

УДК 519.6:532.517+621.7

**Численный анализ влияния
поверхностно-активного вещества в расплаве
на распределение модифицирующих частиц
и кристаллизацию при обработке
поверхности металла лазерным импульсом***

А.Н. Черепанов, В.Н. Попов

*Институт теоретической и прикладной механики
им. С.А. Христиановича СО РАН, Новосибирск*

E-mail: ancher@itam.nsc.ru

Предложена математическая модель процесса модифицирования поверхностного слоя металла тугоплавкими наноразмерными частицами с помощью импульсного лазерного излучения, в которой учитывается зависимость поверхностного натяжения от наличия поверхностно-активного вещества в расплаве. Проведено численное моделирование, по результатам которого оценены влияние поверхностно-активной примеси на характер формирующихся течений, распределение частиц модифицирующего вещества в металле и процесс кристаллизации расплава.

Ключевые слова: модифицирование, наноразмерные тугоплавкие частицы, импульсное лазерное излучение, конвективный теплоперенос, численное моделирование.

Введение

Лазерное излучение широко применяется при модификации поверхностей деталей для улучшения их эксплуатационных свойств, таких как твердость, термо- и износостойкость и тому подобных. Процессы, происходящие в поверхностном слое металла при воздействии лазерного импульса, изучаются довольно продолжительное время [1–7]. Известно, что одним из главных факторов, определяющих эффективность модифицирования, является термокапиллярная конвекция, способствующая гомогенному распределению вносимых добавок, предварительно размещенных на поверхность металла в виде суспензии или слоя порошка и проникающих в ходе подплавления в расплав. С целью оптимизации конвективных процессов в проплавляемой жидкой лунке в работах [7, 8] рассматривались особенности структуры течений при возможном преобладании концентрационно-капиллярной конвекции. В работах [9, 10], используя результаты [11], описывающие связь между растворенным в расплаве поверхностно-активным веществом (ПАВ) и поверхностным натяжением, рассмотрено влияние ПАВ на структуру течений и распределение легирующей добавки в сплаве.

* Работа выполнена в рамках партнерского интеграционного проекта ИМАШ УрО РАН – ИТПМ СО РАН № 4 и при финансовой поддержке РФФИ (грант № 11-08-00814-а).

Обеспечение высоких механических и прочностных свойств модифицированных поверхностей во многом обуславливается макро- и микроструктурой металла, затвердевшего после прекращения лазерного импульса. Высокая дисперсность и однородность кристаллического зерна благоприятно сказываются на качестве обработки. Одним из перспективных способов решения этой задачи является модифицирование расплава наноразмерными модификаторами, в качестве которых могут быть использованы специально подготовленные частицы тугоплавких соединений (карбиды, нитриды, карбонитриды и др.) [12, 13]. При этом увеличение дисперсности частиц позволяет при сохранении их массы увеличить количество центров кристаллизации, а следовательно, измельчать структурные составляющие затвердевшего металла и повышать однородность покрытий.

В настоящей работе с использованием численного моделирования исследуется возможность оптимизации распределения нерастворимых наноразмерных частиц, проникающих в расплавленную металлическую подложку с ее поверхности при импульсном лазерном воздействии. Анализируется характер течений, переносящих модифицирующие частицы, в зависимости от концентрации поверхностно-активного вещества в металле, а также процесс роста твердой фазы. Сформулирована математическая модель, описывающая разогрев металла, его плавление, тепло- и массоперенос в расплаве и затвердевание после окончания импульса. В качестве объекта исследований рассматривается малоуглеродистая сталь с различным содержанием серы, являющейся поверхностно-активным веществом.

Постановка задачи

Рассматривается воздействие лазерного импульса продолжительностью t_H на металлическую подложку. Луч имеет фокальные пятно радиусом r_0 , а его плотность мощности описывается функцией Гаусса. Поверхность подложки покрыта слоем специально подготовленных модифицирующих наночастиц тугоплавкого соединения, которые служат активными центрами кристаллизации. Под воздействием лазерной энергии металл разогревается и плавится. Фазовый переход происходит при температуре плавления материала подложки T_m . В образовавшейся и увеличивающейся со временем жидкой лунке развивается конвекция под действием капиллярных и термогравитационных сил. Хорошо смачиваемые наночастицы под действием конвективных потоков проникают в глубину проплавленной лунки. Для расплава используются условия прилипания на твердом фронте кристаллизации.

После завершения импульса за счет отвода тепла в неразогретый материал подложки и теплообмена с окружающей средой происходит остывание расплава и его объемно-последовательная кристаллизация в предположении, что все проникшие наночастицы являются ее центрами. Границы r_g , z_g рассматриваемой области выбраны таким образом, чтобы их положение не оказывало влияние на исследуемые процессы.

Для упрощения задачи считается, что теплофизические характеристики жидкой, твердой и двухфазной сред одинаковые и не зависят от температуры. Массовое содержание частиц m_p , проникающих в расплав, мало ($m_p \leq 0,05\%$), их диаметр d_p много меньше характерного размера жидкой лунки, так что влиянием включений на физические параметры расплава можно пренебречь. Количество растворённых примесных компонентов в расплаве незначительно, так что можно не учитывать их влияние на температуру фазового перехода, полагая $T_m = \text{const}$. Плавление металла рассматривается в приближении Стефана с использованием эффективной теплоёмкости [14]. Предполагается, что при рассматриваемых режимах нагрева небольшие величины конвективных скоростей обуславливают плоскую форму свободной поверхности жидкости [15].

Запишем математическую формулировку рассматриваемой задачи в безразмерных величинах. Распределение температурного поля в твердом и жидком материале подложки описывается уравнением конвективного теплопереноса в цилиндрической системе координат

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} + u \frac{\partial \theta}{\partial r} + w \frac{\partial \theta}{\partial z} = \frac{1}{\text{Pr}} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r \frac{\partial \theta}{\partial r} + \frac{\partial^2 \theta}{\partial z^2} \right) + \text{St} \frac{\partial f_s}{\partial t}, \quad 0 \leq r \leq r_g, \quad -z_g \leq z \leq 0, \quad (1)$$

здесь θ — температура, t — время, $\text{Pr} = \nu/a$ — число Прандтля, ν — кинематическая вязкость расплава, a — температуропроводность, u, w — компоненты вектора скорости в расплавленном металле в радиальном (r) и вертикальном (z) направлениях соответственно (в твердом металле $u \equiv 0, w \equiv 0$), $\text{St} = \kappa/(c_p T_m)$ — число Стефана, κ — удельная теплота плавления, c_p — удельная теплоемкость, f_s — доля твердой фазы в материале. Безразмерные параметры определяются с помощью характерного размера r_0 , скорости $v_0 = \nu/r_0$, времени $t_0 = r_0/v_0$ и температуры T_m : $r = r/r_0, z = z/r_0, u = u/v_0, w = w/v_0, t = t/t_0, \theta = T/T_m$.

При плавлении материала скорость v_n каждой точки границы «расплав–твердая фаза» $f(r, z, t)$ определяется условием

$$\text{St} v_n = \frac{1}{\text{Pr}} \left(\frac{\partial \theta}{\partial \mathbf{n}} \Big|_{\theta=1-} - \frac{\partial \theta}{\partial \mathbf{n}} \Big|_{\theta=1+} \right),$$

где \mathbf{n} — единичный вектор нормали.

При затвердевании предполагается, что все наночастицы являются центрами кристаллизации, тогда доля твердой фазы f_s в двухфазной зоне расплава определяется согласно [13, 16]

из соотношения $f_s = 1 - \exp\{-\Omega N_p\}$, где $\Omega(r, z, t - \xi) = \frac{4\pi}{3} \left[r_p + K_v \int_{\xi}^t (T_m - T) d\zeta \right]^3$ — объем растущего зародыша, возникшего в момент времени $t = \xi$, N_p — число наночастиц в единице объема расплава, $r_p = d_p/2$, K_v — эмпирическая константа.

Граничные условия для уравнения (1) следующие. На оси симметрии

$$\partial \theta / \partial r = 0, \quad r = 0, \quad -z_g \leq z \leq 0. \quad (2)$$

На внешней боковой границе расчетной области

$$\partial \theta / \partial r = 0, \quad r = r_g, \quad -z_g \leq z \leq 0. \quad (3)$$

На верхней границе ($z = 0$): при нагреве от источника $t \leq t_H$

$$\partial \theta / \partial z = q(r), \quad 0 \leq r \leq 1, \quad \text{и} \quad \partial \theta / \partial z = \alpha(\theta_c - \theta), \quad 1 < r \leq r_g; \quad (4)$$

после завершения импульса ($t > t_H$)

$$\partial \theta / \partial z = \alpha(\theta_c - \theta), \quad 0 \leq r \leq r_g. \quad (5)$$

На нижней границе расчетной области

$$\partial \theta / \partial r = 0, \quad 0 \leq r \leq r_g, \quad z = -z_g. \quad (6)$$

Здесь $\alpha = \alpha_0 r_0 / \lambda$, $q(r) = q_0 \exp\{-2r^2\} r_0 / (\lambda T_m)$, $\alpha_0 = \varepsilon \sigma_0 (T^2 + T_c^2)(T + T_c)$, $q(r)$ — плотность мощности теплового источника (в безразмерном виде), σ_0 — постоянная Стефана–Больцмана, λ, ε — теплопроводность и степень черноты материала подложки, q_0 — максимальная плотность мощности потока, T_c — температура окружающей среды ($\theta_c = T_c / T_m$).

При плавлении металла в области $\theta > 1$ с границей «расплав–твердая фаза» $f(r, z, t)$ течение в жидкости описывается уравнениями Навье–Стокса в приближении Буссинеска

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial r} + w \frac{\partial u}{\partial z} &= -\frac{\partial p}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r \frac{\partial u}{\partial r} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} - \frac{u}{r^2}, \\ \frac{\partial w}{\partial t} + u \frac{\partial w}{\partial r} + w \frac{\partial w}{\partial z} &= -\frac{\partial p}{\partial z} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r \frac{\partial w}{\partial r} + \frac{\partial w}{\partial z^2} + \text{Gr}(\theta - 1), \\ \frac{1}{r} \frac{\partial ru}{\partial r} + \frac{\partial w}{\partial z} &= 0. \end{aligned} \quad (7)$$

Здесь p — давление ($p = p / p_0$, $p_0 = \rho v_0^2$, ρ — плотность материала подложки), $\text{Gr} = \beta_\rho g r_0^3 T_m / \nu^2$ — число Грасгофа, g — ускорение свободного падения, β_ρ — коэффициент объемного теплового расширения расплава.

Граничные условия для уравнений (7) следующие: на поверхности «расплав–твердая фаза» $f(r, z, t)$

$$u = 0, \quad w = 0; \quad (8)$$

на оси симметрии $r = 0$, $-z_f(t) \leq z \leq 0$ ($-z_f(t)$ — координата границы фазового перехода)

$$u = 0, \quad \partial w / \partial r = 0; \quad (9)$$

на поверхности жидкости $z = 0$, $0 \leq r < r_f(t)$

$$\frac{\partial u}{\partial z} = \frac{\text{Mn}}{\text{Pr}} \frac{\partial \theta}{\partial r}, \quad w = 0, \quad (10)$$

где $r_f = r_f(t)$ — радиус лунки расплавленного металла на свободной поверхности, $\text{Mn} = [(\partial \sigma / \partial T) T_m r_0] / (\rho \nu a)$ — число Марангони, σ — поверхностное натяжение.

При численном моделировании процессов конвекции в жидких металлах и сплавах изменение поверхностного натяжения от растворенных компонентов обычно не учитывается [9]. Однако при наличии в расплаве поверхностно-активных веществ зависимость величины $\partial \sigma / \partial T$ от изменения концентрации ПАВ может быть существенной. Поэтому при описании поверхностного натяжения воспользуемся эмпирической формулой [11]

$$\sigma = \sigma_0 - k_\sigma (T - T_m) - TR \Gamma_s \ln(1 + KC_s), \quad K = S_l \exp[-\Delta H^0 / (RT)],$$

где σ_0 — поверхностное натяжение в чистом металле в точке плавления, $k_\sigma = -\partial \sigma_0 / \partial T$ — для чистого металла, R — универсальная газовая постоянная, C_s — концентрация примеси ПАВ на поверхности расплава, S_l — константа, соответствующая энтропии сегрегации, ΔH^0 — стандартная теплота адсорбции, Γ_s — избыток примеси в поверхностном слое на единицу площади. Тогда

$$\frac{\partial \sigma}{\partial T} = -k_{\sigma} - R\Gamma_s \ln(1 + KC_s) - \frac{KC_s}{1 + KC_s} \frac{\Gamma_s \Delta H^0}{T}, \quad (11)$$

из чего следует, что при $\Delta H^0 < 0$ выражение $\partial \sigma / \partial T$ может принимать значения не только меньше, но и больше нуля в зависимости от соотношения величин T и C_s .

Начальные условия для уравнения теплопереноса (1):

$$\theta = \theta_0, \quad (12)$$

для уравнений (7) в только что расплавленном металле:

$$u = 0, \quad w = 0. \quad (13)$$

Предполагается, что хорошо смачиваемые модифицирующие частицы под действием конвективных потоков проникают в глубину проплавленной лунки. Движение и распределение наночастиц в расплаве оценивалось с помощью M маркеров, начальное положение которых описывается координатами (r_m^0, z_m^0) , где $0 \leq r_m^0 \leq 1$, $z_m^0 = -r_p$, $m = 1, \dots, M$. Маркеры перемещаются в соответствии с локально осредненными скоростями в ближайшей окрестности каждого. Отметим, что результатом решения такой задачи может быть только качественная картина, так как в настоящей работе механизм взаимодействия частиц модифицирующего вещества, расположенных на поверхности подложки с расплавом, подробно не рассматривается.

Алгоритм решения задачи

При реализации модели (1)–(13), которая включает в себя уравнения Навье–Стокса и конвективного тепло- и массопереноса, применялся конечно-разностный алгоритм. Дискретизация расчетной области на $I \times K$ ячеек осуществлялась при помощи пространственной сетки вида: $r_i = \Delta x \cdot i$, $i = 0, \dots, I$, $z_k = \Delta z \cdot k$, $k = 0, \dots, K$, $\Delta r = r_g / I$, $\Delta z = z_g / K$. Для временной переменной использовалась равномерная сетка с шагом τ . Разностные уравнения строились посредством неявной аппроксимации балансных соотношений, получаемых интегрированием уравнений (1), (7) с учетом соответствующих граничных условий. При аппроксимации (7) в области расплавленного материала, по аналогии с методами типа MAC и SIMPLE [17, 18], составляющие скорости u , w определялись в серединах боковых граней ячеек, а давление p — в центрах ячеек. Распределение температуры и концентрации растворенного вещества описывалось их значениями в узлах сетки.

Алгоритм включал следующий порядок действий. Первоначально вычислялось температурное поле в подложке под влиянием энергии лазерного луча. После появления жидкой лунки на каждом временном шаге устанавливалась граница фазового перехода. Подстановка найденных значений температуры в уравнения количества движения делала возможным определение составляющих поля скоростей. Далее, с использованием метода искусственной сжимаемости [19] рассчитывалось давление. Производилось несколько итераций для согласования найденных распределений давления и скоростей до выполнения неравенства $\max |\nabla \cdot \mathbf{u}| \leq \Delta$, где Δ — заданное малое число. Решение алгебраических систем, получаемых при аппроксимации уравнений движения и тепло-массопереноса, осуществлялось итерационным методом блочной последовательной верхней релаксации [20].

С помощью соотношений $r_m^n = r_m^{n-1} + u_m^n \tau$, $z_m^n = z_m^{n-1} + v_m^n \tau$, $m = 1, \dots, M$ вычислялись новые координаты маркеров r_m^n , z_m^n на n -ом временном шаге. Здесь u_m^n , v_m^n — скорости

перемещения частиц, определяемые в соответствии с локально осредненными скоростями в ближайшей окрестности каждой из них.

После завершения лазерного импульса решение задачи продолжалось до момента полного затвердевания материала подложки. Конвективное перераспределение маркеров происходило только в расплаве, а в затвердевшей области фиксировались последние вычисленные координаты.

Результаты численных экспериментов

Численные исследования проводились при следующих параметрах: $r_0 = 0,001$ м, $z_g = 0,0006$ м, $r_g = 0,0015$ м, $t_H = 0,004$ сек, $T_c = 300$ К, $T_0 = 300$ К, $q_0 = 4 \cdot 10^8$ Вт/м². Теплофизические свойства сплава: $\rho = 7065$ кг/м³, $c_p = 787$ Дж/(кг·К), $\lambda = 27$ Вт/(м·К), $\kappa = 2,77 \cdot 10^5$ Дж/кг, $T_l = 1775$ К, $\nu = 8,5 \cdot 10^{-7}$ м²/с, $k_\sigma = 4,3 \cdot 10^{-4}$ Н/(м·К), $\beta_\rho = 1,18 \cdot 10^{-4}$ 1/К, $\varepsilon = 0,5$, $R = 8314,3$ Дж/(моль·К), $S_l = 3,18 \cdot 10^{-3}$, $\Gamma_s = 1,3 \cdot 10^{-8}$ моль/м², $\Delta H^0 = -1,88 \cdot 10^8$ Дж/моль, $K_v = 0,025$ м/(с·К), $d_p = 10^{-7}$ м, $N_p = 2,0 \cdot 10^{18}$ 1/м³ [9, 10]. Рассматриваемые концентрации серы в железе $0\% \leq C_s \leq 0,04\%$ от массы.

Безразмерные параметры, используемые в расчетах: $Pr = 0,175$, $Gr = 2,848 \cdot 10^3$, $Mn_0 = 2,62 \cdot 10^4$ (для металла без примеси серы). Вычисления проводились на пространственных сетках $I \times K$ от 120×150 до 240×300 ячеек (различие получаемых результатов не превышало 2%). Значение временного шага $\tau = 5 \cdot 10^{-6}$, $\Delta = 10^{-4}$, $M = 100$.

На рис. 1, 2 представлены результаты решений задачи при концентрациях поверхностно-активного вещества в расплаве, составляющих 0% и 0,02% по массе соответственно, и при одинаковых прочих параметрах расчетов. Эти варианты были выбраны как «худший» и «наиболее оптимальный». В случае постоянного значения $\partial\sigma/\partial T$ при $C_s = 0$ (рис. 1) было определено, что с момента подплавления подложки в области максимального воздействия теплового источника в расплаве вблизи свободной поверхности существует расходящееся от центра течение, которое у границы фазового перехода формирует интенсивный нисходящий поток. В центральной части лунки происходит восходящее движение жидкости. По мере прогрева подложки размер лунки увеличивается, ее форма и структура течения в ней сохраняются. На рис. 1, а отображено поле скоростей в расплаве в момент завершения лазерного импульса. Здесь и далее стрелки на рисунке указывают направление, а их длина характеризует интенсивность потока. Существующая структура течения приводит к тому, что модифицирующие частицы не проникают в расплав в центральной области лунки, а переносятся к фазовой границе, где с помощью нисходящего потока проникают на глубину до 30 мкм (рис. 1, б).

На рис. 2 отображены структура течения и распределение модифицирующих частиц, полученные при $C_s = 0,02\%$. Из расчетов следует, что к моменту прекращения импульса вдоль свободной поверхности жидкости имеет место существенная немонотонность

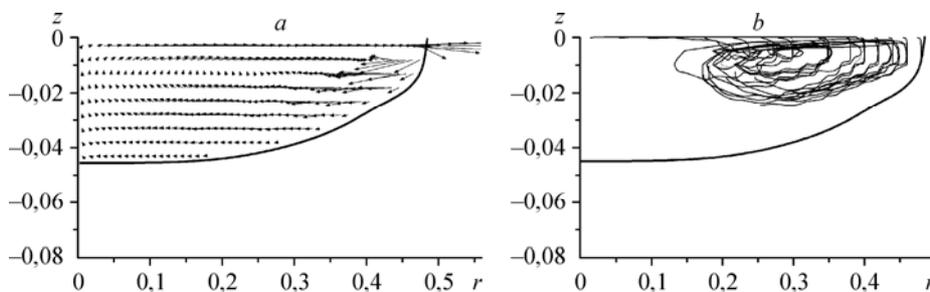


Рис. 1. Поле скоростей (а), траектории и распределение маркеров (б) в расплаве в отсутствие ПАВ.

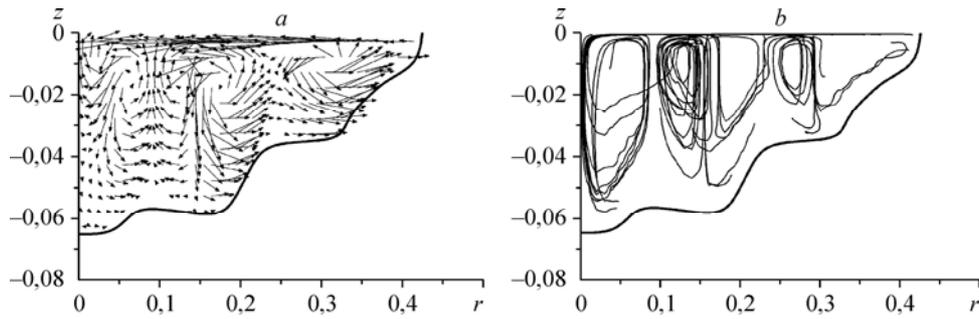


Рис. 2. Поле скоростей (а), траектории и распределение маркеров (b) в расплаве при наличии ПАВ.

параметра $\partial\sigma/\partial T$, приводящая к возникновению пяти тороидальных вихрей (рис. 2, а). Такая структура течения способствует переносу тепла вглубь расплава к границе фазового перехода, что существенно изменяет ее форму, а также гомогенному распределению модифицирующих частиц во всем объеме лунки (рис. 2, b).

В ходе численных экспериментов было определено, что при $0 < C_s \leq 0,01\%$ характер течений и распределение модифицирующих частиц существенно не меняются и остаются близкими полученным при $C_s = 0\%$. При $C_s \geq 0,03\%$ особенностью рассматриваемых вариантов является формирование приповерхностного течения, направленного от границы фазового перехода к центру системы, вследствие чего модифицирующие частицы переносятся в центральную часть лунки. Отсюда следует, что для выбранного режима разогрева существует достаточно узкий интервал изменения C_s , при котором возможна гомогенизация всего объема расплава. Однако в ходе исследований для $C_s = 0,04\%$ были получены структура течения и однородность распределения модифицирующих частиц в расплаве, подобные представленным на рис. 2 при $q_0 = 4,4 \cdot 10^8$ Вт/м², $t_H = 0,0038$ сек.

Для варианта задачи $C_s = 0,02\%$ рассмотрим процесс охлаждения и кристаллизации расплава. Полагаем, что объемная концентрация наночастиц в расплаве составляет $N_p = 2,0 \cdot 10^{18}$ 1/м³, что при их диаметре, равном 10^{-7} м, соответствует оптимальному количеству порошка $\approx 0,04\%$ по массе для модифицирования металлов [12]. За время кристаллизации (1,3 мс) распределение модифицирующих наноразмерных частиц существенно не меняется. На рис. 3 проиллюстрировано изменение температуры (см. рис. 3, а) и положение границы фазового перехода (см. рис. 3, b) вдоль оси z в подложке при $r = 0$ по завершению импульса до момента затвердевания материала. После отключения источника энергии температурные градиенты в жидкости уменьшаются,

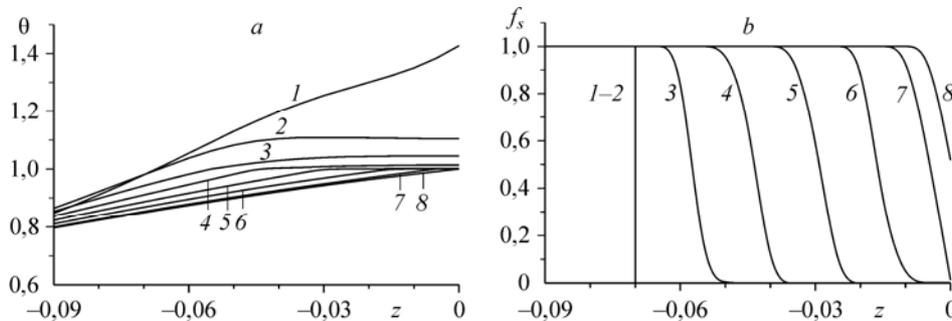


Рис. 3. Изменение температуры (а) и доли твердой фазы (b) в подложке при затвердевании расплава.

$t - t_H = 0$ (1), 0,2 (2), 0,4 (3), 0,6 (4), 0,8 (5), 1 (6), 1,2 (7), 1,26 (8) мс.

интенсивность конвекции снижается, металл остывает и затвердевает, чему способствует низкая начальная температура подложки. Отметим значительный перегрев расплава в центральной части лунки к моменту завершения импульса (рис. 3, *a*), что определяется нисходящим течением, переносящим тепло с поверхности (рис. 2, *a*). На отвод этого тепла требуется время, чем объясняется задержка в движении границы фазового перехода (рис. 3, *b*). После снятия перегрева в металле начинается объемно-последовательная кристаллизация в направлении к поверхности подложки. Толщина двухфазной зоны может достигать 10 мкм.

На рис. 4, *a* представлены изменения температуры и на рис. 4, *b* показаны доли твердой фазы в различных точках расплава на оси z при $r = 0$ от времени достижения равновесной температуры кристаллизации до момента затвердевания материала, иллюстрирующие кинетику кристаллизации.

По результатам расчетов определено, что времена метастабильного состояния, когда доля кристаллической фазы практически равна нулю, существенно отличаются при затвердевании металла в глубине жидкой лунки (0,008 мс) и на ее поверхности (0,35 мс). Переохлаждение, темп кристаллизации и время затвердевания меняются от точки максимального проплавления к свободной поверхности жидкого металла (рис. 4, *a*, *b*). Кинетика кристаллизации характеризуется наличием переохлаждения расплава при зарождении твердой фазы (рис. 4, *a*). Наибольшие значения переохлаждений определены в глубине жидкой лунки, где они достигают 1 К. На свободной поверхности расплавленной подложки переохлаждение меньше, около 0,5 К. Все эти особенности можно объяснить постепенно снижающейся скоростью охлаждения, так как тепло отводится в затвердевший разогретый металл.

Как показали численные расчеты, возможный учет гомогенного зарождения кристаллов при наличии в расплаве высокоактивированных наночастиц никак не сказывается на кинетике кристаллизации. Это связано с тем, что при реальных скоростях охлаждения необходимые условия для возникновения такого типа зародышеобразования не достигаются.

Так как в настоящей работе не рассматривается механизм взаимодействия с расплавом частиц модифицирующего вещества, расположенных на поверхности подложки, получаем качественное решение задачи. Очевидно так же, что не все наночастицы будут центрами кристаллизации, однако присутствие ПАВ в расплаве, влияющее на проникновение их большого количества на значительную глубину, может управлять процессами теплопереноса, кристаллизации и способствовать измельчению структурных составляющих затвердевшего металла для повышения его однородности.

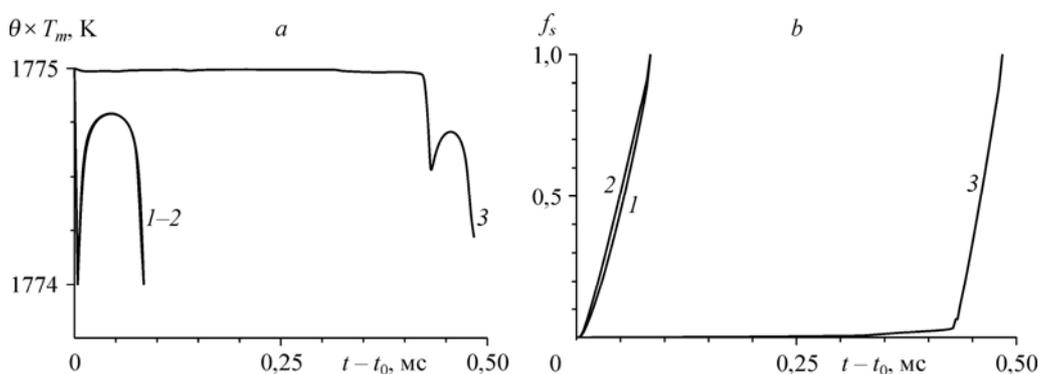


Рис. 4. Изменение температуры (*a*) и доли твердой фазы (*b*) в затвердевающем расплаве в точке максимального проплавления (1), на поверхности подложки (3) и в точке, расположенной посередине между ними (2); t_0 — время остывания металла до равновесной температуры кристаллизации в рассматриваемой точке.

Заключение

Разработана математическая модель тепло- и массопереноса в жидкометаллической ванне, образующейся при импульсном воздействии лазерного луча на твердую подложку. Исследована структура конвективных течений в расплавленном металле под действием термокапиллярных сил при наличии ПАВ в сплаве, существенно влияющего на его поверхностное натяжение. Численными расчётами показано, что небольшое содержание серы (0,02 %) в расплаве вызывает многоячеистую конвекцию, обеспечивающую гомогенное распределение наноразмерных частиц по его объему. Это создает предпосылки для формирования однородной структуры при кристаллизации и указывает на возможность управления конвективными течениями в жидком металле при лазерной сварке и поверхностной обработке деталей с помощью введенного в зону обработки вместе с модифицирующими частицами ПАВ в количестве, практически не меняющем химический состав сплава.

Список литературы

1. Вединов А.А., Гладуш Г.Г. Физические процессы при лазерной обработке материалов. М.: Энергоатомиздат, 1985. 208 с.
2. He X., Fuerschbach P.W., DebRoy T. Heat transfer and fluid flow during laser spot welding of 304 stainless steel // J. Phys. D: Appl. Phys. 2003. Vol. 36. P. 1388–1398.
3. Uglov A.A., Smurov I.Yu., Tagirov K.I., Guskov A.G. Simulation of unsteady-state thermocapillary mass transfer for laser doping of metals // Int. J. Heat Mass. Transfer. 1992. Vol. 35, No. 4. P. 783–793.
4. Smurov I., Covelli L., Tagirov K., Aksenov L. Peculiarities of pulse laser alloying: Influence of spatial distribution of the beam // J. Appl. Phys. 1992. Vol. 71, No. 7. P. 3147–3158.
5. Майоров В.С. Лазерное упрочнение металлов // Лазерные технологии обработки материалов: современные проблемы фундаментальных исследований и прикладных разработок / Под ред. В.Я. Панченко. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2009. С. 439–469.
6. Багмутов В.П., Захаров И.Н. Моделирование тепловых процессов при поверхностной обработке неоднородных металлических тел высокотемпературным движущимся импульсным источником // Вычисл. мех. сплош. сред. 2011. Т. 4, № 1. С. 5–16.
7. Гладуш Г.Г., Лиханский В.В., Лобойко А.И. Влияние поверхностно-активных веществ на тепло- и массоперенос при плавлении поверхности вещества лазерным импульсом // Квантовая электроника. 1997. Т. 24, № 3. С. 274–278.
8. Зуев А.Л., Костарев К.Г. Особенности концентрационно-капиллярной конвекции. // Успехи физических наук. 2008. Т. 178, № 10. С. 1065–1085.
9. Ehlen G., Ludwig A., Sahm P.R. Simulation of time-dependent pool shape during laser spot welding: transient effects // Metall. Mater. Trans. A. 2003. Vol. 34, No. 12. P. 2947–2961.
10. Попов В.Н., Цивинский М.Ю., Цивинская Ю.С. Численная оценка влияния поверхностно-активного вещества в расплаве на конвективный массоперенос при воздействии на металл лазерным импульсом // Математическое моделирование. 2012. Т. 24, № 3. С. 87–96.
11. Sahoo P., DebRoy T., McNallan M.J. Surface tension of binary metal-surface active solute systems under conditions relevant to welding metallurgy // Metall. Trans. B. 1988. Vol. 19, No. 3. P. 483–491.
12. Сабуров В.П., Еремин Е.Н., Черепанов А.Н., Миннеханов Г.Н. Модифицирование сталей и сплавов дисперсными инкуляторами. Омск: ОмГТУ, 2002. 212 с.
13. Cherepanov A.N., Poluboyarov V.A., Solonenko O.P., Kuz'min V.I., Lapin A.E., Korotaeva Z.A. Impact of mechanical activation and modification of initial powder with refractory nanoparticles on the properties of plasma-sprayed coatings // Progress in Plasma Processing of Materials, 2003 / Ed. by P. Fauchais. N. Y.: Begell House, Inc., 2003. P. 507–514.
14. Будаков Б.М., Соловьева Е.Н., Успенский А.Б. Разностный метод со сглаживанием коэффициентов для решения задач Стефана // Журн. вычисл. математики и матем. физики. 1965. Т. 5, № 5. С. 828–840.
15. Höche D., Müller S., Rapin G., Shinn M., Remdt E., Gubisch M., Schaaf P. Marangoni convection during free electron laser nitriding of titanium // Metall. Mater. Trans. B. 2009. Vol. 40, No. 4. P. 497–507.
16. Баландин Г.Ф. Основы теории формирования слитка. М.: Машиностроение. 1979. 335 с.
17. Harlow F.H., Welch J.E. Numerical calculation of time-depend viscous incompressible flow of fluid with free surface // Phys. Fluids. 1965. Vol. 8. P. 2182–2189.
18. Patankar S.V., Spalding D.B. A Calculation procedure for heat, mass and momentum transfer in three-dimensional parabolic flows // Int. J. Heat Mass Trans. 1972. Vol. 15. P. 1787–1806.
19. Chorin A.J. A numerical method for solving incompressible viscous flow problems // J. Comput. Phys. 1967. Vol. 2. P. 12–26.
20. Самарский А.А., Николаев Е.С. Методы решений сеточных уравнений. М.: Наука. 1978. 592 с.

*Статья поступила в редакцию 4 декабря 2012 г.,
после доработки — 19 августа 2013 г.*