

## СТРУКТУРА, ФАЗОВЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ И ДИФфуЗИЯ

УДК 519.6:621.7.07+669

### ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ФОРМИРОВАНИЯ СТРУКТУРЫ И КРИСТАЛЛИЗАЦИИ ВСПЕНЕННОГО АЛЮМИНИЯ, МОДИФИЦИРОВАННОГО НАНОРАЗМЕРНЫМИ ЧАСТИЦАМИ

© 2024 г. В. Н. Попов<sup>a</sup>\*, А. Н. Черепанов<sup>a</sup>

<sup>a</sup>Институт теоретической и прикладной механики им. С.А. Христиановича СО РАН,  
ул. Институтская, 4/1, Новосибирск, 630090 Россия

\*e-mail: popov@itam.nsc.ru

Поступила в редакцию 14.07.2024 г.

После доработки 15.08.2024 г.

Принята к публикации 18.08.2024 г.

Предложена математическая модель кристаллизации вспененного расплава алюминия (Al–Si), содержащего модифицирующие наноразмерные частицы, который охлаждается при заданных условиях теплосъема. Используя модель роста газовых пузырьков в расплаве алюминия, проведен численный анализ динамики формирования вспененных металлов и определены размеры сферических пор. Границы ячеек, окружающих пузырьки, определены согласно представленным в литературных источниках экспериментальным данным. На основе разработанной модели показано, что внесение в расплав наноразмерных тугоплавких частиц в качестве модифицирующих добавок приводит к измельчению кристаллической структуры и может способствовать повышению механических свойства затвердевшего металла.

**Ключевые слова:** численное моделирование, вспененный алюминий, гидрид водорода, пористость, модифицирующие наночастицы, кристаллизация

**DOI:** 10.31857/S0015323024120157, **EDN:** IHWKIK

#### ВВЕДЕНИЕ

Вспененные металлы или сплавы широко применяются в авиационной, космической, строительной, автомобильной и других отраслях. Этому способствует сочетание низкой плотности материала, эффективное соотношение жесткости и веса, хорошее поглощение энергии и способность гашения вибрации. Наиболее значимые результаты были получены при практическом применении пеноматериалов на основе сплавов алюминия. Для вспенивания металла обычно используется гидрид титана ( $TiH_2$ ), характеризующийся высоким удельным содержанием водорода [1–4].

Исследование и анализ процессов формирования ячеистой структуры имеет важное значение, поскольку она во многом определяет физические и механические свойства вспененного металла. При этом представляет интерес влияние модифицирования расплава на структуру и прочностные свойства пены затвердевшего металла, показавшее свою эффективность при литье металлов и сплавов [5–7]. Наличие нано-

размерных тугоплавких частиц в расплавленном металле способствует гетерогенному зародышеобразованию [8–11] и увеличению количества центров кристаллизации и, как следствие, повышению эксплуатационных свойств металлов [12–14]. Существуют публикации, посвященные численному моделированию кристаллизации для оценки сформировавшейся структуры затвердевших модифицированных сплавов [15, 16].

Цель настоящего исследования — построение математической модели и численный анализ роста зародившихся в расплаве газовых пузырей, оценка влияния наноразмерных тугоплавких частиц и интенсивности охлаждения расплава на формирование структуры затвердевшего вспененного алюминия.

#### МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ

Из-за сложности моделирования рассматривается упрощенная физическая модель, сохраняющая основные особенности реального процесса. Предполагается, что все количество водорода, необходимое для обеспечения наблю-

даемого уровня расширения, было растворено в расплаве под внешним давлением  $P_0$ . Водород, полученный в результате разложения гидрида титана ( $TiH_2$ ), введенного в расплав алюминия, мгновенно в нем растворяется. Процесс пенообразования, охлаждения и кристаллизации газосодержащего расплава алюминия происходит в цилиндрическом тигле с внутренним радиусом  $r_0$ , который подвергается внешнему охлаждению с заданной интенсивностью. В расплаве происходит одновременное зарождение и последующий рост пузырьков, вокруг которых формируется диффузионный слой. Последующего зарождения новых пузырьков не происходит. Используется модель роста пузыря, описанная в [17–20].

Предполагается, что пузыри имеют сферическую форму, на их поверхности выполняется термодинамическое равновесие, описываемое законом Генри, и расплав является несжимаемой ньютоновской жидкостью. Кристаллизация и структура металла не зависят от концентрации растворенного газа. При реализации модели решаются уравнения импульса, интегрального баланса массы по пузырю и дифференциального баланса массы в окружающем расплаве.

Считаем, что расплав алюминия (Al–Si) до возникновения в нем пузырьков модифицирован плакированными тугоплавкими наноразмерными частицами  $TiN$  в количестве  $m_p = 0.05\%$  по массе. Частицы являются хорошо смачиваемыми и на зародышеобразование газовых пузырьков не влияют. Образование зародышей кристаллов происходит на поверхностях частиц, так как затраты энергии в этом случае меньше, чем при гомогенном зародышеобразовании [21, 22]. Поверхности зародышей, граничащих с расплавом, считаем сферическими. Для упрощения расчетов полагаем, что теплофизические параметры постоянные, равные их средним значениям в рассматриваемом интервале температур, и не зависят от наличия модифицирующих частиц ввиду их малого объема. Движение жидкости учитывается вводом поправочного коэффициента в теплопроводность жидкой фазы. Параметры газожидкостной среды определяются как среднемассовые величины.

Полагаем, что образовавшиеся пузырьки равномерно распределены по всему объему расплава. Таким образом, задача сводится к рассмотрению роста отдельного пузырька в ячейке с заданным радиусом  $R_c$  (рис. 1). Значение  $R_c$ , зависящее от исходного пресыщения расплава газом (водородом), задается согласно экспериментальным данным работы [17].

В рамках модели процесс роста пузыря описывается уравнениями импульса, интегрального

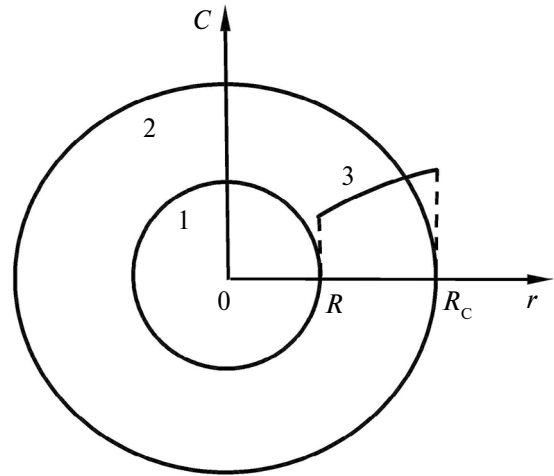


Рис. 1. Схема роста пузырька (1) в ячейке (2).  $R$  — радиус пузырька,  $R_c$  — радиус ячейки, 3 — изменение концентрации растворенного газа  $C$  в диффузионной зоне.

баланса массы по пузырю и дифференциального баланса массы в окружающем расплаве [17–20]. Таким образом, при  $t \geq 0$  на основе баланса массы и импульса скорость роста пузырька выражается как функция давления газа в пузырьке  $P(t)$  и его радиуса  $R(t)$ :

$$\frac{dR}{dt} = \frac{1}{2\mu} \left[ \frac{P(t) - P_a}{2} R(t) - \sigma \right], \quad (1)$$

где  $\mu$  — вязкость расплава,  $\sigma$  — поверхностное натяжение на границе газ-расплав,  $P_a$  — давление окружающей среды,  $t$  — время.

Распределение концентрации в диффузионной зоне определяется уравнением:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{dR}{dt} \frac{R^2}{r^2} \frac{\partial C}{\partial r} = \frac{D_H}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial C}{\partial r}, \quad R(t) \leq r \leq R_c. \quad (2)$$

Здесь  $C$  — концентрация растворенного водорода в расплаве,  $D_H$  — коэффициент диффузии водорода.

На поверхности пузырька выполняются условие сохранения массы диффундирующего газа:

$$\frac{\partial M}{\partial t} = 4\pi R^2 D_H \left. \frac{\partial C}{\partial r} \right|_{r=R(t)} \quad (3)$$

и условие равновесия, записываемое в форме закона Генри:

$$C_B = K_H P(t). \quad (4)$$

Здесь  $M = 4\pi R^3 P(t) / (3R_g T)$  — масса газа в объеме пузырька,  $R_g$  — универсальная газовая постоянная,  $C_B = C$  при  $r = R(t)$ ,  $T$  — температура

расплава. С учетом выражения для величины  $M$  и уравнения (4) условие (3) примет вид:

$$\frac{d(R^3 C_B / \bar{T})}{dt} = 3R_g T_0 K_H R^2 D_H \left. \frac{\partial C}{\partial r} \right|_{r=R(t)}, \quad (5)$$

где  $\bar{T} = T/T_0$ ,  $T_0$  — начальная температура расплава.

На границе смыкания ячеек ( $r=R_c$ ) выполняется условие симметрии:

$$\left. \frac{\partial C}{\partial r} \right|_{r=R_c} = 0. \quad (6)$$

Рост пузырька продолжается до тех пор, пока не выполнится условие при  $t=t_e$ :

$$P(t_e) = P_a + \frac{2\sigma}{R(t_e)}, \quad (7)$$

при котором  $dR(t_e)/dt = 0$ . Соотношение (7) определяет конечный размер пузырька  $R(t_e)$ .

Выражение для относительной пористости в расплаве удет иметь вид:

$$\Pi = \frac{R^3}{R_c^3}.$$

Начальные условия для (1)–(6) следующие:

$$P(0)=P_0, C(r,0)=C_B(0)=K_H P_0=C_0;$$

$$R(0) \leq R_c, R(0)=R_0, R_0=1.01 R_{cr},$$

где  $R_{cr}$  — критический радиус пузырька,  $R_{cr} = 2\sigma/(P_0 - P_a)$ .

С учетом принятых выше допущений уравнение теплопереноса в вспененном расплаве запишем в виде:

$$\bar{c} \bar{\rho} \frac{dT}{dt} = -\frac{2}{r_0} (T - T_c) + \bar{\rho} L \frac{df_s}{dt}, T_E \leq T \leq T_0, \quad (8)$$

где  $\bar{c} = c_i \Pi + c_2(1 - \Pi)$ ,  $\bar{\rho} = \rho_2(1 - \Pi)$ ,  $c_i$  — удельная теплоемкость,  $\rho_i$  — плотность,  $\Pi$  — доля газовой фазы (пористость,  $0 \leq \Pi \leq 1$ ),  $T_c$  — температура окружающей среды,  $L$  — удельная теплота плавления,  $\alpha$  — коэффициент теплообмена,  $f_s$  — объемная доля твердой фазы в расплаве ( $0 \leq f_s \leq 1$ ,  $f_s = 0$  при  $T \geq T_0$ ),  $T_0$ ,  $T_E$  — температуры ликвидуса и эвтектики. Индексы  $i=1$  для газа (водорода) и  $i=2$  для сплава. Начальное условие для (8):  $T(0)=T_0$ .

В расплавленный металл внесены смачиваемые тугоплавкие наноразмерные частицы. Из работ [21, 22] следует, что условий для гомогенного зародышеобразования в объеме расплава практически не наблюдается, а следовательно, происходит образование зародышей кристаллической фазы на поверхностях частиц, находящихся в переохлажденном расплаве. Согласно [15, 21] и предполагая, что частицы имеют фор-

му куба, грани которого характеризуются углом смачивания  $\theta$ , скорость образования зародышей кристаллов сплава определяется формулой:

$$I = n_s \frac{k_B T}{h} \exp\{-(E + \Delta G^*) / (k_B T)\}, \quad (9)$$

где  $n_s = 6n_p l_p^2 / l_a^2$  — количество атомов в единице объема расплава, прикасающихся к поверхностям наноразмерных частиц,  $n_p = m_p \rho_2 / (100 \rho_p l_p^3)$ ,  $\rho_p$  — плотность вещества частицы,  $l_p$  — длина ребра частицы,  $l_a$  — межатомное расстояние в расплаве,  $h$  — постоянная Планка,  $k_B$  — константа Больцмана,  $E$  — энергия активации процесса диффузии в расплаве,  $\Delta G^*$  — энергия Гиббса критического зародыша:

$$\Delta G^* = \pi \sigma_s \eta^2 (1 - \cos \theta)^2 (2 + \cos \theta) / 3,$$

$\eta = 2\sigma_s T_0 / (L \rho_2 \Delta T)$ ,  $T_0$  — исходная температура ликвидуса,  $\sigma_s$  — поверхностное натяжение на границе жидкой и твердой фаз алюминия,  $\Delta T = T_l - T$ ,  $T_l$  — текущая температура ликвидуса.

Доля растущей твердой фазы  $f_s$ , при охлаждении жидкого металла после времени  $t_0$ , когда температура достигла  $T_0$ , описывается подобно [23]:

$$f_s(t) = 1 - \exp\left\{-\int_{t_0}^t N(\tau) V_s(\tau) d\tau\right\},$$

$$V_s(t) = (4\pi / 3)(R_s^3 - R_{s0}^3), \quad (10)$$

где  $V_s$  — объем твердой фазы, образовавшейся на наноразмерной частице. Число центров кристаллизации  $\alpha$ -фазы, образовавшихся при за-  
твердевании сплава:

$$N(t) = \int_{t_0}^t I(\tau)(1 - \Pi)[1 - f_s(\tau)] d\tau. \quad (11)$$

Предполагая, что рост кристаллической фазы подчиняется нормальному механизму и определяется линейной зависимостью скорости роста от переохлаждения  $\partial R_s / \partial t = K_v \Delta T$  [11], где  $K_v$  — кинетическая константа,  $R_s$  — радиус кристал-

ла,  $R_s(t) = R_{s0} + \int_{t_0}^t K_v \Delta T d\tau$ ,  $R_{s0} = (1.5/\pi)^{1/2} l_p$  — радиус сферической частицы, имеющей площадь поверхности, равную поверхности кубической частицы.

Для оценки кинетической константы  $K_v$  используется формула [24]:

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

где  $\Delta H_\alpha$  — энтальпия плавления в расчете на один атом,  $D = D_0 \exp\{-E / (k_B T)\}$  — коэффициент диффузии Si в сплаве Al–Si при температуре плавления,  $\Delta T = T_A - \beta C_0^{\text{Si}} / (1 - f_s)^{1-k} - T$  —

переохлаждение,  $T_A$  — температура плавления алюминия,  $\beta$  — угол наклона линии ликвидуса на диаграмме состояния системы Al–Si,  $C_0^{\text{Si}}$  — исходная концентрация легирующего компонента,  $k$  — коэффициент распределения.

Рост твердой фазы алюминия происходит в температурном интервале  $T_0 \geq T \geq T_E$ , где  $T_0 = T_A - \beta C_0^{\text{Si}}$ ,  $T_E$  — температура эвтектики. Полагая, что при  $T = T_E$  доля твердой фазы равна  $f_{\text{SE}}$ .

Характерный размер первичного зерна  $\alpha$ -фазы, согласно [25], оценим по формуле:

$$d = (\sqrt{2}/N)^{1/3}.$$

Исходные данные для тигля и сплава Al + 6.5%Si [15, 17, 26–28]:  $T_0 = 973$  К,  $T_A = 933$  К,  $T_0 = 886.85$  К,  $T_E = 850$  К,  $\rho_1 = 0.0244$  кг/м<sup>3</sup>,  $k = 0.14$ ,  $\rho_2 = 2340$  кг/м<sup>3</sup>,  $c_1 = 1.493 \times 10^4$  Дж/(кг·К),  $\beta = 7.1$  К %,  $c_2 = 1090$  Дж/(кг·К),  $r_0 = 0.02$  м,  $D_H = 4.475 \times 10^{-8}$  м<sup>2</sup>/с,  $\sigma = 0.866$  Дж/м<sup>2</sup>,  $\mu = 1.5 \times 10^{-3}$  Н·с/м<sup>2</sup>,  $E = 4.2 \cdot 10^{-20}$  Дж,  $L = 3.9 \times 10^5$  Дж/кг,  $K_H = 1.41 \times 10^{-5}$  моль/(Н·м),  $D_0 = 10^{-7}$  м<sup>2</sup>/с,  $\sigma_s = 0.093$  Дж/м<sup>2</sup>,  $\Delta H_\alpha = 1.75 \times 10^{-20}$  Дж,  $k_B = 1.38 \times 10^{-23}$  Дж/К,  $l_p = 5 \times 10^{-8}$  м,  $K_v = 10^{-4}$  м/(с·К),  $m_p = 0.05$  % мас.,  $l_a = 2.86 \times 10^{-10}$  м,  $l_c = 4.235 \times 10^{-10}$  м,  $R_g = 8.31$  Дж/(моль·К),  $C_0^{\text{Si}} = 6.5$  мас.%,  $\rho_p = 5440$  кг/м<sup>3</sup>,  $P_a = 1.01 \times 10^5$  Н/м<sup>2</sup>,  $\theta = 5^\circ$ ,  $\alpha = 200$  Вт/(м·К),  $400$  Вт/(м·К). В таблице приводятся данные для концентрации растворенного водорода и параметров пузырьков [17].

Выбор алгоритма реализации описанной выше модели основывается на необходимости решать систему дифференциальных уравнений с малым параметром при старших производных [31]. Для численного решения уравнений (1)–(2), (4)–(6), с учетом условия (7), использован конечно разностный алгоритм. Систему уравнений строили путем неявной аппроксимации балансных соотношений, полученных интегрированием (2) с учетом граничных условий (4)–(6). Шаг по времени использовали переменный. Изменение температуры определяли согласно (8). При охлаждении расплава ниже температуры  $T_0$  скорость зародышеобразования и количество кристаллов в единице объема затвердевшего металла рассчитывали с использованием формул (9)–(11). Расчеты продолжали до момента выполнения условия  $T = T_E$ .

## РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТОВ

Проведено численное исследование динамики роста газовых пузырьков в расплавленном метал-

ле. Рассмотрено два варианта, представленных в таблице. Изменение радиуса газовых пузырьков при  $C_{\text{ТН}_2} = 1.5$  % и 0.5 % по массе иллюстрирует рис. 2.

Результаты расчетов иллюстрируют, что в случае  $C_{\text{ТН}_2} = 1.5$  % по массе критический радиус пузырька — 0.087 мкм, конечный радиус пузырька — 0.94 мкм, время роста составляет 9.4 мс. В случае  $C_{\text{ТН}_2} = 0.5$  % по массе критический радиус пузырька — 0.2 мкм, время роста пузырька — 6.5 мс, конечный радиус — 0.72 мкм. При  $t \geq 10^{-4}$  с, после того как диаметр пузырьков становится около 20 мкм, темп их роста фактически совпадает и дальнейшее увеличение происходит за счет диффузии газа из окружающего расплава. Это подтверждается результатами, представленными на рис. 3. Однако нужно отметить, что концентрация растворенного газа в расплаве оказывает влияние на время роста пузырьков и их окончательный размер за счет формирования ячеек различных размеров.

На рис. 3 отражена динамика изменения концентрации водорода и диффузионного потока на поверхности пузырьков в зависимости от ко-

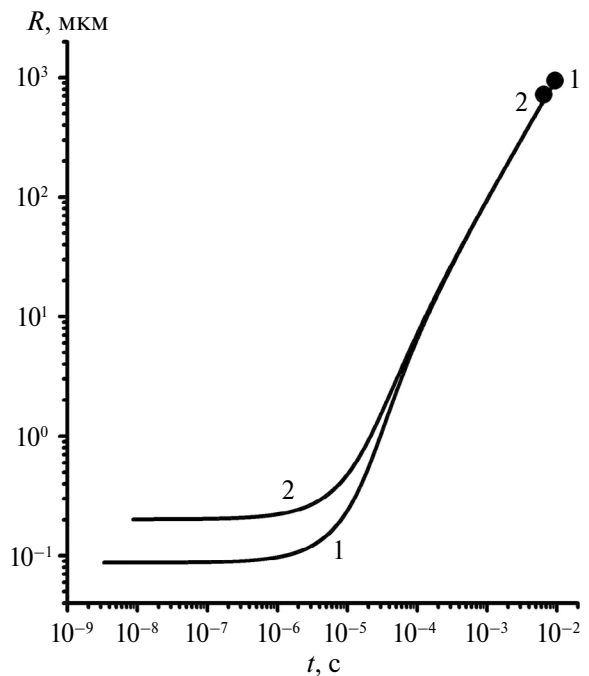
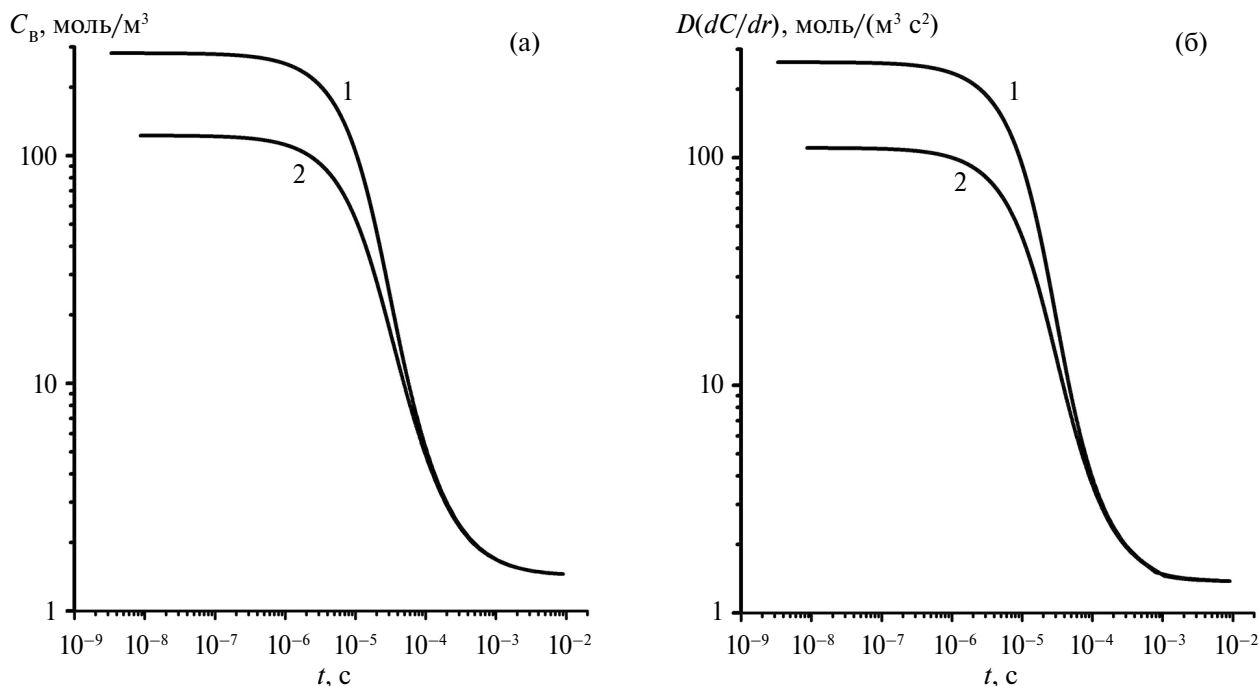


Рис. 2. Изменение радиуса газового пузырька до момента окончания роста (●) при  $C_{\text{ТН}_2} = 1.5$  мас.% (1) и  $C_{\text{ТН}_2} = 0.5$  мас.% (2).

Таблица 1. Концентрация растворенного водорода и параметры пузырьков по данным [17]

$C_{\text{ТН}_2}$ , мас. %	$P_0$ , $10^5$ , Н/м <sup>2</sup>	$C_0$ , моль/м <sup>3</sup>	Конечный радиус пузырька, эксп. $R(t_e)$ , $10^{-3}$ м	Радиус ячейки эксп. $R_e$ , $10^{-3}$ м
1.5	200	282	0.948	1.00
0.5	87	122.7	0.648	0.72



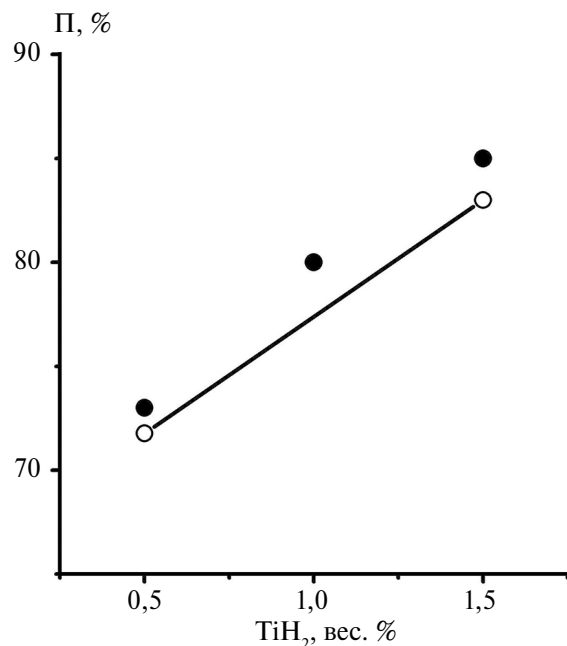
**Рис. 3.** Изменение концентрации водорода  $C_B$  (а) и диффузионного потока  $D(dC/dr)$  (б) на поверхности пузырька при  $C_{TiH_2} = 1.5$  масс.% (1) и  $C_{TiH_2} = 0.5$  мас.% (2).

личества растворенного газа в расплаве. Отметим, что в начальный промежуток времени до  $t=10^{-6}$  с концентрация на границе пузырьков  $C_B$  и давление в них почти не меняется, а величины диффузионных потоков сохраняются на высоком уровне. В этот период времени радиусы пузырьков близки к критическим радиусам  $R_{cr}$ . Существенные изменения величин  $D(dC/dr)$  и  $C_B$  происходят с началом быстрого увеличения размеров пузырьков в интервале времени от  $10^{-6}$  с до  $10^{-4}$  с. При  $t > 10^{-4}$  с изменения концентрации водорода и диффузионных потоков на поверхностях пузырьков фактически не зависят от начального насыщения расплава газом.

Из расчетов следует, что с ростом концентрации растворенного газа увеличивается пористость вспененного материала. Так при  $C_{TiH_2} = 0.5\%$  по массе пористость вспененного металла составляет 72%, а при  $C_{TiH_2} = 1.5\%$  по массе — 83%, что удовлетворительно согласуется с экспериментальными данными (рис. 4) [17].

Изменение температуры расплава в зависимости от содержания пенообразователя в расплаве и интенсивности теплосъема иллюстрирует рис. 5.

Из результатов расчетов, представленных на рис. 5, следует, что начальная температура расплава за время формирования пор фактически не меняется. В случае  $C_{TiH_2} = 1.5$  мас.% при  $\alpha = 400$  Вт/(м·К) перегрев расплавленного метал-



**Рис. 4.** Зависимость пористости  $P$  от количества введенного в расплав порошка  $TiH_2$ ; ● — эксперимент [17]; ○ — результаты расчетов.

ла снимается за 17.12 с и далее, через 0.06 с переохлаждение расплава достигает максимального значения 0.27 К (рис. 5а, рис. 6а). При переохлаждении  $0.15 \text{ К} \leq \Delta T \leq 0.27 \text{ К}$  происходит обра-

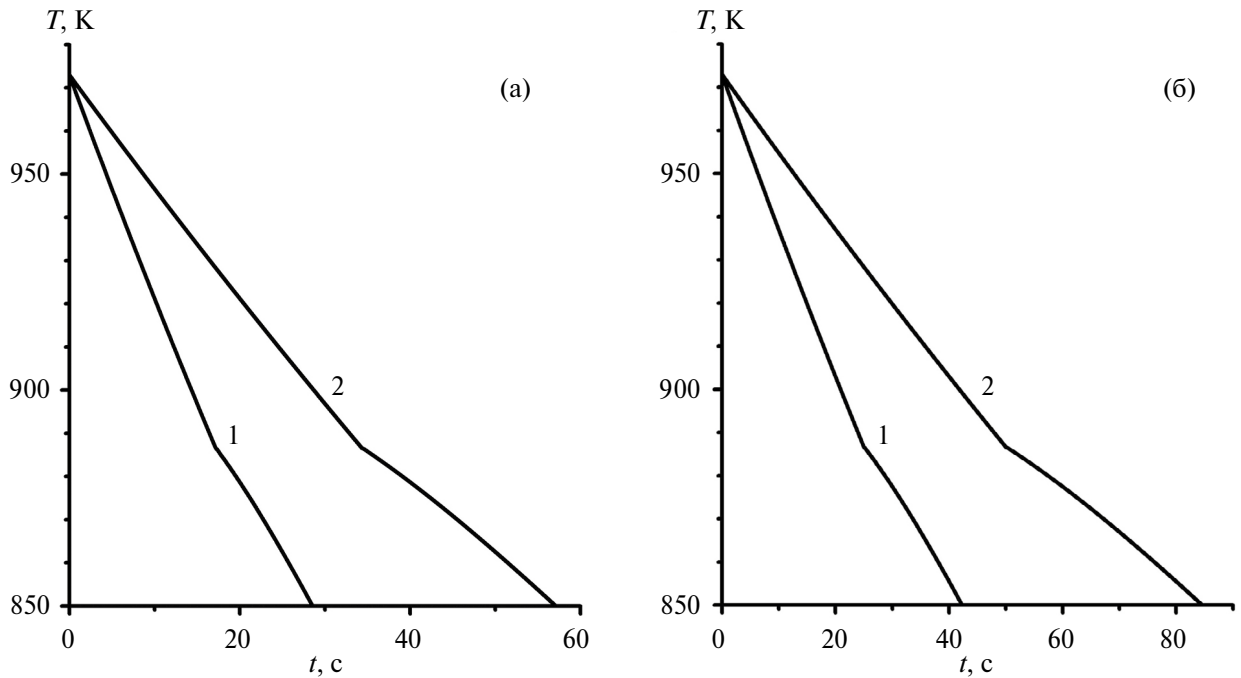


Рис. 5. Изменение температуры расплава при  $C_{TiH_2} = 1.5$  мас. % (а) и  $C_{TiH_2} = 0.5$  мас. % (б): (1)  $\alpha = 400$  Вт/(м·К), (2)  $\alpha = 200$  Вт/(м·К).

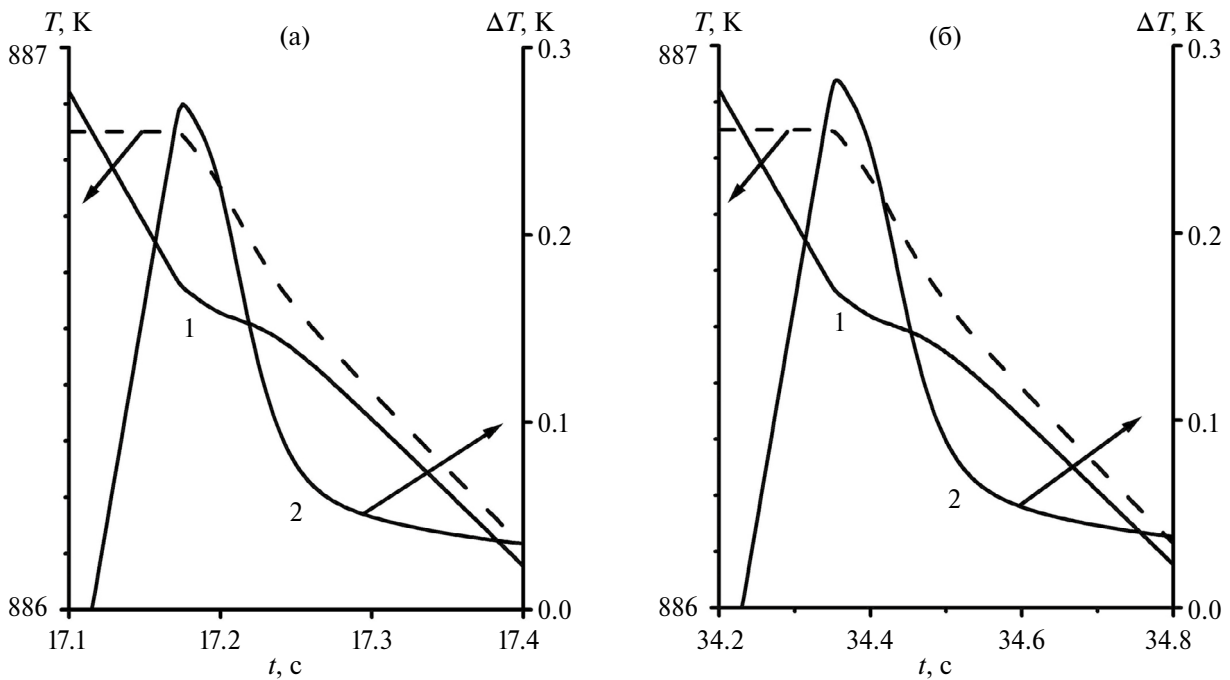
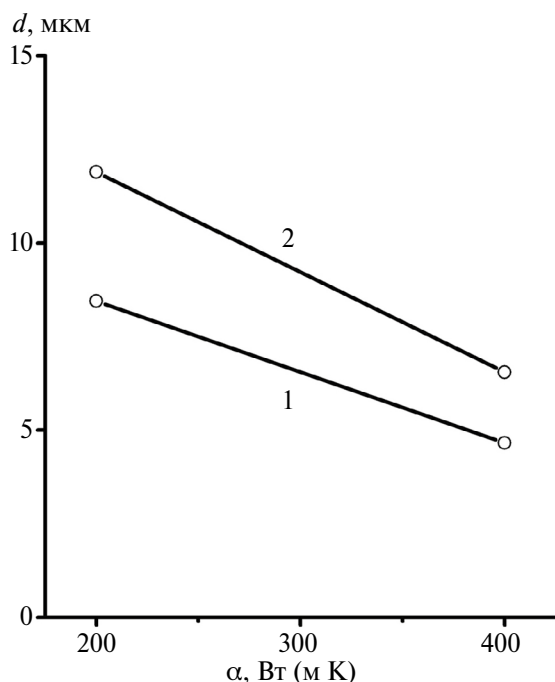


Рис. 6. Изменение температуры (1) и величины переохлаждения (2) расплава при  $C_{TiH_2} = 1.5$  мас. %, (а)  $\alpha = 400$  Вт/(м·К), (б)  $\alpha = 200$  Вт/(м·К). Штриховая линия — температура ликвидуса  $T_l$ .

зование зародышей кристаллов на поверхностях наноразмерных частиц. С ростом доли твердой фазы в расплаве выделяется тепло, что способствует уменьшению переохлаждения и прекращению зародышеобразования. За счет отвода тепла в окружающую среду происходит охлаж-

дение расплава, сопровождающееся увеличением в нем доли твердой фазы  $f_s$ . Металл до температуры эвтектики охлаждается за 28.6 с. При  $\alpha = 200$  Вт/(м·К) температура расплава снижается до  $T_0$  за 34.25 с (рис. 5а, рис. 6б). Далее расплав переохлаждается и через 0.1 с величина  $T_0 - T$  до-





**Рис. 7.** Влияние интенсивности теплоотвода  $\alpha$  на размер первичного зерна в затвердевшем металле после модифицирования при  $C_{\text{TiH}_2} = 1.5$  мас. % (1) и  $C_{\text{TiH}_2} = 0.5$  мас. % (2). о — результаты расчетов.

стигает 0.28 К. Образование зародышей происходит при переохлаждении  $0.15 \text{ К} \leq \Delta T \leq 0.28 \text{ К}$ . С появлением твердой фазы в расплаве выделяется тепло, переохлаждение уменьшается и новые зародыши прекращают появляться. Дальнейшее охлаждение расплава с увеличением в нем доли твердой фазы происходит за счет отвода тепла в окружающую среду. Расплав до температуры эвтектики охлаждается за 57 с.

В случае  $C_{\text{TiH}_2} = 0.5$  мас. % (рис. 5б) при  $\alpha = 400 \text{ Вт/(м·К)}$  перегрев расплавленного металла снимается за 24.95 с, через 0.07 с переохлаждение расплава достигает максимального значения 0.29 К, происходит зародышеобразование кристаллов, растет доля твердой фазы.

Металл до температуры эвтектики охлаждается за 42.3 с. При  $\alpha = 200 \text{ Вт/(м·К)}$  перегрев расплавленного металла снимается за 49.9 с, через 0,1 с переохлаждение расплава достигает максимального значения 0.27 К, происходит зародышеобразование кристаллов, растет доля твердой фазы. Металл до температуры эвтектики охлаждается за 84.6 с.

Рис. 7 иллюстрирует изменение размера первичного зерна  $\alpha$ -фазы в затвердевшем металле после его модифицирования тугоплавкими наноразмерными частицами от скорости охлаждения (интенсивности теплоотвода). Отметим, что минимальное расстояние между границами сосед-

них пузырьков в случае  $C_{\text{TiH}_2} = 1.5$  мас. % — 0.104 мм, а в случае  $C_{\text{TiH}_2} = 0.5$  мас. % — 0.144 мм. При  $\alpha = 200 \text{ Вт/(м·К)}$  характерный размер кристаллов в затвердевшем металле 11.9 мкм ( $C_{\text{TiH}_2} = 0.5$  мас. %) и 8.5 мкм ( $C_{\text{TiH}_2} = 1.5$  %). При  $\alpha = 400 \text{ Вт/(м·К)}$  характерный размер кристаллов в затвердевшем металле 6.6 мкм ( $C_{\text{TiH}_2} = 0.5$  мас. %) и 4.7 мкм ( $C_{\text{TiH}_2} = 1.5$  мас. %). Можно сделать вывод, что увеличение интенсивности охлаждения модифицированного расплава приводит к уменьшению размера кристаллического зерна. Согласно закону Холла—Петча это способствует повышению механических свойств металла [29, 30].

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Используя модель роста газовых пузырьков в расплаве алюминия, проведен численный анализ динамики формирования вспененных металлов. Определено, что после того как диаметр пузырьков становится около 20 мкм, дальнейшее их увеличение происходит за счет диффузии газа из окружающего расплава.

Разработана модель кристаллизации вспененного алюминия, модифицированного наноразмерными частицами, после окончательного формирования пузырьков. Проведено численное моделирование по оценке влияния интенсивности охлаждения расплава на структуру затвердевшего металла.

Показана возможность управления процессами формирования структуры и свойств вспененного алюминия не только изменением концентрации вспенивающего вещества ( $\text{TiH}_2$ ), но и интенсивностью охлаждения расплава. Внесение в расплав наноразмерных тугоплавких частиц в качестве модифицирующих добавок приводит к измельчению кристаллическую структуру и способствует повышению механических свойства затвердевшего металла.

Работа выполнена в рамках государственного задания (№ госрегистрации 124021400039-8).

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Banhart J. Manufacturing Routes for Metallic Foams // JOM. 2000. V. 52 (12). P. 22–27.
2. Banhart J. Manufacture, characterization and application of cellular metals and metal foams // Progress in Mater. Sci. 2001. No. 46. P. 559–632.
3. Sandim H., Morante Bruno Vieira, Suzuki P. Kinetics of Thermal Decomposition of Titanium Hydride Powder Using in situ High-temperature X-ray

- Diffraction (HTXRD) // Mater. Research. 2005. V. 8. No. 3. P. 293–297.
4. *Bhosle V., Baburaj E.G., Miranova M., Salama K.* Dehydrogenation of  $\text{TiH}_2$  // Mater. Eng. 2003. A356. P. 190–199.
  5. *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. Met. Metal. 2015. V. 116. No. 12. P. 1279–1284.
  6. *Kuzmanov P.M., Popov S.I., Yovkov L.V., Dimitrova R.N., Cherepanov A.N., Manolov V.K.* Investigation the effect of modification with nanopowders on crystallization process and microstructure of some alloys // AIP Conference Proceedings. 2017. V. 1893. P. 030104.
  7. *Cherepanov A.N., Manolov V.K.* Application of Nanopowders in Casting Production // J. Mater. Sci. Eng. 2022. V. 11 (02). P. 1–9.
  8. *Turnbul D.* Theory of catalysis of nucleation by surface patches // Acta Metal. 1953. V. 1. Iss. 1. P. 8–14.
  9. *Fletcher N.H.* Size Effect in Heterogeneous Nucleation // J. Chem. Phys. 1958. V. 29. Iss. 3. P. 572–576.
  10. *Chalmers B.* Principles of Solidification. New York: Wiley, 1964. 288 p.
  11. *Flemings M.C.* Solidification Processing. New York: McGraw-Hill, 1974. 424 p.
  12. *Borodianskiy K., Kossenko A., Zinigrad M.* Improvement of the Mechanical Properties of Al-Si Alloys by  $\text{TiC}$  Nanoparticles // Metal. Mater. Trans. A. 2013. V. 44. P. 4948–4953.
  13. *El-Mahallawi I.S., Shash A.Y., Amer A.E.* Nanoreinforced Cast Al-Si Alloys with  $\text{Al}_2\text{O}_3$ ,  $\text{TiO}_2$  and  $\text{ZrO}_2$  // Nanoparticles Metals. 2015. V. 5. No 2. P. 802–821.
  14. *Lazarova R., Bojanova N., Dimitrova R., Manolov V., Panov I.* Influence of Nanoparticles Introducing in the Melt of Aluminum Alloys on Castings Microstructure and Properties // Intern. J. Metal. 2016. V. 10. Iss. 4. P. 466–476.
  15. *Popov V.N., Cherepanov A.N.* Modeling of the alloy solidification modified by refractory nano-size particles // Eur. Phys. J. Spec. Top. 2020. V. 229(2–3). P. 467–474.
  16. *Попов В.Н.* Численное исследование процессов зародышеобразования и кристаллизации в модифицированном расплаве // ФММ. 2022. Т. 123. № 5. С. 469–477.
  17. *Sahu S.N., Gokhale A.A., Mehra A.* Modeling nucleation and growth of bubbles during foaming of molten aluminum with high initial gas supersaturation // J. Mater. Processing Techn. 2014. V. 214. Iss. 1. P. 1–12.
  18. *Shafi M.A., Lee J.G., Flumerfelt R.W.* Prediction of Cellular Structure in Free Expansion Polymer Foam Processing // Polymer Eng. Sci. 1996. V. 36. No. 14. P. 1950–1959.
  19. *Shafi M.A., Flumerfelt R.W.* Initial bubble growth in polymer foam processes // Chem. Eng. Sci. 1997. V. 52. Iss. 4. P. 627–633.
  20. *Mao D., Edwards J.R., Harvey A.* Prediction of foam growth and its nucleation in free and limited expansion. // Chemical Engineering Science. 2006. V. 61. Iss. 6. P. 1836–1845.
  21. *Turnbull D.* Formation of Crystal Nuclei in Liquid Metals // J. App. Phys. 1950. V. 21. P. 1022–1028.
  22. *Hienola A.I., Winkler P.M., Wagne P.E., Vehkamäki H., Lauri A., Napari I., Kulmala M.* Estimation of line tension and contact angle from heterogeneous nucleation experimental data // J. Chem. Phys. 2007. V. 126. P. 094705(1–11).
  23. *Колмогоров А.Н.* К статистической теории кристаллизации металлов // Изв. АН СССР. Сер. матем. 1937. Т. 1. № 3. С. 355–359.
  24. *Christian J.W.* The Theory of Transformations in Metals and Alloys. Publisher: Pergamon, 2002. 1200 p.
  25. *Sloane N.J.A.* The Packing of Spheres // Scientific American. 1984. V. 250. No. 1. P. 116–125.
  26. *Белецкий В.М., Кривов Г.А.* Алюминиевые сплавы. (Состав, свойства, технология, применение). Киев: КОМИНТЕХ, 2005. 365 с.
  27. *Зиновьев В.Е.* Теплофизические свойства металлов при высоких температурах. М.: Металлургия, 1989. 384 с
  28. *Варгафтик Н.Б.* Справочник по теплофизическим свойствам газов и жидкостей. М.: Наука, 1972. 720 с.
  29. *Hall E.O.* The Deformation and Ageing of Mild Steel: III Discussion of Results // Proc. Phys. Soc. B. 1951. V. 64. P. 747–753.
  30. *Petch N.J.* The Cleavage Strength of Polycrystals // J. Iron and Steel Institute. 1953. V. 174. P. 25–28.
  31. *Васильева А.Б.* О развитии теории обыкновенных дифференциальных уравнений с малым параметром при старших производных за период 1966–1967 гг // УМН. 1976. Т. 31. Вып. 6. С. 102–122.



# NUMERICAL SIMULATION OF THE STRUCTURE FORMATION AND CRYSTALLIZATION OF FOAMED ALUMINUM MODIFIED BY NANOSIZED PARTICLES

V. N. Popov<sup>1,\*</sup> and A. N. Cherepanov<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Khristianovich Institute of Theoretical and Applied Mechanics, Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences, Novosibirsk, 630090 Russia*

*\*e-mail: popov@itam.nsc.ru*

A mathematical model of crystallization of a foamed aluminum melt (Al–Si) containing modifying nanoscale particles, which is cooled under given heat removal conditions, is proposed. A numerical analysis of the formation dynamics of foamed metal has been performed, and the spherical pore sizes have been determined using a model of gas bubble growth in an aluminum melt. The boundaries of the cells surrounding the bubbles are defined in accordance to the experimental data available in the literature. The developed model demonstrates that the incorporation of nanosized refractory particles into the melt as modifying additives results in the crystal structure refinement and can contribute to the enhancement of the mechanical properties of the solidified metal.

**Keywords:** numerical simulation, foamed aluminum, hydrogen hydride, porosity, modifying nanoparticles, crystallization