

П. А. Гавриш, к. т. н.

ЗАСАДИ СТВОРЕННЯ ТЕРМОДИНАМІЧНОЇ МОДЕЛІ СИСТЕМИ CU-FE-C-O З МЕТОЮ ОПТИМІЗАЦІЇ ПРОЦЕСУ ЗВАРЮВАННЯ МІДІ ТА СТАЛІ

Розроблено основні принципи створення термодинамічної моделі зварювання міді зі сталлю.

Вступ

Величезну роль в сучасних умовах виконує метод отримання зварних вузлів з наперед заданими властивостями. Управління таким процесом зварювання дозволить одержувати зварні з'єднання з необхідними показниками фізико-хімічних і технологічних властивостей. Будь-яке управління пов'язано з необхідністю прогнозу, передбачення результатів тих, або інших можливих дій на технологічний процес. У разі таких складних технологій, якою є зварювання різномірних металів [1], наприклад мідь-залізо, задача передбачення є вузловою, яка зосереджує в собі найважливіші проблеми, лімітуючи розвиток таких систем управління. Математичний апарат (модель процесу), що виконує функцію передбачення, незалежно від його ідеології, є засобом інтерполяції (іноді екстраполяції) наявних даних минулого досвіду на умови передбачуваного. Створення термодинамічної моделі процесу зварювання, проводиться з метою визначення оптимальних параметрів, дозволить різко скоротити кількість натурних експериментів, а також скласти обґрунтований план проведення дослідних зварювань в промислових умовах або в лабораторії.

Найзагальніші термодинамічні моделі, призначені для опису металургійних процесів зварювання, ґрунтуються на пошуку екстремуму характеристичних термодинамічних функцій системи — ентропії S , енергії Гіббса G , енергії Гельмгольца F або приведенного ізобарного потенціалу Φ (в залежності від умов, в яких відбувається процес, і складності моделі) [2, 3].

На теперішній час розроблено багато математичних моделей взаємодії бінарних систем, які часто ділять на термодинамічні (зазвичай рівноважні або квазірівноважні), кінетичні (зокрема побудовані з використанням термодинаміки незворотних процесів) та інші [4, 5], але досі не існує математичних моделей взаємодії системи, у якій присутні Cu-Fe-C-O.

Постановка задачі та спосіб її розв'язання

У відомих математичних моделях не враховується вплив водню та вуглецю на процес зварювання міді та сталі. Відомо, що найшкідливішою домішкою є кисень. Разом з тим, наявність у зварювальній атмосфері водню спричиняє так звану «водневу хворобу». Це пояснюється тим, що водень має високий коефіцієнт дифузії у сталі. Навіть при температурі 300 К коефіцієнт дифузії водню складає $10^{-5} \dots 10^{-6} \text{см}^{-1}$ [6]. При температурі зварювальної дуги водень дифундує у глибину металу та відновлює оксид міді.



Пари води створюють високий тиск під час твердіння розплаву, що приводить до дефектів-щілин. Це явище й названо «водневою хворобою».

Взаємодія заліза, міді, кисню у розплаві під час зварювання може бути представлена такими хімічними реакціями:



Окрім цього відбувається розчинення міді у розплаві флюсу (зварювання під флюсом, або порошковим електродом).



Реакції взаємодії газів з міддю можна представити у такому вигляді:



Для рівнянь (1–14) треба визначити термодинамічні показники, які необхідні для створення математичної моделі. Для побудови математичної моделі в термодинаміці багатоконпонентних металевих розчинів найширше поширення набув метод параметрів взаємодії, який був запропонований К. Вагнером [7]. Переваги, які вигідно відрізняють цей метод (простота, математична формалізація і, головне, можливість накопичення даних у вигляді обмеженої кількості параметрів взаємодії). У термодинамічному плані основу методу Вагнера складає розкладання відповідної парціальної надмірної термодинамічної функції зміщення (ΔG_i^e , ΔH_i , ΔS_i^e) в степеневий ряд Тейлора (Маклорена) за концентраціями компонентів і зворотною температурою біля точки, що відповідає чистому розчиннику. Якщо за стандартний стан прийняти чистий компонент, то для надмірної вільної енергії, точніше для $\ln \gamma_i = \Delta G_i^e / RT$ при постійних температурі і тиску отримаємо:

$$\ln \gamma_i = \ln \gamma_i^\circ + \sum_{j=2}^n \frac{d \ln \gamma_i}{dx_j} x_j + \frac{1}{2} \sum_{j=2}^n \frac{d^2 \ln \gamma_i}{dx_j^2} x_j^2 + \sum_{j=2}^{n-1} \sum_{k=j+1}^n \frac{d \ln \gamma_i}{dx_j dx_k} x_j x_k + \dots, \quad (15)$$

де: γ_i° — наближене значення невідомого параметра; n — загальна кількість компонентів (мінімальна кількість компонентів $j = 2$, максимальна — $k = j + 1$); $\frac{d \ln \gamma_i}{dx_j}$ — частинні похідні, які входять у рівняння (їх називають параметрами взаємодії).

Для ΔH_i , ΔS_i^e також можна навести формули аналогічні (15) зі своїми параметрами і співвідношеннями. Врахування активності кисню в розплаві флюсу в процесі зварювання супроводжуються також енергійними змінами активності металевих або інших домішкових компонентів. Простим об'єктивним критерієм, найзагальнішою кількісною мірою окислювально-відновного потенціалу є парціальна вільна енергія електронів [8] μ — рівень Фермі. Повна формула для хімічного потенціалу компоненту — i в оксидній фазі повинна містити член, що враховує характеристики електронної системи фази (μ) [8, 9].

Висновки

1. З урахуванням наведених обмежень потрібно розробити формалізовану модель системи Cu-Fe-C-O з урахуванням усіх елементів та з урахуванням неідеальності конденсувальних фаз.

2. Для створення термодинамічної моделі системи потрібно вибрати математично і термодинамічно обгрунтовані формули для розрахунку термодинамічних характеристик компонентів (елементів) і сформулювати критерії такого відбору.

3. Розробити алгоритм аналізу результатів математичного моделювання з метою отримання якісного зварного шва.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Сварка разнородных металлов и сплавов / В. Р. Рябов, Д. М. Рабкин, Р. С. Курочко, Л. Г. Стрижевская. — М.: Машиностроение, 1984. — 239 с.
2. Карпов И. К., Детковская В. А. Некоторые теоретические вопросы физико-химического моделирования на ЭВМ методами математического программирования / Математические вопросы химической термодинамики. — Новосибирск: Наука, 1984. — С. 368.
3. Сулис А. Л. Термодинамика высокотемпературных процессов: Справочник. — М.: Металлургия, 1985. — С. 288.
4. Цемехман Л. Ш., Минцис В. П., Бурьлев Б. П. Термодинамические свойства расплавов системы железо-медь // Изв. вузов. Черная металлургия. — 1984. — № 6. — С. 1—4.
5. Трофимов Е. А., Михайлов Г. Г. Термодинамический анализ системы Cu-Fe-O при температурах 1100—1300°С // Физическая химия и технология неорганических материалов. Изв. Челябинского научн.центра. Вып. 1(14). — 2002. — С. 8—11.
6. Фром Е., Гебхард Е. Газы и углерод в металлах. — М.: Металлургия, 1990. — 712 с.
7. Вагнер К. Термодинамика сплавов. — М.: Металлургиздат, 1957. — 179 с.
8. Пономаренко А. Г. Вопросы термодинамики фаз переменного состава, имеющих коллективную электронную систему // ЖФХ. — 1974. — Т. 48 — № 7. — С. 1668—1674; № 8. — С. 1950—1958.
9. Гавриш П. А., Кассов В. Д. Влияние окислительно-восстановительного потенциала шлака на поведение водорода при электрошлаковой сварке // Нові матеріали і технології в металургії та машинобудуванні. — 2004. — № 1. — С. 52—55.

Рекомендована кафедрою технології підвищення зносостійкості

Надійшла до редакції 10.03.05
Рекомендована до друку 4.06.05

Гавриш Павло Анатолійович — науковий співробітник кафедри зварювального виробництва.

Донбаська державна машинобудівна академія