1,j)}$$

Моделируемый диффузионный образец разбит на  $M^2$  квадратных ячеек. Каждая  $(i, j)$ -ая ячейка ( $i = \overline{1, M}$ ,

$j = \overline{1, M}$ ) характеризуется значением концентрации и принадлежностью к фазе. Каждая фаза существует в определенном концентрационном диапазоне, и характеризуется коэффициентом взаимной диффузии и значением парциальных мольных объемов.

Уравнение (5) позволяет найти изменение концентрации каждой мезоскопической ячейки. Возможность изменения ее фазового состояния определим следующим образом. Если в процессе диффузионного взаимодействия значение концентрации в некоторой ячейке попадает в диапазон концентрации, характерный для другой фазы, то фазовая принадлежность ячейки меняется. Если значение концентрации данной ячейки не принадлежит ни к одной из фаз, то принадлежность данной ячейки к фазе будет определена стохастически. Для двухфазной системы с  $\alpha$ -фазой ( $N_L^\alpha \leq N_B \leq N_R^\alpha$ ) и  $\beta$ -фазой ( $N_L^\beta \leq N_B \leq N_R^\beta$ ) такая ситуация происходит, когда полученная концентрация принадлежит промежуточной  $N_R^\alpha < N_B < N_L^\beta$ . В этом случае генерируется случайное число  $q \in [0, 1)$ . Если  $q < \frac{N_B - N_R^\alpha}{N_L^\beta - N_R^\alpha}$ , то данную ячейку

определяем к  $\beta$ -фазе, в противном случае — к  $\alpha$ -фазе.

Изменение фазовой принадлежности ячеек в данной модели обеспечивает возможность движения межфазной границы. До первого пересыщения задача остается одномерной, а далее граница размывается за счет двух факторов: во-первых, она становится не плоской; во-вторых появляются изолированные островки  $\alpha$ -фазы в  $\beta$ -фазе и наоборот.

Значение концентрации на новом  $(m + 1)$ -ом временном слое в каждой мезоскопической ячейке находим из следующего конечно-разностного уравнения:

$$N_{i,j}^{m+1} = N_{i,j}^m + \frac{\tau}{h^2} \left( \tilde{D}^{(i,j) \rightarrow (i,j+1)} \cdot (N_{i,j+1}^m - N_{i,j}^m) + \tilde{D}^{(i,j) \rightarrow (i,j-1)} \cdot (N_{i,j-1}^m - N_{i,j}^m) + \tilde{D}^{(i,j) \rightarrow (i+1,j)} \cdot (N_{i+1,j}^m - N_{i,j}^m) + \tilde{D}^{(i,j) \rightarrow (i-1,j)} \cdot (N_{i-1,j}^m - N_{i,j}^m) \right) \quad (6)$$

Коэффициенты взаимной диффузии  $\tilde{D}^{(i,j) \rightarrow (i\pm 1, j\pm 1)}$  вычислялись как среднее арифметическое значений коэффициентов диффузии в  $(i, j)$ -ой ячейке и соответствующей соседней ячейке, при этом  $\tilde{D} = \frac{\Omega_A}{V_m} N_A D_B + \frac{\Omega_B}{V_m} N_B D_A$  ( $D_A$  и  $D_B$  — собственные коэффициенты диффузии соответствующего компонента).

На границах образца обеспечивалось выполнение периодических граничных условий.

Корректность вычислительной схемы проверялась выполнением закона сохранения вещества в системе.

### 5. Результаты компьютерного моделирования и обсуждение

Проведем сопоставление результатов компьютерного моделирования с результатами лабораторных экспериментов межфазного взаимодействия в бинарном металлическом сплаве Mg-Al.

В работах [9–11] представлены результаты диффузионного отжига пары Mg-Al при температуре 300 °С, 350 °С и 400 °С, где на границе контакта металлов формируются и растут две промежуточные фазы  $\gamma$ -Mg<sub>17</sub>Al<sub>12</sub> и  $\beta$ -Mg<sub>2</sub>Al<sub>3</sub>. В вычислительных экспериментах использовались данные, приведенные в табл. 1. Значение  $\tilde{D}^*$  — усредненное значение коэффициента взаимной диффузии, полученное при моделировании.

Таблица 1

Физические параметры бинарного сплава Mg-Al при температуре 350 °С

Фаза	$\tilde{D}$ [10], (м <sup>2</sup> ·с <sup>-1</sup> )	$\tilde{D}^*$ , (м <sup>2</sup> ·с <sup>-1</sup> )	Значение концентрации на границах фазы	
Al	2,4·10 <sup>-17</sup>	2,42·10 <sup>-17</sup>	1,00	0,90
$\beta$ -Mg <sub>2</sub> Al <sub>3</sub>	1,8·10 <sup>-14</sup>	1,82·10 <sup>-14</sup>	0,64	0,57
$\gamma$ -Mg <sub>17</sub> Al <sub>12</sub>	1,7·10 <sup>-15</sup>	1,72·10 <sup>-15</sup>	0,48	0,40
Mg	8,0·10 <sup>-18</sup>	2,28·10 <sup>-18</sup>	0,00	0,01

Рис. 2, 3 позволяют сравнить результаты лабораторных и вычислительных экспериментов. Наблюдается качественное совпадение полученных результатов, что свидетельствует об адекватности разработанной модели и ее компьютерной реализации, а также о возможности применения данной модели для исследования процессов межфазного взаимодействия в диффузионной зоне металлических сплавов.

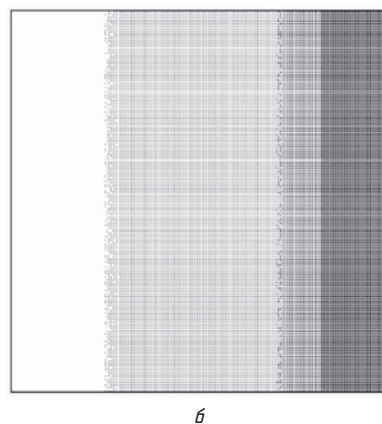
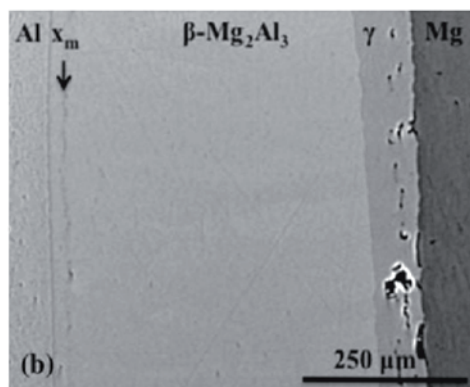


Рис. 2. Диффузионная зона системы Mg-Al: а — снимок из [10]; б — результаты вычислительных экспериментов

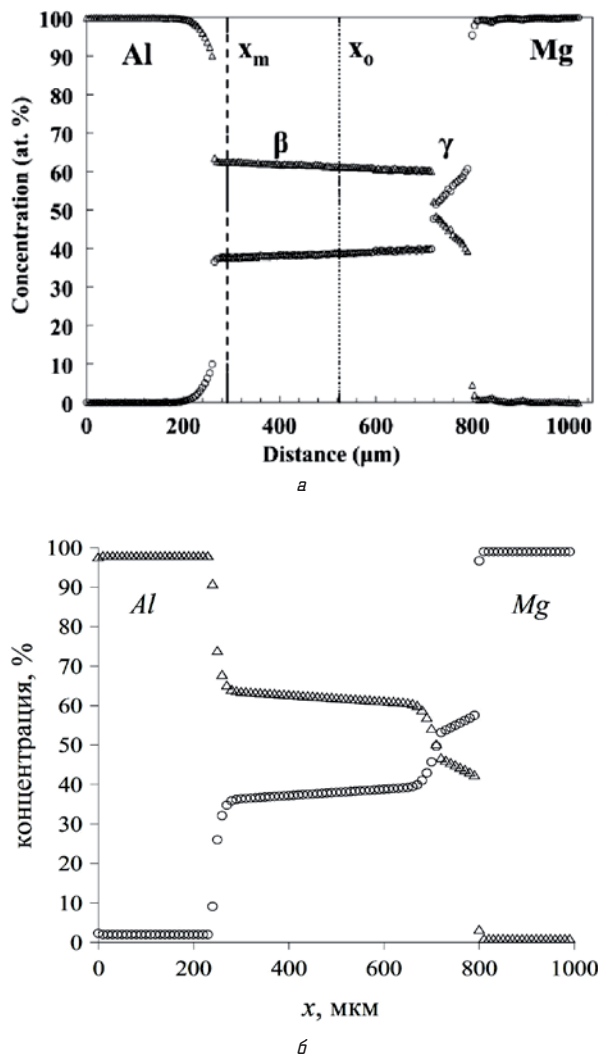


Рис. 3. Концентрационный профиль в системе Mg-Al: а — результаты из [10]; б — результаты вычислительных экспериментов

При этом могут быть рассмотрены системы, в которых фазы имеют вид включений произвольной формы. Ограничением формы являются конечные размеры мезоскопических ячеек.

Следует отметить, что предложенная мезоскопическая модель диффузионного роста промежуточных фаз позволяет вычислять изменение объема моделируемого образца и может быть обобщена на трехмерный случай и произвольное количество фаз.

## 6. Выводы

В данной работе предложена двумерная мезоскопическая модель межфазного взаимодействия в металлическом сплаве с учетом парциальных мольных объемов компонентов и выполнена ее программная реализация. Полученная компьютерная модель позволяет численно исследовать процессы роста интерметаллических фаз различной формы в диффузионной зоне, которые образуются при металлизации, закалке, отжиге и в процессе эксплуатации металлопродукции.

Проведено компьютерное моделирование межфазного взаимодействия в сплаве Mg-Al в процессе диффузионного отжига при температуре 350 °C.

## Литература

1. Запорожець, Т. В. Комп'ютерна модель для мезоскопічного опису фазоутворення у багатошарових наноплівках [Текст] / Т. В. Запорожець, С. А. Полосухіна // Вісник Черкаського університету. Серія «Фізико-математичні науки». — 2009. — № 171. — С. 28–40.
2. Сторожук, Н. В. Мезоскопічна модель утворення та конкуренції фаз при взаємній дифузії [Текст] / Н. В. Сторожук // Вісник Черкаського університету. Серія «Фізико-математичні науки». — 2012. — № 205. — С. 100–110.
3. Ляшенко, Ю. А. Компьютерное моделирование образования и роста двухфазных зон при изотермической диффузии в тройных системах [Текст] / Ю. А. Ляшенко, Т. П. Муковоз // Металлофизика и новейшие технологии. — 1994. — Т. 16, № 6. — С. 23–27.
4. Sauer, F. Diffusion in binären Gemischen mit Volumenänderung [Text] / F. Sauer, V. Freise // Zeitschrift für Elektrochemie, Berichte der Bunsengesellschaft für physikalische Chemie. — 1962. — Vol. 66, № 4. — P. 353–362. doi:10.1002/bbpc.19620660412
5. Tsuji, S. Multiphase binary diffusion in infinite and semi-infinite media: Part I. On the determination of interdiffusion coefficients [Text] / S. Tsuji // Metallurgical and Materials Transactions A. — 1994. — Vol. 25, № 4. — P. 741–751. doi:10.1007/bf02665451
6. Paul, A. Intermetallic growth and Kirkendall effect manifestations in Cu/Sn and Au/Sn diffusion couples [Text] / A. Paul, A. A. Kodentsov, F. J. J. van Loo // Zeitschrift für Metallkunde. — 2004. — Vol. 95, № 10. — P. 913–920. doi:10.3139/146.018032
7. Boettinger, W. J. Computation of the Kirkendall velocity and displacement fields in a one-dimensional binary diffusion couple with a moving interface [Text] / W. J. Boettinger, J. E. Guyer, C. E. Campbell, G. B. McFadden // Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences. — 2007. — Vol. 463, № 2088. — P. 3347–3373. doi:10.1098/rspa.2007.1904
8. Богатырев, А. О. Математическая модель межфазного взаимодействия в бинарной металлической системе [Текст] / А. О. Богатырев, Н. А. Красношлык // Электронное моделирование. — 2012. — Т. 34, № 5. — С. 13–27.
9. Красношлык, Н. А. Численное исследование диффузионной конкуренции фаз на основе квазидвумерной модели [Текст] / Н. А. Красношлык, А. О. Богатырев // Вісник Національного технічного університету «Харківський політехнічний інститут». Сер.: Інформатика і моделювання. — 2012. — № 62 (968). — С. 113–120.
10. Brennan, S. Interdiffusion in the Mg-Al System and Intrinsic Diffusion in  $\beta$ -Mg<sub>2</sub>Al<sub>3</sub> [Text] / S. Brennan, K. Bermudez, N. S. Kulkarni, Y. Sohn // Metall and Mat Trans A. — 2012. — Vol. 43, № 11. — P. 4043–4052. doi:10.1007/s11661-012-1248-8
11. Brennan, S. T. Impurity and interdiffusion in the magnesium-aluminum system [Text]: A thesis submitted in partial fulfillment of the requirements for the degree of Master of Science / S. T. Brennan. — Orlando, Florida, 2011. — 106 p.

## КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ МІЖФАЗОВОЇ ВЗАЄМОДІЇ У МЕТАЛЕВИХ СПЛАВАХ

У роботі запропоновано двовимірну мезоскопічну модель міжфазової взаємодії у бінарних металевих сплавах. Описано основні етапи побудови даної моделі та здійснено її програмну реалізацію. Отримана комп'ютерна модель дозволяє проводити чисельні дослідження еволюції фазового складу сплаву в процесі дифузійної взаємодії.

**Ключові слова:** комп'ютерне моделювання, мезоскопічна модель, міжфазова взаємодія, інтерметалічна фаза.

*Красношлык Наталья Александровна, кандидат технических наук, доцент, кафедра прикладной математики и информатики, Черкасский национальный университет им. Богдана Хмельницкого, Украина, e-mail: wlik007@ukr.net.*

*Красношлык Наталья Олександрівна, кандидат технічних наук, доцент, кафедра прикладної математики та інформатики, Черкаський національний університет ім. Богдана Хмельницького, Україна.*

*Krasnoslyk Natalia, Bohdan Khmelnytsky National University of Cherkasy, Ukraine, e-mail: wlik007@ukr.net*