

微机在金属材料工程中的应用

北京航空航天大学 王振清

微机在材料工程方面比其它领域起步要晚,国内近几年才开始使用。微机科技应用可分为4个方面:科学计算,工程测控,统计管理和人工智能。本文仅对前两方面在材料工程上的应用作一简单介绍。

一、科学计算

1. 热力学、动力学计算

常见的有相图计算、激活能计算;钢的C曲线及连续冷却曲线计算;淬透性计算;各种反应速度、工艺过程的仿真计算等。这些计算涉及到数据拟合、经验公式的参数求解和选择,数值迭代逼近等方法^[1]。

2. 晶体学计算

这方面涉及相变点阵分析、微观应力场分析、晶界点阵组态结构计算与图示等^[2]。大部分用矩阵计算、空间点阵位置扫描与调节、原子束缚力及空隙容积的计算等。

3. 浓度、梯度场计算

它涉及金属材料的各种加工中的温度场,直至组织分布及应力分布状态的计算;化学热处理中的粒子传递、扩散所涉及浓度梯度的仿真计算。其中主要涉及有限差分法和有限元法。

4. 试验数据的分析处理

试验数据的分析处理分为数据的各种拟合和拟合后的误差分析、数理统计。前者常用有线性回归或最小二乘法,后者主要是数理统计中离散数值分析法的应用^[1]。涉及到数据处理的还有对脉冲或波动信号的试验数据的各种时域——频域变换分析、合金设计中的各种分析、比较与查找等。前者在微机测控中常用到,后者是数据库及专家系统常用方法之一。

以上按计算方法可分为有限差分法,有限元法,插值及样条函数法,高次方程的逼近解法,数据曲线拟合、矩阵计算及离散式傅氏变换法等。这一分类不再详述。

二、工程测控

1. 材料力学性能参数的微机采集、图示及计算

谈到力学性能实验,无论拉压剪,还是冲击、疲劳及蠕变,基本测量参数不外乎力和位移。目前国内大部分拉伸实验机没有数值采集记录装置,即使70年代引进的电子拉伸机,也只是加上了差动变压器作为力的传感器的指针表示力的系统。

采用微机对拉力、位移信号采集,可以得到大量的数值信息,使试验快而准,减少人为误差和操作强度。使

参数的计算有各种各样的变化,随即的各种参数的图示又增加了对参数的直观分析。

与拉伸实验相对,冲击试验的微机测试难点在于高速A/D的要求,即双路、同时性快速A/D、外触发启动环节及数据直接存放、保持、向主机串行通讯等问题。这些问题一旦解决,冲击试验这一瞬间过程便可由一类似拉伸试验中的力一位移曲线来展示,从中可得到以前无法了解的内在问题^[3]。而蠕变试验则要求微机及其硬件系统有良好的长期稳定性。

2. 热工参数与过程的微机控制

热工控制包括温度、气氛和压力三种参数的测控。在常规工艺条件下,前二者的控制更为常见。在温度控制方面已出现大量智能仪表,除多区、高精度、多个动作联动的温度控制外,一般不再另开发。

在气氛控制方面,常见的有碳势、氮势控制系统,它们一般采用STD总线结构微机,软件多采用机器语言;传感器可用红外仪、氧浓差电势探头、氨分解仪等;执行器常为电磁阀、定量抽吸泵或电动控制阀等。此系统除完成主要参数的稳定控制外,同时在显示、打印等外设和工艺管理等方面也具有特色^[4]。

3. 其它物理、化学参数的测控

X射线、电子衍射及化学分析所用色谱仪的输出一般为波谱、能谱信号,微机对这些信号的连续采集、分析与处理有很大的优越性^[5],具体的硬件、软件与力和位移的采集系统类似。

电化学分析方面的微机采集应用也很广,pH值的测定、各种电极电位的测试、氧化还原电位的测定。以上这些与其传感器——pH电极及各种离子选择电极关系很密切。这些测试方法又可用于电镀工艺控制、工业废水处理自动化等方面。

4. 工程自动线控制

材料工程方面的自动线(或设备)很多,有热处理连续炉、周期炉门开闭、工件移动、电镀、喷漆自动线,另外还有金属压铸机、塑料注射成型机等。这些位式动作也可与前面叙述的参数控制联用一台微机,而单独控制时更习惯用PC(过程控制器)专用微机。

(下转第55页)

一种新的分子结晶碳 C₆₀

早在 1970 年,为了解释已经观察到的关于星际间未知射线的吸收和发射现象,苏联理论化学家 D. A. Bochvar 等提出了 C₆₀ 的结构及存在的假设。尔后,这一理论假设一直吸引着众多的学者。

到目前为止,只有石墨碳和金刚石二种碳的结晶形态被很清楚地了解。它们都是以碳原子为重复单元。然而 C₆₀ 则不同,它是以分子单元为重复单元,每个分子单元是由 60 个碳原子按一定规律组成的空心球(图 1)。这一空心球由 32 个面,即 12 个等五边形和 20 个等六边形组成。作为一分子结晶碳家族,除 C₆₀ 外还存在 C₇₀、C₈₄,很可能还有 C₁₈₀、C₂₄₀ 等。C₆₀ 的吸收光谱和观察到的星际性未知光谱相似。这证明了苏联科学家的假设并可以设想在宇宙间存在着大量这样的分子。

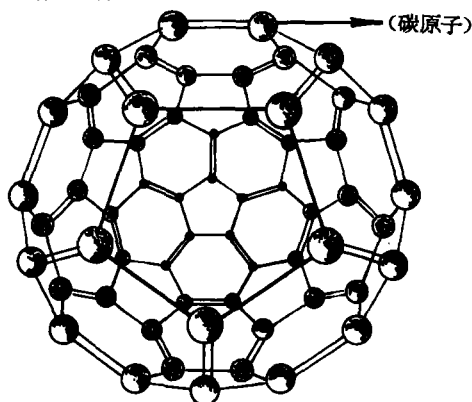


图 1 C₆₀ 结构示意图
(碳原子间的单键或双键联法)

第一次合成 C₆₀ 是在 1980 年,美国科学家 R. E. Smalley 利用一激光束冲击浸泡在液氮中的石墨电极。从石墨电极表面被剥离下来的碳原子重新结合成新的分子,其中就有 C₆₀。现在人们可合成足够的 C₆₀ 供基础及应用基础研究。1990 年底,西德和美国科学家合作发展了一种新的简单有效的合成工艺:在一个反应器内注满液氮,然后在二石墨棒间加压使其放电产生电弧,在这样的反应产物中包含有 C₆₀、C₇₀ 等。产物可利用溶剂萃取提纯。利用这一方法可得到纯度达化学纯的大量产物。质量谱的研究允许科学家们测定其产物的质量,从一部分产物的分子量为 720,另一部分大约为 840 来看,科学家们确定这二者各自包含有 60 和 70 个碳原子,它们主要由 ¹²C 组成,¹³C 的含量极少。使用红外光谱、X 射线、核磁共振等技术可确定 C₆₀ 中每个碳原子的物理化学特性。由于 C₆₀ 具有高度的对称性,实验结果出乎意料地简单明了。例如当应用 ¹³C 核磁共振技术,由于在 C₆₀ 中只有一个碳同位素具有磁性,就可以此为原位来测量各个碳原子间可能的键结形式。C₆₀ 的共振谱图仅由一条很细的曲线组成,这表明在 C₆₀ 中不同的碳原子位置是相互对称的。红外光

材料工程

谱和 Raman 光谱也可用来研究分子间原子的不同振动。这里只有很窄的吸收带被观察到,而这种情况在一个如此大的分子间很少见,原因仍是 C₆₀ 具有高度的有序对称性。

对于 C₇₀ 情况就有所不同,它不再是球形而是橄榄球形(图 2)。由于结构的变化,各种光谱结果就明显不同于 C₆₀。理论预测 C₇₀ 中碳原子间存在 5 种不同的键已经由核磁共振谱得到证明。另外,红外和 Raman 谱图也表明 C₇₀ 较 C₆₀ 有宽的吸收带。

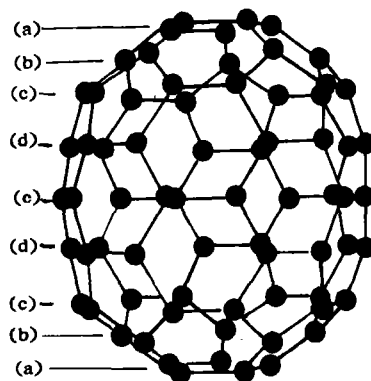


图 2 C₇₀ 结构示意图(碳原子间有 5 种不同的键结形式,从 a 到 e)

具有特殊性能的 C₆₀ 将给碳化学工业带来一个新的发展。球形分子或准球形分子特性有许多优点,它具有特殊的相,互反应性、可移动性及稳定性。C₆₀ 的磁性能似乎和所包含的碳原子数目有关,例如,和励磁响应有关的磁化率 C₇₀ 二倍于 C₆₀。

关于 C₆₀ 的应用。由于 C₆₀ 分子具有球形结构,因此在润滑领域中,它的作用如同一微滚珠。C₆₀ 的氢化物和氟化物的研究正在开展。已经发现 C₆₀H₃₆ 和 C₆₀F₃₆ 具有很高的稳定性(直到 400~500℃)。C₆₀ 的金属化合物 C₆₀M 也正在研究中(例如 M 为镧(La)或钾(K))。选择不同的金属元素可以得到不同性能的新材料。此外,C₆₀ 特有的电磁性及高度稳定性也可以在电池及高能电容领域一显身手。作为电极材料,C₆₀ 可以极容易地改善其转化率及特性。另外在催化领域,任何一个功能化后的碳原子都可以作为一个光学、化学反应的活化点。再则,由于 C₆₀ 掺杂极为方便,因此,有人设想将来在微电子技术领域以 C₆₀ 取代镓和硅。

(陈祥宝)

(上接第 51 页)

参考文献

1. 王振清,微机在金属材料工程中的应用,上册,1989,12,北航印刷
2. 周自强等,北航学报,1988,2,P22
3. 唐振廷等,兵器材料科学与工程,1990,1,P41
4. 张建华等,热处理自动化第三届学术会,1987,7
5. 刘福顺等,全国 X 射线衍射计算机软件会议论文集,P73