

Таким образом, технология применения нанопорошков в качестве упрочняющих веществ для получения износостойкого литого МК слоя является перспективным направлением в литейном производстве. Износостойкость рабочего слоя отливок, упрочненного нанодисперсным карбонитридом титана в 2,5...3.2 раза выше износостойкости исходного чугуна.

Полученные результаты по использованию нанопорошков позволяют сделать вывод о возможностях их использования для повышения механических свойств, уменьшения износа и улучшения качества металлоизделий, получаемых из чугуна методами литья.

Список литературы

1. *Найдич Ю.В.* Пропитка пористых тел металлическими расплавами / *Найдич Ю.В.* // Журнал физической химии. -1979. -№ 33. –С.36-38.
2. *Калинин В.Т.* Роль тугоплавких наночастиц в модифицирующих процессах при кристаллизации чугуновых отливок /*Калинин В.Т., Кондрат А. А.* // *Металознавство та термічна обробка металів.* - 2009. - № 1 (44). – С.14-21.
3. *Калинин В. Т.,* Прогнозирование эффективности различных типов модификаторов при обработке чугунов /*Калинин В. Т., Кондрат А. А.* // *Процессы литья.* – 2010. - № 6. – С. 12-19.

УДК 544.273:669.715-404

Д. С. Каніболоцький , А. М. Верховлюк, О. А. Щерецький, Г. А. Верховлюк

Фізико-технологічний інститут металів та сплавів НАН України, Київ

МОЛЕКУЛЯРНА ДИНАМІКА РОЗПЛАВУ AL – 0,2 % TI

Відомо, що якість виливок залежить від властивостей вихідного розплаву. Фізичною та хімічною обробкою розплаву можна впливати на структуру та механічні властивості одержаних з них твердих сплавів. Численні дослідження розплавів методами рентгеноструктурного аналізу, ядерного магнітного резонансу, малокутового розсіювання нейтронів та мас-спектрометрії показали, що при незначних перегрівках над ліквідусом металічні розплави мають мікронеоднорідну структуру та містять угруповання атомів (кластери), які характеризуються ближнім порядком та за своєю

будовою можуть бути подібними до кристалів або квазікристалів. Вважається, що саме утворення, перетворення та дисоціація таких кластерів в розплаві зумовлюють вплив фізичної та/або хімічної обробки розплаву на структуру та властивості виливок [1]. Але на даний час не існує єдиної теорії будови металічних розплавів, так само як і єдиних уявлень про механізм впливу будови рідини на властивості виливки. Таким чином нові як експериментальні так і теоретичні дослідження структури рідких сплавів є актуальними.

Алюмінід титану Al_3Ti має дві кристалографічні модифікації: стабільну з тетрагональною граткою ($a = 3,854 \text{ \AA}$, $c = 8,584 \text{ \AA}$) та метастабільну з ГЦК граткою ($a = 3,978 \text{ \AA}$). Остання структура близька до чистого алюмінію (ГЦК, $a = 4,045 \text{ \AA}$). При кристалізації розплаву Al – Ti з вмістом титану до 6 мас. % зі швидкістю охолодження $10^5 \text{ }^\circ\text{C/s}$ утворюється дрібнодисперсна структура, що містить метастабільні кристали Al_3Ti [1]. Тобто титан є одним з перспективних модифікаторів алюмінієвих сплавів, що здатен утворювати центри кристалізації. Тому в якості об'єкта дослідження обрані сплави Al – Ti.

З використанням пакету програм LAMMPS виконано моделювання молекулярної динаміки рідких сплавів Al – 0,2 мас. % Ti в інтервалі температур від $677 \text{ }^\circ\text{C}$ до $1400 \text{ }^\circ\text{C}$ протягом двох наносекунд ($2 \cdot 10^{-9} \text{ c}$). Початковою структурою був нескінченний ГЦК монокристал Al, у якому відповідна частина атомів Al замінена на атоми Ti. Енергію взаємодії між атомами розраховували за допомогою потенціалу Zore-Ti-Al-2003.eam, рівняння руху інтегрували за алгоритмом почергового випередження з кроком 10^{-15} c , координати атомів записували у вихідний файл траєкторії з кроком 10^{-12} c .

Визначені радіальні функції розподілу, координаційні числа, коефіцієнти самодифузії компонентів, об'єм та кількість граней многогранників Вороного, густина, ентальпія, потенційна та повна енергії. Перші 10^{-10} c траєкторії інтерпретувалися як врівноваження системи під час та після плавлення, тому не враховувалися при розрахунку відповідних властивостей.

Встановлено, що при температурах $677 \text{ }^\circ\text{C}$, $700 \text{ }^\circ\text{C}$ та $740 \text{ }^\circ\text{C}$ кристал не встигає розплавитися протягом 10^{-9} c . Тому для одержання траєкторій при цих температурах сплав спочатку нагрівали до $840 \text{ }^\circ\text{C}$, а потім охолоджували до відповідної температури. При $790 \text{ }^\circ\text{C}$ сплав плавиться за $48 \cdot 10^{-12} \text{ c}$, при $840 \text{ }^\circ\text{C}$ і вище – за від $9 \cdot 10^{-12}$ до $4 \cdot 10^{-12} \text{ c}$. Визначено, що при збільшенні температури від $677 \text{ }^\circ\text{C}$ до $1400 \text{ }^\circ\text{C}$ перший пік радіальної функції розподілу навколо атомів Ti зменшується від 3,72 до 2,91, навколо атомів Al – від 2,78 до 2,18. Середній об'єм многогранників Вороного

збільшується для атомів Ti від $19,57 \text{ \AA}^2$ до $20,77 \text{ \AA}^2$, для атомів Al – від $18,56 \text{ \AA}^2$ до $19,52 \text{ \AA}^2$, середня кількість граней змінюється від 15,21 до 15,38 для атомів Ti та від 14,40 до 14,69 для атомів Al. При цьому потенційна та повна енергії системи зростають від $-300,5 \text{ кДж/моль}$ та $-288,7 \text{ кДж/моль}$ до $-288,2 \text{ кДж/моль}$ та $-267,3 \text{ кДж/моль}$, а потенційна енергія Ti змінюється від $-309,2 \text{ кДж/моль}$ до $-296,4 \text{ кДж/моль}$, відповідно. Також зростають коефіцієнти самодифузії Al та Ti (від $5,0 \cdot 10^{-9} \text{ м}^2/\text{с}$ та $2,6 \cdot 10^{-9} \text{ м}^2/\text{с}$ до $18,5 \cdot 10^{-9} \text{ м}^2/\text{с}$ та $12,2 \cdot 10^{-9} \text{ м}^2/\text{с}$), а густина розплаву зменшується (від $2,42$ до $2,30 \text{ г/см}^3$). Одержані результати добре узгоджуються з літературними даними.

Одержані дані свідчать, що атоми титану більш схильні, ніж атоми алюмінію, координувати навколо себе атоми алюмінію, тобто у розплаві утворюються кластери з центральним атомом титану. При збільшенні температури ці кластери стають менш стійкими.

Список літератури

1. Бродова И. Г. и др. Расплавы как основа формирования структуры и свойств алюминиевых сплавов. Екатеринбург: УрО РАН, 2005. – 371 с.

УДК: 536.242:62-405.8

В.В. Карпов, В.Ю. Карпов, С.И.Губенко

Национальная металлургическая академия Украины, Днепрпетровск

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ МЕДНЫХ ГАЗАРОВ В КАЧЕСТВЕ МИКРОТЕПЛОВЫХ ТРУБ

Современные требования к системам охлаждения полупроводниковой и компьютерной техники возрастают непрерывно. Требуются теплоотводы и холодильники с минимальными размерами и большой эффективностью, желательно плоские и не требующие строгой ориентации в пространстве. Теплофизические характеристики существующих теплообменников ограничиваются недостаточным уровнем теплопроводности применяемых материалов. Одним из путей увеличения эффективной теплопроводности материала является использование переноса скрытой теплоты испарения, то есть использование принципа работы тепловых труб.