

УДК 621.865.6

Г. И. КОСТЮК, О. Д. ГРИГОР

О ВЛИЯНИИ КВАНТОВО-МЕХАНИЧЕСКОГО МЕТОДА ОПРЕДЕЛЕНИЯ ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИХ И ТЕРМОМЕХАНИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК НА ОЦЕНКУ РАЗМЕРА ЗЕРНА ПРИ ДЕЙСТВИИ ИОНОВ НА ТИТАНОВЫЙ СПЛАВ

Розглянуто вплив завдання теплофізичних і термомеханічних характеристик матеріалу, при квантово - механічному підході до їх визначення на розмір зерна. Проведено порівняння результатів розрахунку за стохастичними даними і розрахунками по квантово-механічній теорії теплофізичних і термомеханічних характеристик. Показано, що при малих енергіях іонів (для легких іонів В, С, N, AL, O) існує значна відмінність між цими значеннями, тоді як зі збільшенням енергії ці відмінності істотно згладжуються. Для більш важких іонів (для Cr, V, Fe, Ni, Co, Y, Z, Mo, Hf, Ta, W, Pt) відміна зберігається як при малих, так і при високих енергіях. Ясно, що в цьому випадку необхідно обов'язково зіставляти результати розрахунку і експерименту, для того щоб визначити, для яких іонів необхідно враховувати вплив квантово-механічних ефектів, а для яких – не треба.

Ключові слова: квантово-механічний підхід, квантово-механічна теорія, теплофізичні та термомеханічні характеристики.

Рассмотрено влияние задания теплофизических и термомеханических характеристик материала, при квантово-механическом подходе к их определению на размер зерна. Проведено сравнение результатов расчета по стохастическим данным и расчетам по квантово-механической теории теплофизических и термомеханических характеристик. Показано, что при малых энергиях ионов (для легких ионов В, С, N, AL, O) существует значительное отличие между этими значениями, тогда как с увеличением энергии эти различия существенно сглаживаются. Для более тяжелых ионов (для Cr, V, Fe, Ni, Co, Y, Z, Mo, Hf, Ta, W, Pt) отличие сохраняется как при малых, так и при больших энергиях. Ясно, что в этом случае необходимо обязательно сопоставлять результаты расчета и эксперимента. с тем, чтобы определить, для каких ионов необходимо учитывать влияние квантово-механических эффектов, а для каких не надо.

Ключевые слова: квантово-механический подход, квантово-механическая теория, теплофизические и термомеханические характеристики.

The paper considers the influence of the task of thermal and thermomechanical properties of the material, with the quantum mechanical approach to their definition in the grain size. The comparison of the calculation results of the stochastic data and calculations on quantum mechanical theory of thermal and thermomechanical properties. It is shown that there is a significant difference between these values, whereas with increasing energy, these differences are considerably smoothed low-energy ions (light ions for В, С, N, AL, O). For heavier ions (for Cr, V, Fe, Ni, Co, Y, Z, Mo, Hf, Ta, W, Pt) is stored as a contrast at low and at high energies. It is clear that in this case, be sure to compare the results of calculation and experiment. In order that would determine for which ions need to consider the impact of quantum mechanical effects, and which do not.

Keywords: a quantum-mechanical approach, a quantum-mechanical theory, thermal and thermo-mechanical properties.

Введение. Применение титановых сплавов в авиационных конструкциях не получило широкого распространения, так как их поверхность имеет относительно невысокую твердость, что не позволяет их применять в ответственных конструкциях. Получение наноструктур на поверхности титановых сплавов может существенно улучшить контактную прочность, а значит – существенно, расширить сферу их применения. Все это говорит о важности рассмотрения вопроса о получении наноструктур на этих сплавах и определения технологических параметров их получения.

Работа выполнялась в рамках программы Министерства образования и науки Украины «Новые ресурсосберегающие технологии в энергетике, промышленности и агропромышленном комплексе» (подсекция 13 «Аэрокосмическая техника и транспорт») и по темам: «Создание физико-технических основ повышения качества материалов аэрокосмических конструкций», «Разработка технологических основ интегрированных технологий плазменно-ионной обработки деталей аэрокосмической техники» (подсекция 6 «Физико-технические проблемы материаловедения»), «Концепция создания наноструктур, нано- и традиционных покрытий с учетом влияния адгезии на эффективность и работоспособность деталей АТ, АД и РИ», «Экспериментально теоретическое исследование получения наноструктур при действии ионных и светолучевых потоков на конструкционные материалы и РИ», хозяйственных работ и договоров о сотрудничестве.

Состояние вопроса. К сожалению, в настоящее время нет как теоретических, так и экспериментальных работ по получению наноструктур (НС) на титановых сплавах, хотя теоретическому исследованию получения наноструктур посвящены ряд наших монографий [1–5], а экспериментальные работы рассматривались в монографиях [6–11]. На основе этих работ можно сформулировать критерии образования наноструктур: достижение необходимого диапазона температур (500...1500 К), превышение скорости роста температуры 10^7 К/с и наличие температурных напряжений в диапазоне 10^7 ... 10^9 Па. При реализации температурных напряжений, превышающих 10^{10} Па, есть вероятность непосредственного получения НС.

Ограничив область пространства в детали, где реализуются эти критерии, можно найти объем зоны, где возможно получение НС при действии индивидуального иона, а далее по объему получить размер зерна. Размер зерна обычно необходим, так как практически всегда исследуется влияние размера зерна на физико-механические характеристики материалов и детали. Поэтому в работе проводим исследование влияния энергии ионов на размер зерна при квантово-механическом и стохастическом определении теплофизических и термомеханических характеристик обрабатываемого материала.

Цель исследования. Целью исследования было определение технологических параметров, при которых необходимо учитывать изменение теплофизических и термомеханических характеристик материала

© Г. И. Костюк, О. Д. Григор, 2016

при квантово-механическом подходе по сравнению со стохастическими их значениями.

Расчетная модель и метод ее решения. Решалась совместная задача теплопроводности и термоупругости с применением метода МКЕ, причем на первом полушаге определялась температура, а на втором полушаге проводились расчеты с учетом найденных температурных напряжений, что позволяло рассчитать поля температур и температурных напряжений в зоне действия индивидуальной частицы (иона), по которым находилась зона, где выполнялись критерии образования НС. В дальнейшем по объему этой зоны определялся размер зерна.

Результаты расчета и их обсуждение. Для случая действия ионов (В, С, N, AL, O Cr, V, Fe, Ni, Co, Y, Z, Mo, Hf, Ta, W, Pt) получены зависимости размера зерна от энергии ионов и их зарядов (1, 2, 3), которые показаны на рис. (1–17). При стохастическом определении теплофизических характеристик результаты даны на сплошных кривых, а при квантово-механическом – определении пунктирами.

На рис. 1–5 видно, что с ростом энергии ионов результаты расчетов по двум вариантам сближаются и при 20 кэВ они практически совпадают, что позволяет пользоваться стохастическим методом определения теплофизических и термомеханических характеристик.

В остальных случаях (особенно при больших зарядах ионов) необходимо знать экспериментальное значение размера зерна и в зависимости от того, к какому значению оно будет ближе применять соответствующий метод расчета.

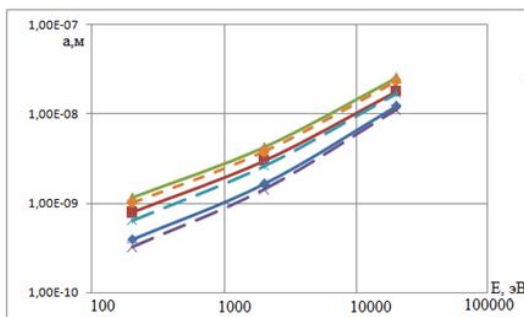


Рис. 1 – Зависимость размера зерна от энергии иона В при разных зарядах (— – теплофизические характеристики взятые из справочника, - - - - - рассчитаны по квантово-механическим теориям) для Эльбора-Р

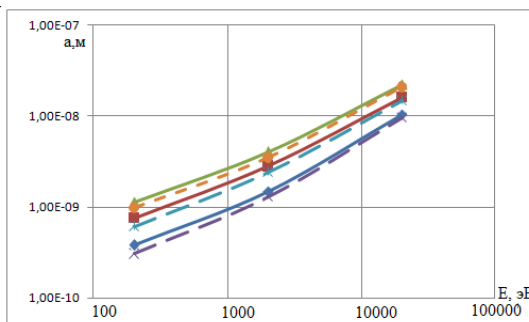


Рис. 2 – Зависимость размера зерна от энергии иона С при разных зарядах (— – теплофизические характеристики взятые из справочника, - - - - - рассчитанные по квантово-механическим теориям) для Эльбора-Р

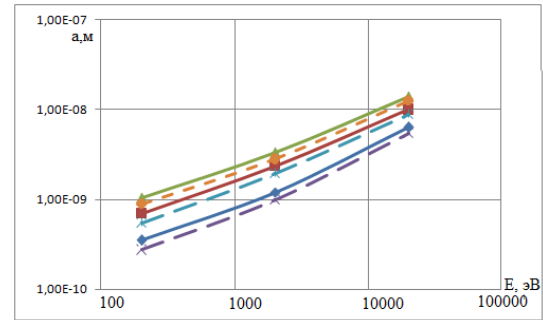


Рис. 3 – Зависимость размера зерна от энергии иона N при разных зарядах (— – теплофизические характеристики взятые из справочника, - - - - - рассчитанные по квантово-механическим теориям) для Эльбора-Р

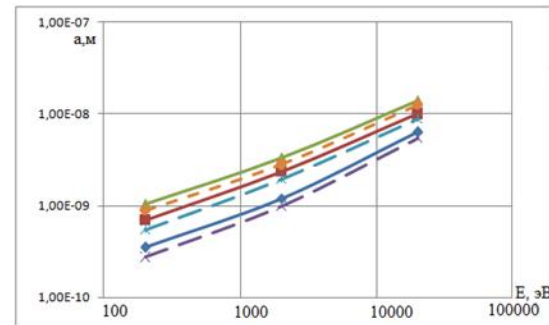


Рис. 4 – Зависимость размера зерна от энергии иона Al при разных зарядах (— – теплофизические характеристики взятые из справочника, - - - - - рассчитаны по квантово-механическим теориям) для Эльбора-Р

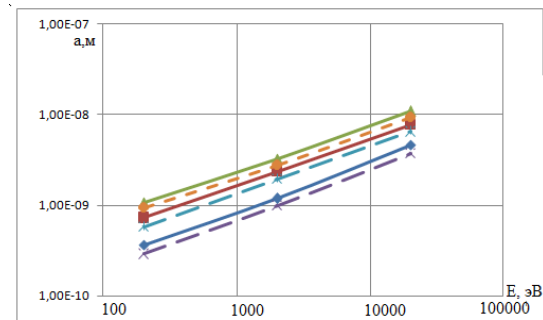


Рис. 5 – Зависимость размера зерна от энергии иона V при разных зарядах (— – теплофизические характеристики взятые из справочника, - - - - - рассчитаны по квантово-механическим теориям) для Эльбора-Р

Для исследованного диапазона энергий (200...20000 эВ) с ростом энергии растет размер зерна, причем при стохастическом определении теплофизических и термомеханических характеристик получают большие значения.

При повышении массы ионов (Cr, V, Fe, Ni, Co, Y, Z, Mo, Hf, Ta, W, Pt) стохастическое значение и квантово-механический подход дают эквидистантные кривые практически для всего диапазона исследованных энергий (200...20000 эВ). Необходимо нормировать значение по экспериментальным данным хотя бы в одной из точек по энергии иона и его заряду, что позволит определить, к какой кривой приближаются эти значения, а, следовательно, и будут более точные величины размера зерна (рис 6–17).

Для исследованного диапазона энергий (200...20000 эВ) с ростом энергии растет и размер

зерна, причем при стохастическом определении теплофизических и термомеханических характеристик получаются большие значения.

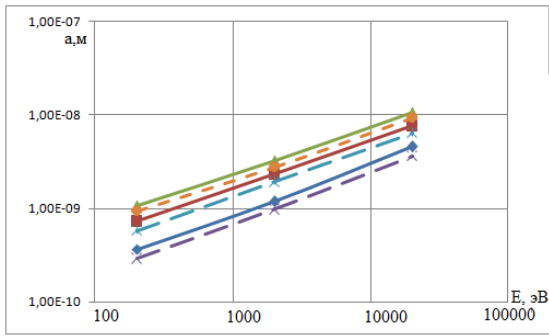


Рис. 6 – Зависимость размера зерна от энергии иона Sr при разных зарядах (— — теплофизические характеристики, взятые из справочника, - - - - рассчитанные по квантово-механическим теориям) для Эльбора-Р

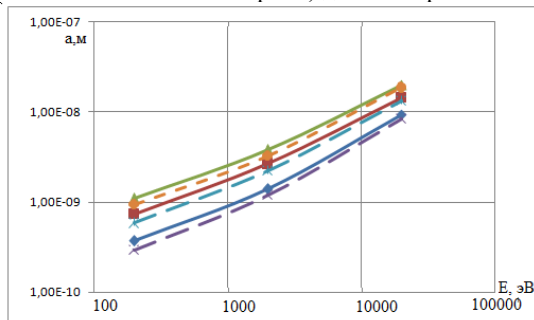


Рис. 7 – Зависимость размера зерна от энергии иона O при разных зарядах (— — теплофизические характеристики, взятые из справочника, - - - - рассчитанные по квантово-механическим теориям) для Эльбора-Р

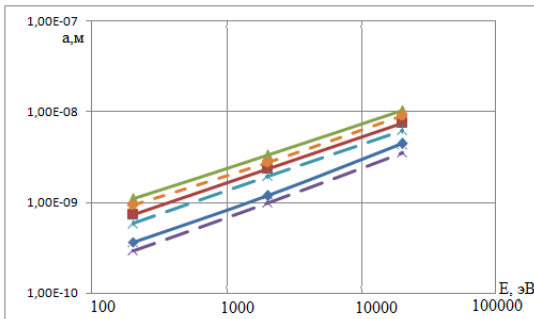


Рис. 8 – Зависимость размера зерна от энергии иона Fe при разных зарядах (— — теплофизические характеристики, взятые из справочника, - - - - рассчитанные по квантово-механическим теориям) для Эльбора-Р

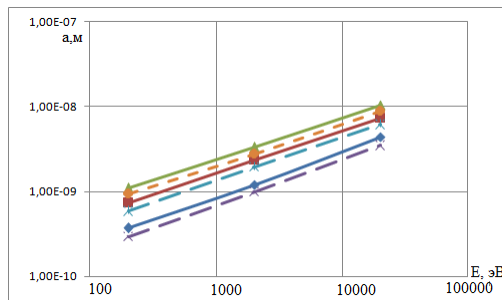


Рис. 9 – Зависимость размера зерна от энергии иона Ni при разных зарядах (— — теплофизические характеристики, взятые из справочника, - - - - рассчитанные по квантово-механическим теориям) для Эльбора-Р

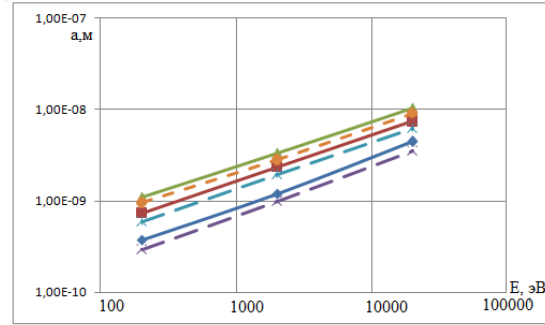


Рис. 10 – Зависимость размера зерна от энергии иона Co при разных зарядах (— — теплофизические характеристики, взятые из справочника, - - - - рассчитанные по квантово-механическим теориям) для Эльбора-Р

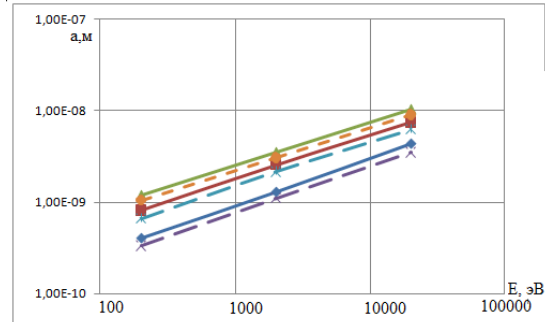


Рис. 11 – Зависимость размера зерна от энергии иона Y при разных зарядах (— — теплофизические характеристики, взятые из справочника, - - - - рассчитанные по квантово-механическим теориям) для Эльбора-Р

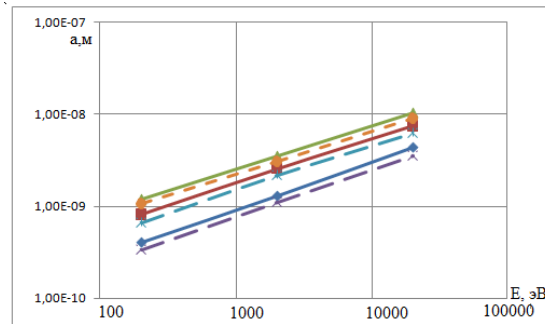


Рис. 12 – Зависимость размера зерна от энергии иона Cr при разных зарядах (— — теплофизические характеристики, взятые из справочника, - - - - рассчитанные по квантово-механическим теориям) для Эльбора-Р

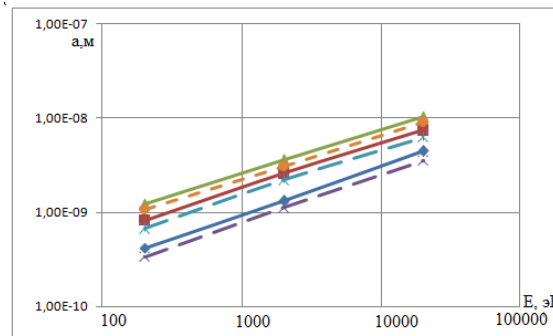


Рис. 13 – Зависимость размера зерна от энергии иона Mo при разных зарядах (— — теплофизические характеристики, взятые из справочника, - - - - рассчитаны по квантово-механическим теориям) для Эльбора-Р

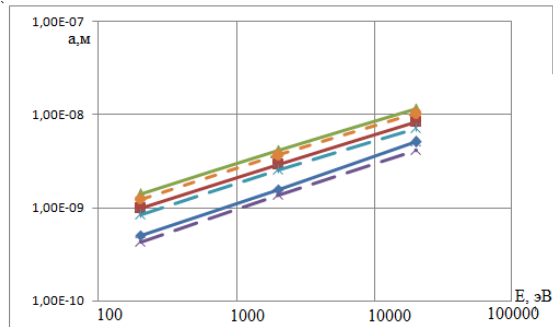


Рис. 14 – Зависимость размера зерна от энергии иона Hf при разных зарядах (— — теплофизические характеристики, взятые из справочника, - - - - рассчитанные по квантово-механическим теориям) для Эльбора-Р

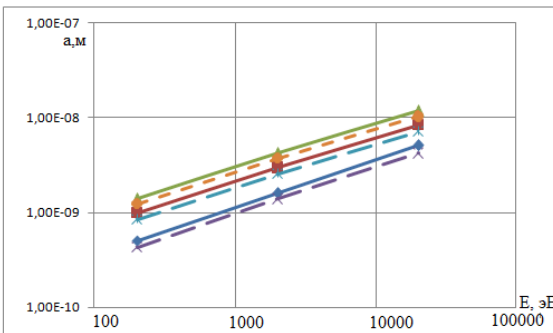


Рис. 15 – Зависимость размера зерна от энергии иона Ta при разных зарядах (— — теплофизические характеристики, взятые из справочника, - - - - рассчитанные по квантово-механическим теориям) для Эльбора-Р

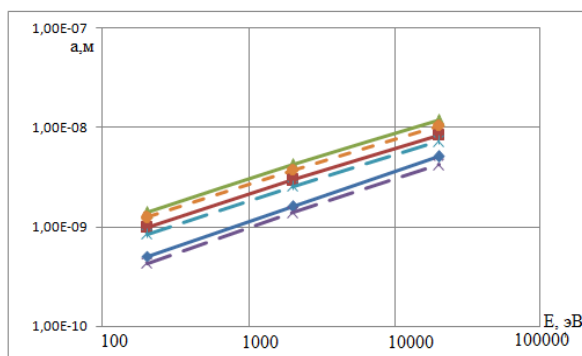


Рис. 16 – Зависимость размера зерна от энергии иона W при разных зарядах (— — теплофизические характеристики, взятые из справочника, - - - - рассчитанные по квантово-механическим теориям) для Эльбора-Р

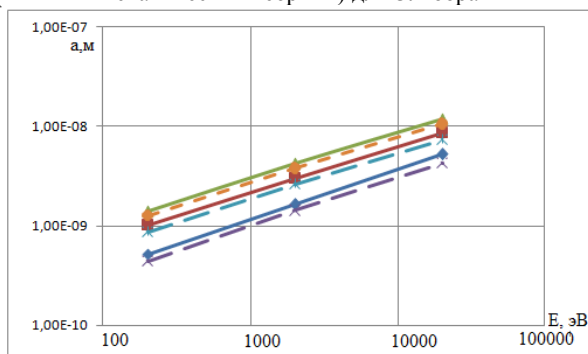


Рис. 17 – Зависимость размера зерна от энергии иона Pt при разных зарядах (— — теплофизические характеристики, взятые из справочника, - - - - рассчитанные по квантово-механическим теориям) для Эльбора-Р

Выводы.

Проведенные исследования показали, что с ростом энергии иона растет размер зерна, при этом для случая стохастического определения теплофизических и термомеханических характеристик эти значения имеют большие величины.

Показано, что для случая действия легких ионов (В, С, N, Al, O) с ростом энергии кривые по двум вариантам задания теплофизических и термомеханических характеристик сближаются и при 20 КэВ практически совпадают, что позволяет при высоких энергиях этих ионов не учитывать квантово-механический подход к определению характеристик.

Для тяжелых ионов (Cr, V, Fe, Ni, Co, Y, Z, Mo, Hf, Ta, W, Pt) практически для всех исследованных энергий отличие результатов остается, тогда в этом случае необходимо нормировать величины значения размера зерна по результатам эксперимента. В зависимости от того, к какой кривой эти результаты ближе, выбирать тот или иной метод расчета.

Для исследованного диапазона энергий (200...20000 эВ) с ростом энергии растет и размер зерна, причем при стохастическом определении теплофизических и термомеханических характеристик получаются большие значения.

Список литературы

1. Костюк Г. И. Нанотехнологии: выбор технологических параметров и установок, производительность обработки, физико-механические характеристики наноструктур: моногр. / Г. И. Костюк. – К.: Изд. центр Междунар. академии наук и инновац. технологий, 2014. – 472 с.
2. Костюк Г. И. Нанотехнологии: теория, эксперимент, техника, перспективы: моногр. / Г. И. Костюк. – К.: Изд. центр Междунар. академии наук и инновац. технологий, 2012. – 648 с.
3. Костюк Г. И. Физико-технические основы нанесения покрытий, ионной имплантации и ионного легирования, лазерной обработки и упрочнения, комбинированных технологий / Г. И. Костюк. – К.: Изд-во АИНУ, 2002. – Кн. 1: Физические процессы плазменно-ионных, ионно-лучевых, плазменных, светолучевых и комбинированных технологий. – 596 с.
4. Костюк Г. И. Физико-технические основы нанесения покрытий, ионной имплантации и ионного легирования, лазерной обработки и упрочнения, комбинированных технологий / Г. И. Костюк. – К.: Изд-во АИНУ, 2002. – Кн. 2: Справочник для расчета основных физических и технологических параметров, оценки возможностей, выбора типа технологий и оборудования. – 482 с.
5. Костюк Г. И. Наноструктуры и нанопокртия: перспективы и реальность: учеб. пособие / Г. И. Костюк. – Х.: Нац. аэрокосм. ун-т «Харьк. авиац. ин-т», 2009. – 406 с.
6. Костюк Г. И. Научные основы создания современных технологий: учеб. пособие / Г. И. Костюк. – Х.: Нац. аэрокосм. ун-т «Харьк. авиац. ин-т», 2008. – 552 с.
7. Костюк Г. И. Эффективный режущий инструмент с покрытием и упрочненным слоем: моногр.-справ. / Г. И. Костюк. – Х.: Нац. аэрокосм. ун-т «Харьк. авиац. ин-т», 2007. – 633 с.
8. Костюк Г. И. Эффективный режущий инструмент с покрытием и упрочненным слоем: справ. / Г. И. Костюк. – К.: Вид-во АИНУ, 2003. – 412 с.
9. Костюк Г. И. Физико-технические основы роботизированного производства: учеб. пособие / Г. И. Костюк. – Х.: Нац. аэрокосм. ун-т «Харьк. авиац. ин-т», 2006. – 614 с.
10. Гречихин Л. И. Физика наночастиц и нанотехнологий / Л. И. Гречихин. – М.: УП «Технопринт», 2004. – 397 с.
11. Аксенов И. И. Вакуумная дуга в эрозионных источниках плазмы / И. И. Аксенов. – Х.: Изд-во НИИ «ХФТИ», 2005. – 211 с.
12. Гусев А. И. Наноматериалы, наноструктуры, нанотехнологии / А. И. Гусев. – М.: Физматлит, 2005. – 416 с.

Bibliography (transliterated)

1. Kostyuk, G. I. *Nanotekhnologii: vybor tekhnologicheskikh parametrov i ustanovok, proizvoditel'nost' obrabotki, fiziko-mekhanicheskiye kharakteristiki nanostruktur*: monogr [Nanotechnology: the choice of process parameters and settings, processing performance, physical and mechanical properties of nanostructures] – Kiev, Izd. tsentr Mezhdunar. akademii nauk i innovats. tekhnologiy, 2014. 472 p.
2. Kostyuk, G. I. *Nanotekhnologii: teoriya, eksperiment, tekhnika, perspektivy: monogr* [Nanotechnology: theory, experiment, technology and prospects] – Kiev, Izd. tsentr Mezhdunar. akademii nauk i innovats. tekhnologiy, 2012. 648 p.
3. Kostyuk, G. I. *Fiziko-tekhnicheskiye osnovy naneseniya pokrytiy, ionnoy implantatsii i ionnogo legirovaniya, lazernoy obrabotki i uprochneniya, plazmennyykh, svetoluchevyykh i kombinirovannykh tekhnologiy* [Physical-technical principles of coating, ion implantation and ion alloying, laser treatment and hardening and combined technologies] – Kiev, AINU, 2002. – Book 1: *Fizicheskiye protsessy plazmenno-ionnykh, ionno-luchevyykh, plazmennyykh, svetoluchevyykh i kombinirovannykh tekhnologiy* [Physical processes of plasma-ion, ion-beam, plasma, light-beam and combined technologies]. 596 p.
4. Kostyuk, G. I. *Fiziko-tekhnicheskiye osnovy naneseniya pokrytiy, ionnoy implantatsii i ionnogo legirovaniya, lazernoy obrabotki i uprochneniya, kombinirovannykh tekhnologiy* [Physical-technical principles of coating, ion implantation and ion alloying, laser treatment and hardening and combined technologies] – Kiev, AINU, 2002. – Book 2: *Spravochnik dlya rascheta osnovnykh fizicheskikh i tekhnologicheskikh parametrov, otsenki vozmozhnostey, vybora tipa tekhnologiy i oborudovaniya* [Reference for calculation of the main physical and technological parameters, assessing opportunities, selecting the type of technologies and equipment]. 482 p.
5. Kostyuk, G. I. *Nanostrukturny i nanopokrytiya: perspektivy i real'nost' ucheb.posobiye* [Nanostructures and nanocoating: Prospects and Reality] – Kharkiv, Nats. aerokosm. un-t «Khar'k. aviats. in-t», 2009. 406 p.
6. Kostyuk, G. I. *Nauchnyye osnovy sozdaniya sovremennykh tekhnologiy: ucheb.posobiye* [The scientific basis for the creation of modern technologies] – Kharkiv, Nats. aerokosm. un-t «Khar'k. aviats. in-t», 2008. 552 p.
7. Kostyuk, G. I. *Effektivnyy rezhushchiy instrument s pokrytiem i uprochnennym sloym: monogr.-sprav* [Effective cutting tool coated with a layer of reinforced] – Kharkiv, Nats. aerokosm. un-t «Khar'k. aviats. in-t», 2007. 633 p.
8. Kostyuk, G. I. *Effektivnyy rezhushchiy instrument s pokrytiem i uprochnennym sloym: sprav* [Effective cutting tool coated with a layer of reinforced] – Kiev, AINU, 2003. 412 p.
9. Kostyuk, G. I. *Fiziko-tekhnicheskiye osnovy robotizirovannogo proizvodstva* [Physical and technical bases of robotized production] – Kharkov, Nats. aerokosm. un-t «Khar'k. aviats. in-t», 2006. – 614 p.
10. Grechikhin, L. I. *Fizika nanochastits i nanote-khnologiy* [The physics of nanoparticles and nanotechnology] – Moscow, UP «Tekhnoprint», 2004. 397 p.
11. Aksenov, I. I. *Vakuumnaya duga v erozionnykh istochnikakh plazmy* [Vacuum arc erosion plasma sources] – Kharkiv, NII «KHFTI», 2005. 211 p.
12. Gusev, A. I. *Nanomaterialy, nanostrukturny, nanotekhnologii* [Nanomaterials, nanostructures, nanotechnology] – Moscow, Fizmatlit, 2005. 416 p.

Поступила (received) 03.11.16

Бібліографічні описи / Библиографические описания / Bibliographic descriptions

Про вплив квантово-механічного методу визначення теплофізичних і термомеханічної характеристик на оцінку розміру зерна при дії іонів на титанові сплави / Г. І. Костюк, О. Д. Григор // Вісник НТУ «ХПІ». Серія: Технології в машинобудуванні. – Х. : НТУ «ХПІ», 2016. – № 33 (1205). – С. 23–33. – Бібліогр.: 12 назв. – ISSN 2079-004X.

О влиянии квантово-механического метода определения теплофизических и термомеханических характеристик на оценку размера зерна при действии ионов на титановый сплав / Г. И. Костюк, О. Д. Григор // Вісник НТУ «ХПІ». Серія: Технології в машинобудуванні. – Харків : НТУ «ХПІ», 2016. – № 33 (1205). – С. 29–33. – Библиогр.: 12 назв. – ISSN 2079-004X.

About the influence of quantum-mechanical method of determining the thermal and thermomechanical characteristics to evaluate the grain size in action at ions titanium alloys / G. I. Kostyuk, O. D. Grigor // Bulletin of NTU "KhPI". Series: Techniques in a machine industry. – Kharkov : NTU "KhPI", 2016. – No. 33 (1205). – P. 29–33. – Bibliogr.: 12. – ISSN 2079-004X.

Відомості про авторів / Сведения об авторах / About the Authors

Костюк Геннадій Ігорович – доктор технічних наук, професор, професор Національного аерокосмічного університету «Харківський авіаційний інститут», тел.: (057)-788-42-06, e-mail: g.kostyuk206@yandex.ru;

Костюк Геннадий Игоревич – доктор технических наук, профессор, профессор Национального аэрокосмического университета «Харьковский авиационный институт», тел.: (057)-788-42-06, e-mail: g.kostyuk206@yandex.ru;

Kostyuk Gennadiy Igorevich – Doctor of Technical Sciences, Full Professor, National Aerospace University Zhukovskiy, tel.: (057)-788-42-06, e-mail: g.kostyuk206@yandex.ru;

Григор Ольга Діонісовна – студентка кафедри теоретичної механіки, машинознавства і роботомеханічних систем, Національний аерокосмічний університет ім. М. С. Жуковського «Харківський авіаційний інститут», м. Харків; тел.: (057) 788-42-06; e-mail: gennadiykostuk206@gmail.com

Григор Ольга Дионисовна – студентка кафедры теоретической механики, машиноведения и роботомеханических систем, Национальный аэрокосмический университет им. Н. Е. Жуковского «Харьковский авиационный институт», г. Харьков; тел.: (057) 788-42-06; e-mail: gennadiykostuk206@gmail.com

Grigor Olga Dionisovna – student at the Department of Theoretical Mechanics, Mechanical Engineering and Robotic-Mechanical systems, the National Aerospace University named by N. E. Zhukovskiy «Kharkov aviation institutes», Kharkov; tel.: (057) 788-42-06; gennadiykostuk206@gmail.com