

УДК 519.634

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЛАЗЕРНОГО ПЛАВЛЕНИЯ И ИСПАРЕНИЯ МНОГОСЛОЙНЫХ МАТЕРИАЛОВ¹⁾

© 2006 г. О. Н. Королева*, В. И. Мажукин**

(*111395 Москва, ул. Юности, 5/1, Московский гуманитарный ун-т;

** 125047 Москва, Миусская пл., 4А, ИММ РАН)

e-mail: immras@orc.ru

Поступила в редакцию 09.09.2005 г.

На примере лазерного переплава 3-слойной мишени Al + Ni + Cr рассматривается применение метода динамической адаптации к решению многофронтной задачи Стефана с явным выделением фронтов плавления и испарения. С помощью динамической адаптации строятся квазиравномерные расчетные сетки в областях с подвижными границами, характерные размеры которых по ходу решения меняются на несколько порядков. Алгоритм построения сеток учитывает изменяющиеся размеры области и скорости перемещения границ, что обеспечивает автоматическое распределение узлов сетки без применения подгоночных параметров. Математическое моделирование процесса легирования расплава относительно толстой подложки и тонких легирующих пленок показало, что в процессе важную роль играет последовательность нанесения покрытий. Расчеты показали, что если верхним облучаемым слоем оказывается хром, то в силу его теплофизических свойств он может к концу импульса полностью испариться или сублимировать. Ситуацию легко изменить, если легирующие слои расположить по схеме Al + Cr + Ni, согласно которой верхним облучаемым слоем окажется никель, испарение которого протекает менее эффективно. Библ. 20. Фиг. 11. Табл. 1.

Ключевые слова: динамическая адаптация, математическое моделирование, построение сеток, разностные схемы, фазовые переходы, лазерное воздействие, многослойная мишень, многофронтная задача Стефана.

1. ВВЕДЕНИЕ

Проблема лазерного переплава многослойных материалов возникает в ряде технологических операций (см. [1]). Одна из них связана с лазерным легированием алюминиевых поршневых сплавов (см. [2], [3]), поскольку улучшение эксплуатационных характеристик поршней является основной проблемой повышения ресурса работы двигателя внутреннего сгорания. Все возрастающие температуры и динамические нагрузки в процессе эксплуатации двигателя приводят к снижению прочностных характеристик поршня в основном из-за износа канавок под компрессионными кольцами. Для их упрочнения используется лазерное легирование алюминиевых поршней износостойкими сплавами, обеспечивающими повышение микротвердости, ударной вязкости, износостойкости и коррозионной стойкости металлов. Для легирования применялись металлические порошки на основе FeCuV, NiCrMo, NiCr, которые в виде обмазок наносились на поршень в зоне канавок и оплавливались лазерным излучением (CO₂ – лазер, $\lambda = 10.6$ мкм) с относительно невысокими интенсивностью $G \approx 5 \times 10^3 - 3 \times 10^4$ Вт/см² и скоростью перемещения $v \approx 0.1 - 0.5$ м/мин (см. [4], [5]). Затем в переплавленной зоне протачивается рабочая канавка. Исследования в [6], [7] показали, что наиболее эффективным является легирование порошками никеля Ni и хрома Cr. Отмечалось, что качество получаемого упрочненного слоя наряду с выбором режима лазерного воздействия зависит от последовательности расположения слоев легирующих добавок. В частности, было отмечено резкое снижение концентрации хрома, вплоть до полного исчезновения, если слой порошка хрома наносился последним.

Корректное решение подобного класса задач предполагает возможность определения таких величин, как температура поверхности, скорости распространения фазовых фронтов и толщин испаренного и расплавленного слоев. Теоретическое исследование процессов плавления и испарения в нестационарных режимах воздействия удается провести только с помощью методов математического моделирования (см. [8]).

¹⁾ Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (код проекта 04-01-00701а).

В математическом отношении рассматриваемая проблема относится к классу нелинейных задач математической физики с сильно различающимися теплофизическими характеристиками. Процессы нагрева, плавления и испарения многослойной мишени в простейшей постановке можно описать в рамках многофронтного классического варианта задачи Стефана (см. [8]). В вычислительном отношении основные особенности данной задачи связаны с наличием подвижных межфазных границ, которые в силу специфики физических процессов необходимо выделять явным образом.

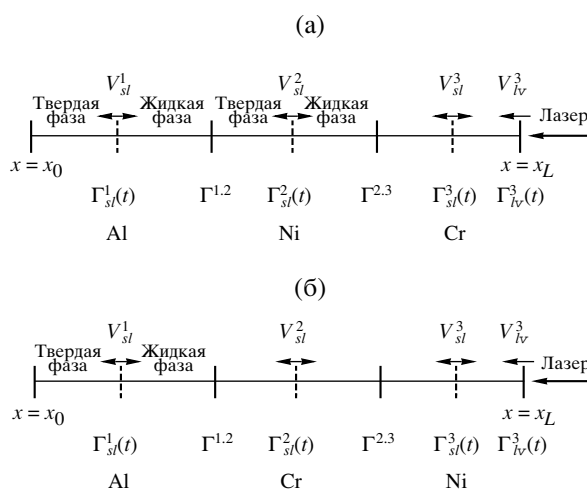
В данной работе выполнено математическое моделирование лазерного нагрева, плавления и испарения трехслойной металлической мишени с целью определения оптимальных режимов воздействия с минимальным вкладом испарения для различной последовательности нанесения легирующих слоев. Для решения использовался метод динамической адаптации (см. [8]–[10]), применение которого позволило исследовать динамику фазовых превращений в многослойной мишени. Анализ результатов моделирования позволил определить причины отсутствия хрома в переплаве в определенных режимах обработки.

2. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

В основе технологического процесса, называемого лазерным легированием, лежит явление образования поверхностных слоев с новым составом и новыми свойствами при лазерном плавлении с последующей кристаллизацией материала, предварительно покрытого соответствующим веществом. Глубина легирования зависит от режима воздействия, в первую очередь от значений интенсивности и длительности лазерного импульса. Снизу значения интенсивности при фиксированной длительности импульса ограничиваются порогом плавления, а сверху – появлением процесса развитого испарения.

Постановка задачи выполнена по упрощенной схеме, в которой основную роль играют тепловые процессы и фазовые превращения – плавление и испарение в трехслойной мишени (см. фиг. 1). Основное допущение связано с исключением из рассмотрения, в виду вычислительных сложностей, гидродинамических процессов. Лазерное излучение распространяется вдоль оси x справа налево (см. фиг. 1). Попадая на поверхность мишени, лазерный поток частично поглощается, а частично отражается. Поглощенная доля лазерного излучения зависит от состояния поверхности и характеризуется поглощательной способностью A , которая в общем случае зависит от температуры поверхности.

В зависимости от интенсивности G и длительности воздействия τ_l , лазерное излучение вызывает последовательно нагрев, плавление или испарение всех слоев мишени. Фазовые переходы I рода характеризуются наличием резкой границы раздела фаз. На фиг. 1 в точках $x = \Gamma_{sl}^n(t)$ находятся границы раздела фаз твердое тело–жидкость, в $x = \Gamma_{kv}^n(f)$, $k = s, l$, – конденсированная среда–пар и в точках $x = \Gamma^{n, n+1}$ – контактные границы, являющиеся границами раздела различных



Фиг. 1.

сред. Индексы n, s, l, v означают принадлежность, соответственно, к n -му материалу, твердой, жидкой фазам и испаренному веществу.

Для математического описания процессов в многослойных материалах при импульсном воздействии использовался совмещенный вариант задачи Стефана (см. [8]), в котором плавление–затвердевание описывается классической задачей Стефана, а испарение – в рамках однофазного варианта. В основу задачи Стефана положено нелинейное уравнение теплопроводности с соответствующими граничными условиями:

$$\left[\frac{\partial(\rho H)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \lambda(T) \frac{\partial T}{\partial x} \right]_k, \quad H = C_p(T)T, \quad k = s, l, \quad n = 1, 2, 3, \quad (1)$$

$$x_0 < x < \Gamma_{kv}(t), \quad t > 0.$$

Начальные и граничные условия. В начальный момент времени t_0 температура всех слоев полагалась равной фоновому значению T_0 :

$$t = t_0 : T(t_0, x) = T_0. \quad (2)$$

Левая граница $x = x_0$ полагалась теплоизолированной:

$$x = x_0 : \left[-\lambda(T) \frac{\partial T}{\partial x} = 0 \right]^1. \quad (3)$$

На межфазных границах плавления–затвердевания $x = \Gamma_{sl}^n(t)$ выписывались два соотношения: дифференциальное условие Стефана и непрерывность температур:

$$x = \Gamma_{sl}^n(t) : \left[\lambda_s(T) \frac{\partial T_s}{\partial x} - \lambda_l(T) \frac{\partial T_l}{\partial x} = \rho_s L_m v_{sl} \right]^n, \quad (4)$$

$$(T_{sl} = T_s = T_l = T_m)^n, \quad n = 1, 2, 3. \quad (5)$$

На контактных границах $x = \Gamma^{n, n+1}$ ставились условия идеального контакта:

$$x = \Gamma^{n, n+1} : \left[\lambda(T) \frac{\partial T}{\partial x} \right]^n = \left[\lambda(T) \frac{\partial T}{\partial x} \right]^{n+1}, \quad n = 1, 2, 3, \quad (6)$$

$$T^n = T^{n+1}. \quad (7)$$

На правой облучаемой границе $x = \Gamma_{kv}^n(t)$, $k = s, l$ поверхностное испарение описывалось в приближении кнудсеновского слоя (см. [12], [13]):

$$x = \Gamma_{kv}^n(t) : \left[\lambda_k(T) \frac{\partial T_k}{\partial x} - A(T_k)G + \rho_k L_v v_{kv} \right]^n, \quad (8)$$

$$[\rho_k v_{kv} = \rho_v (v_{kv} - u)]^n, \quad [P_k + \rho_k v_{kv}^2 = P_v + \rho_v (v_{kv} - u)^2]^n, \quad (9)$$

$$[T_v = \alpha_T(M)T_k]^n, \quad (10)$$

$$[\rho_v = \alpha_p(M)\rho_H]^n, \quad (11)$$

$$\left[\rho_H = \frac{P_H(T_k)}{RT_k} \right]^n, \quad \left[P_H(T_k) = P_b \exp \left[\left(\frac{1}{T_b} - \frac{1}{T_k} \right) \frac{L_v}{R} \right] \right]^n, \quad n = 1, 2, 3, \quad k = s, l,$$

при $M = 1$ будет $\alpha_T(M) = 0.633$, $\alpha_p(M) = 0.326$, при $M = 0$ будет $\alpha_T(M) = \alpha_p(M) = 1$, где T_k – температура конденсированной среды, $\alpha_T(M)$, $\alpha_p(M)$ – коэффициенты Крута, M – число Маха, R – газовая постоянная, ρ_H , P_H – плотность и давление насыщенного пара, $\lambda(T)$ – теплопроводность, $C_p(T)$ – теплоемкость, H – энтальпия, L_m , L_v – теплота перехода, соответственно, при плавлении и испарении, v_{sl} , v_{kv} , $k = s, l$, – скорости движения фронтов плавления–затвердевания и испарения, $A(T)$ – коэффициент поглощения, $\rho(T)$ – плотность, P – давление, u – скорость звука, T_b , T_m – температуры кипения и плавления.

3. ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ И ПАРАМЕТРЫ

Температурные зависимости плотности $\rho(T)$ и коэффициентов теплоемкости $C_p(T)$ и теплопроводности $\lambda(T)$ алюминия, хрома и никеля, используемые в расчетах, брались из справочных данных (см. [12]–[17]) и представлены на фиг. 2. Вертикальными линиями на них отмечены равновесные температуры плавления и испарения каждого из материалов. Отметим, что теплофизические характеристики всех материалов претерпевают разрыв при переходе через значение равновесной температуры плавления; кроме того, поведение теплофизических характеристик рассматриваемых материалов сильно различается с ростом температуры нагрева.

Хром и никель относятся к тяжелым металлам, плотность которых в твердой и жидкой фазах в 2–3 раза превосходит плотность алюминия: $\rho_{Ni} > \rho_{Cr} \gg \rho_{Al}$ (см. фиг. 2а). Соответственно, скорости распространения фазовых фронтов будут сильно различаться (обратно пропорционально плотности вещества).

Теплоемкости материалов (см. фиг. 2б) в твердой фазе представлены температурными зависимостями, а в жидкой – константами. Наиболее теплоемким является алюминий. При комнатной температуре его теплоемкость примерно в 2 раза превосходит теплоемкость хрома и никеля. С ростом температуры это различие уменьшается.

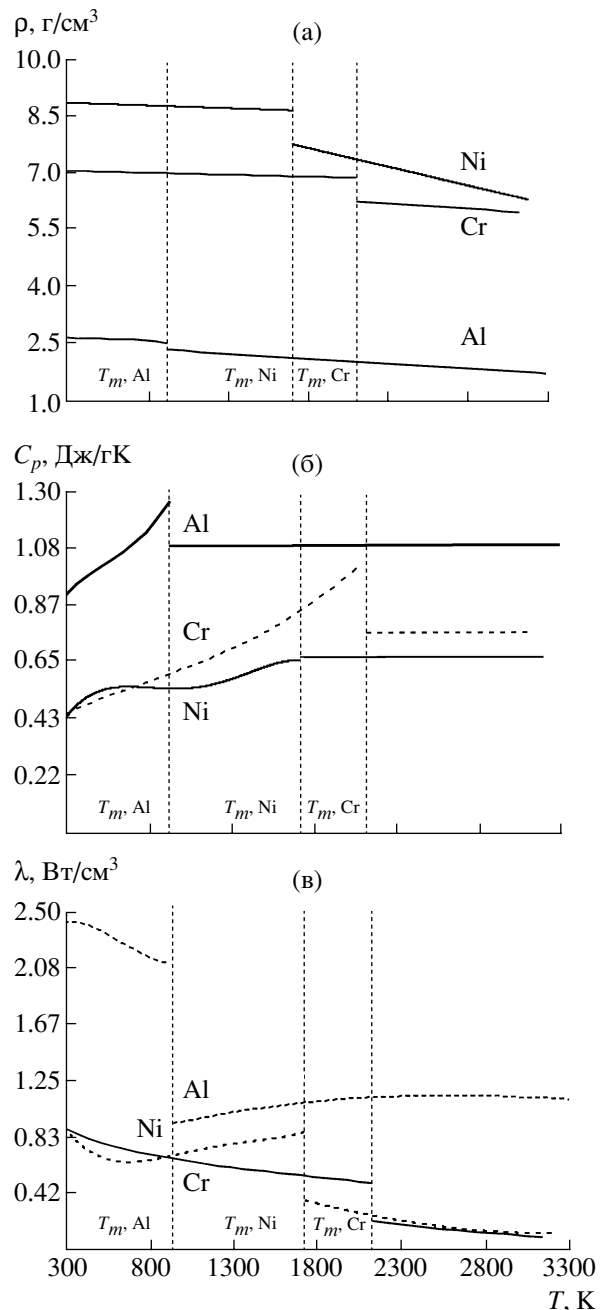
Хром и никель относятся к классу плохо теплопроводящих металлов. Их теплопроводность (см. фиг. 2в) в 2.5–4 раза ниже, чем у алюминия. Обращает на себя внимание наибольший скачок теплопроводности у алюминия (примерно в 3 раза) при переходе фазовой температуры T_m .

Одной из качественных характеристик теплофизических свойств материалов является температуропроводность $a = \lambda / C_p \rho$ (см. фиг. 3), характеризующая глубину теплового влияния и скорость теплопереноса.

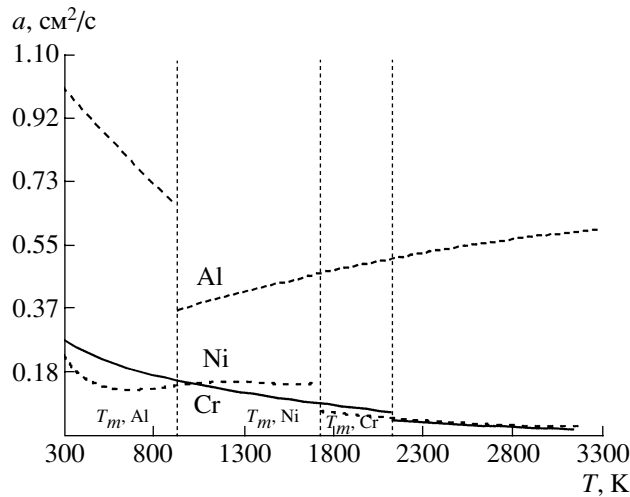
В твердой фазе температуропроводность алюминия в 3–5 раз превосходит коэффициент температуропроводности хрома и никеля. В жидкой фазе это различие достигает более чем 10-кратного значения. Таким образом, в процессе лазерного воздействия алюминий будет быстро прогреваться на большую глубину, в то время как у хрома и никеля будут разогреваться до больших температур только приповерхностные слои, что найдет свое отражение в динамике процессов плавления–затвердевания и испарения материалов многослойной мишени.

В таблице приводятся значения теплофизических параметров, характеризующие свойства рассматриваемых материалов многослойной мишени.

Из рассматриваемых материалов алюминий имеет самую низкую температуру плавления: $T_m = 933$ К, а хром является наиболее тугоплавким: $T_m = 2133$ К. Обращает на себя внимание необычно близкое расположение температур плавления и испарения (менее 40%): $T_b/T_m = 1.38$ у хрома, в то время как $T_b/T_m = 1.85$ у никеля и $T_b/T_m = 2.99$ у алюминия.



Фиг. 2.



Фиг. 3.

4. АЛГОРИТМ РЕШЕНИЯ

Для численного решения математической модели (1)–(11) использовался метод динамической адаптации (см. [9]–[11]), в основу которого положен переход к произвольной нестационарной системе координат с переменными (q, τ) , принадлежащей некоторому расчетному пространству $\Omega_{q, \tau}$. Переход к произвольной нестационарной системе координат приводит к тому, что неизвестными являются не только сеточные функции T_i^j , но и координаты узлов сетки x_i^j . Для их определения используется уравнение обратного преобразования, представляющее собой дифференциальное уравнение в частных производных. Уравнение обратного преобразования составляется таким образом, чтобы скорость движения узлов зависела от динамики решения уравнений, описывающих физические процессы.

4.1. Нестационарная произвольная система координат

Переход из физического пространства $\Omega_{x, t}$ в расчетное $\Omega_{q, \tau}$ осуществляется с помощью замены общего вида $x = \xi(q, \tau)$, $t = \tau$, имеющей обратное невырожденное преобразование $q = \varphi(x, t)$, $\tau = t$. Якобианом такого преобразования является функция $\Psi = \frac{\partial x}{\partial q}$. Частные производные зависимых переменных выражаются следующим образом (см. [8]–[11]):

$$\frac{\partial}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial \tau} + \frac{Q}{\Psi} \frac{\partial}{\partial q}, \quad \frac{\partial}{\partial x} = \frac{\rho}{\Psi} \frac{\partial}{\partial q}, \quad \frac{\partial^2}{\partial x^2} = \frac{\rho}{\Psi} \frac{\partial}{\partial q} \frac{\rho}{\Psi} \frac{\partial}{\partial q},$$

где $\frac{\partial x}{\partial \tau} = -\frac{Q}{\rho}$ – скорость движения нестационарной системы координат, Q – функция преобразования, заранее неизвестная и подлежащая определению. В контексте данной проблемы функция Q

Таблица

Элемент	A_m , г/моль	T_m , К	T_b , К	T_b/T_m	Теплота перехода	
					плавление L_m , Дж/г	кипение L_b , Дж/г
Al	26.98	933	2793	2.99	400.3	10860
Cr	52	2133	2953	1.38	313.5	6500
Ni	58.71	1728	3188	1.85	299.8	6302

имеет смысл потока вещества: $Q = -\rho v$. В новых переменных (q, τ) уравнение (1) запишется в виде

$$\left[\frac{\partial(\psi H)}{\partial \tau} = -\frac{\partial(HQ)}{\partial q} - \frac{\partial W}{\partial q} \right]_k^n, \quad H = C_p T, \quad \left[W = -\frac{\lambda(T)\rho}{\psi} \frac{\partial T}{\partial q} \right]_k^n, \quad (12)$$

$$\left[\frac{\partial \psi}{\partial \tau} = -\frac{\partial Q}{\partial q} \right]_k^n, \quad \left[\frac{\partial x}{\partial q} = \frac{\psi}{\rho} \right]_k^n, \quad (13)$$

где $q_0 < q < \Gamma_{kv}$, $\tau \geq 0$, $n = 1, 2, 3$, $k = s, l$.

В результате перехода к произвольной нестационарной системе координат исходное дифференциальное уравнение (1) трансформируется в уравнение (12) и дополняется уравнением обратного преобразования (13). После определения конкретного вида функции Q уравнение (13) используется для построения адаптирующейся сетки. Его разностный аналог описывает динамику узлов сетки, а функция Q осуществляет контролируемое движение узлов сетки, согласованное с динамикой искомого решения. Согласование достигается функциональной зависимостью функции Q от искомого решения, т.е. от функций $T(t, x)$, $v_{sl}^n(t)$, $v_{kv}^n(t)$. Правильный выбор функции преобразования Q , обеспечивающий согласованное с решением движение узлов, является важнейшим моментом в методе динамической адаптации.

Обычно для компенсации неполной согласованности искомого решения с механизмом перестройки сетки в функцию преобразования вводят подгоночные коэффициенты, подбором которых можно уменьшить степень несогласованности. В то же время наличие подгоночных коэффициентов в методе адаптации свидетельствует о его несовершенстве.

Начальные и граничные условия. Переход к произвольной нестационарной системе координат приводит к тому, что неизвестными являются не только сеточные функции T_i^j , но и координаты узлов сетки x_i^j . Для их определения в расширенной математической модели (12), (13) используется уравнение обратного преобразования (13), представляющее собой дифференциальное уравнение в частных производных.

Трансформация исходного уравнения (1) в расширенную дифференциальную систему (12), (13) требует соответствующих дополнений в граничных и начальных условиях.

Предполагалось, что переход в расчетное пространство не сопровождается деформацией исходной области и в начальный момент времени выполняются следующие условия:

$$\tau = \tau_0 : T(\tau_0, q) = T_0, \quad \psi = (\tau_0, q) = 1. \quad (14)$$

Левая граница $q = q_0$ полагалась теплоизолированной и неподвижной:

$$q = q_0 : -\lambda(T) \frac{\rho}{\psi} \frac{\partial T}{\partial q} = 0, \quad Q(\tau, q_0) = 0. \quad (15)$$

На подвижных межфазных границах плавления–затвердевания $q = \Gamma_{sl}^n$ выписывались соотношения для температуры T_{sl}^n и потока вещества Q_{sl}^n :

$$q = \Gamma_{sl}^n : (T_{sl} = T_s = T_l = T_m)^n \quad (16)$$

$$Q_{sl}^n = -\rho_s v_{sl}^n = \left\{ \left(\lambda(T) \frac{\rho}{\psi} \frac{\partial T}{\partial q} \right)_l^n - \left(\lambda(T) \frac{\rho}{\psi} \frac{\partial T}{\partial q} \right)_s^n \right\} (L_m^n)^{-1}. \quad (17)$$

На контактных границах $x = \Gamma^{n, n+1}$ условия идеального контакта (6) дополнялись условиями неподвижной границы:

$$q = \Gamma^{n, n+1} : \left[\lambda(T) \frac{\rho}{\psi} \frac{\partial T}{\partial q} \right]^n = \left[\lambda(T) \frac{\rho}{\psi} \frac{\partial T}{\partial q} \right]^{n+1}, \quad T^n = T^{n+1}, \quad (18)$$

$$Q^{n, n+1}(\tau, \Gamma^{n, n+1}) = 0.$$

На правой испаряющейся границе $q = \Gamma_{kv}^n$, $k = s, l$, использовались три закона сохранения и три

дополнительных условия на внешней границе кнудсеновского слоя:

$$q = \Gamma_{kv}^n : \left[\lambda_k(T) \frac{\rho}{\psi} \frac{\partial T_k}{\partial q} = A(T)G - L_v Q_{kv} \right]^n, \quad (19)$$

$$\left[Q_{kv} = \rho_v \left(\frac{Q_{kv}}{\rho_k} - u \right) \right]^n, \quad (20)$$

$$\left[P_k + \frac{Q_{kv}^2}{\rho_k} = P_v + \rho_v \left(-\frac{Q_{kv}}{\rho_k} - u \right)^2 \right]^n, \quad (21)$$

$$n = 1, 2, 3, \quad k = s, l, \quad T_v = \alpha_T(M)T_k, \quad \rho_v = \alpha_\rho(M)\rho_H,$$

$$\rho_H = \frac{P_H(T_k)}{RT_k}, \quad P_H(T_k) = P_b \exp \left[\left(\frac{1}{T_b} - \frac{1}{T_k} \right) \frac{L_v}{R} \right],$$

$$\text{при } M = 1, \quad \alpha_T(M) = 0.633, \quad \alpha_\rho(M) = 0.326, \quad \text{при } M = 0, \quad \alpha_T(M) = \alpha_\rho(M) = 1, \quad (22)$$

где Q_{sl} , Q_{dv} , $k = s, l$, –поток вещества через границы плавления–затвердевания и испарения.

4.2. Функция преобразования Q

Учет в функции преобразования зависимости от температуры $T(t, x)$ позволяет концентрировать узлы в области больших градиентов решения. Исходя из предположения, что высокая теплопроводность металлов не способствует формированию температурных областей с большими градиентами, можно считать доминирующей особенностью задачи Стефана наличие подвижных фазовых границ. В этом случае можно исключить зависимость Q от $T(t, x)$, а учесть только скорости распространения фазовых фронтов $v_{sl}^n(t)$, $v_{kv}^n(t)$ и строить расчетные сетки с равномерным (строго говоря, квазиравномерным) распределением узлов на каждый момент времени в областях с подвижными границами.

В методе динамической адаптации квазиравномерное распределение узлов сетки достигается с помощью квазиравномерного распределения по пространству функции ψ . Такое распределение на каждый момент времени может быть достигнуто в случае, если уравнение обратного преобразования будет являться уравнением диффузионного типа. Для этого достаточно функцию Q представить в виде (см. [8]–[11])

$$Q = -D \frac{\partial \psi}{\partial q}, \quad (23)$$

где D – свободный параметр, имеющий смысл коэффициента диффузии.

С учетом (23) уравнение обратного преобразования (13) примет вид

$$\frac{\partial \psi}{\partial \tau} = -\frac{\partial Q}{\partial q} = \frac{\partial}{\partial q} D \frac{\partial \psi}{\partial q}. \quad (24)$$

При достаточно большом значении коэффициента D любое возмущение функции ψ , возникающее на одной из границ или внутри области, будет равномерно распределяться вдоль пространственной переменной q , что после разностной аппроксимации дифференциальной модели обеспечит квазиравномерное распределение узлов сетки в физическом пространстве $\Omega_{x,t}$ на каждый момент времени.

С учетом разномасштабности геометрических размеров областей в рассматриваемой проблеме способ определения коэффициента D играет одну из наиболее важных ролей в построении адаптирующихся сеток.

4.3. Выбор коэффициента D

Рассмотрим уравнение обратного преобразования (24) в области с границами $q_0 = \Gamma_0$ и $q_r = \Gamma_r$, которым в физическом пространстве будут соответствовать подвижные границы $x_0 = \Gamma_0(t)$, $x_r = \Gamma_r(t)$, перемещающиеся со скоростями v_0 , v_r . В случае $D = \text{const}$ уравнение (24) представляет собой ли-

нейное уравнение параболического типа

$$\frac{\partial \Psi}{\partial \tau} = -\frac{\partial Q}{\partial q} = D \frac{\partial^2 \Psi}{\partial q^2} \quad (25)$$

с краевыми условиями

$$\tau = 0 : \Psi(q, 0) = \text{const}, \quad (26)$$

$$q_0 = \Gamma_0 : Q(q, \tau) = v_0, \quad (27)$$

$$q_r = \Gamma_r : Q(q, \tau) = v_r.$$

Возмущение решения $\delta\psi$ может возникать на одной или обеих границах, если v_0 и v_r будут отличны от нуля. Решение задачи (25)–(27) при достаточно большой величине коэффициента D на каждый момент времени τ будет представлять собой функцию, не зависящую от пространственной координаты q , т.е.

$$\Psi(q, \tau) = \text{const}(\tau). \quad (28)$$

Независимость функции ψ от пространственной переменной предоставляет возможность построения равномерной (строго говоря, квазиравномерной) сетки в физическом пространстве. Для достижения этой цели необходимо выбрать величину коэффициента D такой, чтобы за время Δt возмущение, возникающее на одной из границ, успевало достичь противоположной, т.е. пробежать расстояние

$$\Delta x_T = \Gamma_r(t) - \Gamma_0(t) = L(t).$$

Сложность проблемы состоит в том, что размеры области $L(t)$ с течением времени могут изменяться на несколько порядков. Так, при плавлении вещества новая зарождающаяся фаза имеет размер нескольких ангстрем, $L_0 \sim 10^{-8}$ см, а в конце процесса $L(t_{\text{end}}) \sim 10^0 - 10^1$ см (см. [8]). Соответственно, функция ψ , характеризующая динамику области, изменяется в пределах от $\psi_0 = 1$ при $t = 0$ до $\psi_{\text{end}} = 10^8 - 10^9$ при $t = t_{\text{end}}$.

Для определения коэффициента D воспользуемся линейной оценкой для параболического уравнения (25), характеризующей длину распространения возмущения от одной из границ (см. [18])

$$\Delta x_T(t) = (D\Delta t)^{1/2}, \quad (29)$$

откуда получаем

$$D = \frac{(\Delta x_T)^2}{\Delta t} = \frac{L^2(t)}{\Delta t}. \quad (30)$$

С другой стороны, за время Δt приращение области за счет подвижных границ составит величину

$$\Delta x(t) = (|v_r - v_0|)\Delta t = \Delta L(t),$$

откуда имеем

$$\Delta t = \frac{\Delta L(t)}{|v_r - v_0|}. \quad (31)$$

Используя (31), можно в соотношении (30) избавиться от Δt :

$$D = \frac{L^2(t)}{\Delta L(t)} (|v_r - v_0|). \quad (32)$$

Если подвижной является одна из границ, то, соответственно, получим

$$D = \frac{L^2(t)|v_0|}{\Delta L(t)} \quad \text{или} \quad D = \frac{L^2(t)|v_r|}{\Delta L(t)}$$

В полученных для D выражениях размеры изменяющейся во времени области $L(t)$ можно пред-

ставить в виде

$$L(t) = \Psi(t)L_0,$$

где L_0 – размер области в начальный момент времени $t = 0$. Отметим, что при $\Psi(q, 0) = t$ размеры области в расчетном и физическом пространствах совпадают, т.е. $L_0 = x_r(0) - x_0(0) = q_r - q_0$.

Динамическое приращение размеров области $\Delta x(t) = \Delta L(t)$ можно выразить через приближенное соотношение для якобиана преобразования:

$$\frac{\Delta x}{\Delta q} \cong \frac{\Psi}{\rho}, \quad \Delta x(t) = \Delta L(t) = \frac{\Psi}{\rho} \Delta q.$$

Подставляя соотношения для $L(t)$ и $\Delta L(t)$ в формулу (32), получаем окончательное выражение для коэффициента D , связывающее его величину с параметрами исходной задачи – геометрическим размером области $L(t)$ и скоростями перемещения границ v_0, v_r :

$$D = \frac{L^2(t)}{\Delta L(t)} (|v_r - v_0|) = \frac{\Psi L_0^2}{\Delta q \rho} (|v_r - v_0|). \quad (33)$$

Таким образом, исключение из рассмотрения подгоночного коэффициента D позволяет полностью автоматизировать процесс построения квазиравномерных сеток независимо от линейных размеров области определения и скорости движения границ.

4.4. Разностная аппроксимация дифференциальной модели в расчетном пространстве

В расчетном пространстве $\bar{\Omega}_{q,\tau}$ вводилась расчетная сетка с множеством узлов $(\omega_q^t)_k^n$. Множество узлов нумеровалось с помощью целых i и полуцелых $i + 1/2$ индексов. Сетка строилась с постоянным шагом h по пространственной переменной q и переменным шагом $\Delta \tau^j$ по переменной t :

$$\{\omega_q^t = [(q_i, \tau^j), (q_{i+1/2}, \tau^j), q_{i+1} = q_i + h, q_{i+1/2} = q_i + 0.5h, i = 0, 1, \dots, N-1, \\ \tau^{j+1} = \tau^j + \Delta \tau, j = 0, 1, \dots] \}_k^n.$$

В физическом пространстве $\bar{\Omega}_{x,t}$, в соответствии с сеткой $(\omega_q^t)_k^n$ вводилась расчетная сетка $(\omega_x^t)_k^n$ с множеством узлов, пронумерованных целыми (x, t^j) и полуцелыми $(x_{i+1/2}, t^j)$ индексами с постоянным шагом h_x по пространственной переменной x и переменным шагом Δt^j по переменной t :

$$\{\omega_x^t = [(x_i, t^j), (x_{i+1/2}, t^j), x_{i+1} = x_i + h_x, x_{i+1/2} = x_i + 0.5h_x, i = 0, 1, \dots, N-1, \\ t^j = t^j + \Delta t^j, j = 0, 1, \dots] \}_k^n.$$

В расчетном пространстве к целым узлам сетки (q_i, τ^j) относились потоковые величины W_i^j , Q_i^j и переменная x_i^j . К полуцелым точкам $(q_{i+1/2}, \tau^j)$ – сеточные функции $T_{i+1/2}^j$, $\rho_{i+1/2}^j$, $\Psi_{i+1/2}^j$.

Система дифференциальных уравнений (12), (13) аппроксимировалась семейством консервативных разностных схем (см. [19]):

$$\left[\frac{(\Psi H)_{i+1/2}^{j+1} - (\Psi H)_{i+1/2}^j}{\Delta \tau^{j+1}} = - \frac{(QH)_{i+1}^{j+1} - (QH)_i^j}{h_i} - \frac{W_{i+1}^{j+1} - W_i^j}{h_i} \right]_k^n, \\ \left[\frac{\Psi_{i+1/2}^{j+1} - \Psi_{i+1/2}^j}{\Delta \tau^{j+1}} = - \frac{Q_{i+1}^{j+1} - Q_i^{j+1}}{h_1} \right]_k^n,$$

$$\left[\frac{x_{i+1}^{j+1} - x_i^{j+1}}{h_1} = \frac{\Psi_{i+1/2}^{j+1}}{\rho_{i+1/2}^{j+1}} \right]^n, \quad \left[Q_i^j = -D \frac{\Psi_{i+1/2}^j - \Psi_{i-1/2}^j}{0.5(h_i + h_{i-1})} \right]_k^n, \quad (34)$$

$$\left[W_i^j = -\frac{\lambda_i^j \rho_i^j T_{i+1/2}^j - T_{i-1/2}^j}{\Psi_i^j 0.5(h_i + h_{i-1})} \right]_k^n, \quad i = 1, 2, \dots, N-1.$$

Граничные условия (14)–(22) аппроксимировались следующими конечно-разностными соотношениями:

$$\begin{aligned} q &= q_0 : W_0^j = 0, \quad Q_0^j = 0, \\ q &= \Gamma_{sl} : (T_s^j = T_s^j = T_l^j = T_m^j)^n, \quad \left(Q_{sl}^j = -\rho_s^j v_{sl}^j = \frac{W_l^j - W_s^j}{L_m} \right)^n, \\ q &= \Gamma^{n, n+1} : (W^j)^{n+1}, \quad (T^j)^n = (T^j)^{n+1}, \quad (Q^j)^{n+1} = 0 \\ q &= \Gamma_{kv}^n : \left[\lambda_i^j \frac{\rho_i^j T_{i+1/2}^j - T_{i-1/2}^j}{\Psi_i^j 0.5(h_i + h_{i-1})} = A_k^j G^j - L_v Q_{kv}^j \right]^n, \end{aligned} \quad (35)$$

$$\begin{aligned} [Q_{kv}^j = \rho_v ((\rho_k^j)^{-1} Q_{kv}^j - u^j)]^n, \quad [P_k^j + (\rho_k^j)^{-1} (Q_{kv}^j)^2 = P_v^j + \rho_v^j ((-\rho_k^j)^{-1} Q_{kv}^j - u^j)^2]^n \\ [T_v^j = \alpha_T(M) T_k^j]^n, \quad [\rho_v^j = \alpha_p(M) \rho_H^j]^n, \\ \left(\rho_H^j = \frac{P_H^j}{RT_k^j} \right)^n, \quad \left[P_H^j = P_b \exp \left[\left(\frac{1}{T_b} - \frac{1}{T_k^j} \right) \frac{L_v}{R} \right] \right]^n. \end{aligned} \quad (36)$$

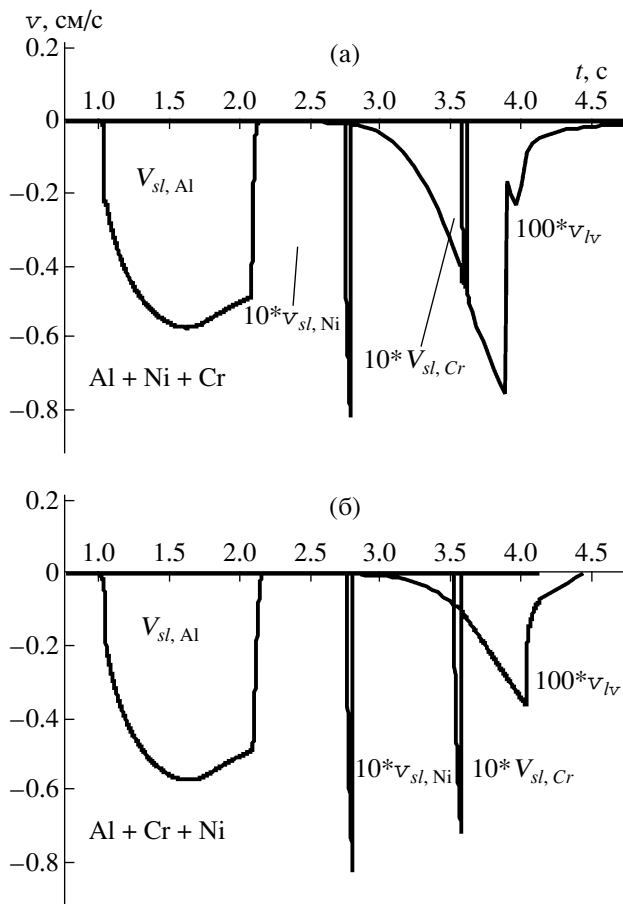
Система разностных уравнений (34), (35) линеаризовалась, а затем решалась методом раздельных прогонок с итерациями (см. [20]).

5. РЕЗУЛЬТАТЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ

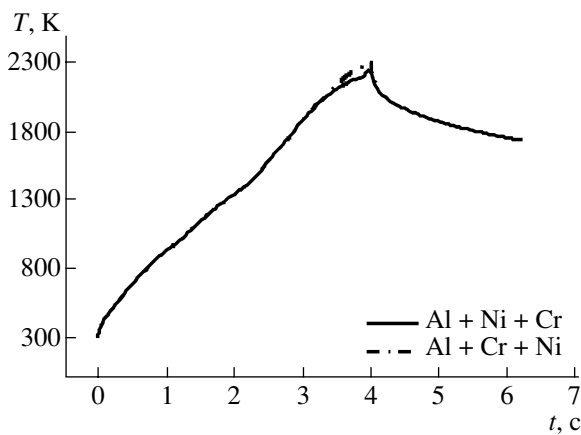
Основное внимание было уделено исследованию динамики нагрева и фазовых превращений в трехслойной мишени, состоящей из алюминиевой подложки большой толщины ($l_{Al} = 0.5-1$ см), двух тонких покрытий никеля и хрома ($l_{Ni} = l_{Cr} = 10-50$ мкм), нагреваемых лазерным импульсом большой длительности ($\tau_l = 1-5$ с) с прямоугольным временным профилем и относительно невысокими значениями интенсивности ($G = 3 \times 10^5 - 3 \times 10^4$ Вт/см²). При выборе режимов воздействия, геометрических и теплофизических параметров материалов соблюдалась корреляция с данными технологических экспериментов [6], [7]. Согласно результатам экспериментальных работ [4]–[7], подобные режимы воздействия соответствуют реализации глубокого проплава всех слоев мишени в отсутствие процесса развитого поверхностного испарения.

Рассмотрим типовой пример лазерного воздействия на трехкомпонентную мишень с толщинами слоев: $l_{Al} = 0.5$ см, $l_{Ni} = l_{Cr} = 25$ мкм. Значения длительности и интенсивности лазерного импульса задавались такими: $\tau_l = 4$ с, $G = 10^4$ Вт/см². Исследовались две ситуации плавления и испарения трехслойной мишени. В первой (см. фиг. 1а) в качестве верхнего легирующего слоя использовался хром, а во второй (см. фиг. 1б) – никель.

В обеих схемах на фиг. 1 лазерное излучение падает на поверхность верхнего покрытия и частично ею отражается. Поглощательная способность металлической поверхности полагалась независимой от температуры и равнялась $A = 0.1$, что соответствует поглощению лазерного излучения с длиной волны $\lambda_l \approx 10.6$ мкм. Поглощенная доля лазерного импульса полностью выделяется в верхнем слое, способствуя его быстрому разогреву. Второй слой и алюминиевая подложка нагреваются за счет теплопроводности. Из-за наиболее низкой среди всех материалов температуры плавления T_m алюминиевая подложка плавится первой (см. фиг. 4а). Вторым плавится никель. Хром, у которого наиболее высокая температура плавления T_m , плавится последним (фиг. 4а). Наибольший скачок теплопроводности на межфазной границе Γ_{sl} и наименьшая плотность ρ у алюминия обеспечивает ему наиболее высокую скорость плавления $v_{sl, \max} \approx 0.58$ см/с,



Фиг. 4.



Фиг. 5.

увеличением толщины легирующих слоев отодвигается лишь момент, когда достигается максимальная скорость плавления слоя алюминия.

В никеле и хrome максимальная скорость плавления зависит не только от интенсивности, но и от толщины самого слоя (см. фиг. 7, 8). При малой толщине слоя $l = 10$ мкм большая доля тепла передается ниже лежащим слоям, что сказывается на скорости плавления. Увеличение толщины до $l = 50$ мкм уменьшает тепловые потоки в слое и увеличивает скорость плавления $v_{sl, \max}$. Так, в

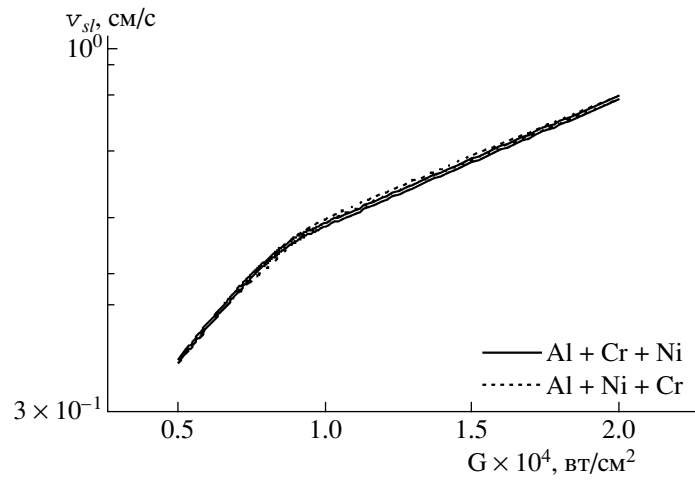
благодаря которой подложка успевает полностью расплавиться за отрезок времени $\Delta t \approx 1.2$ с значительно меньший, чем необходимо для начала плавления никеля или хрома.

В схеме на фиг. 1а, где облучаемым материалом является хром, еще до начала его плавления заметным становится, начиная примерно с $t \approx 3$ с, процесс поверхностной сублимации $v_{lv, \max} \approx 7.6 \times 10^{-3}$ см/с, т.е. испарение из твердой фазы. К моменту $t = 3.6$ с, испарившись примерно на 92.8%, хром плавится, а затем полностью испаряется из жидкой фазы незадолго до окончания импульса $t \approx 3.75$ с (см. фиг. 4а). Этот эффект не наблюдается в схеме 1б, когда верхним слоем является никель (фиг. 4б). Испарение никеля по сравнению с хромом характеризуется более поздним моментом начала $t \approx 3.5$ с и происходит с вдвое меньшей максимальной скоростью $v_{sl, \max} \approx 3.6 \times 10^{-3}$ см/с.

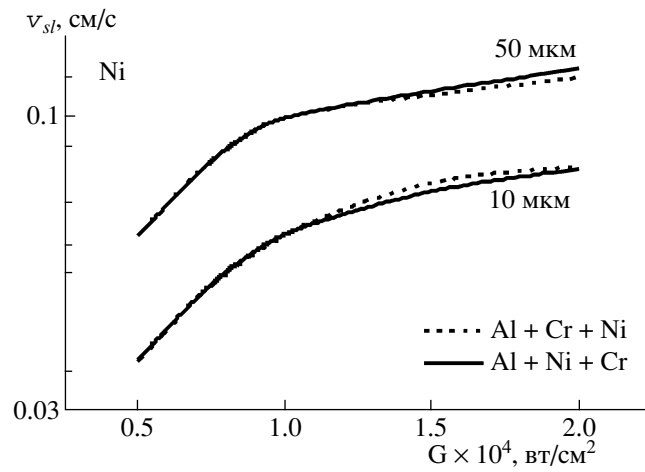
Отметим также, что, несмотря на прямоугольный профиль лазерного импульса, нагрев и фазовые превращения для обоих вариантов протекают в сугубо нестационарном режиме. На поверхности хрома максимум температуры $T_{\max} \approx 2247$ К достигается к моменту полного испарения, а у никеля – к моменту окончания лазерного импульса $T_{\max} = 2300$ К (см. фиг. 5). Из-за более высокой скорости испарения максимум температуры на поверхности хрома оказался несколько меньше, чем на поверхности никеля.

Отметим основные особенности фазовых переходов в трехслойной системе. С практической точки зрения наибольший интерес представляет нагрев и фазовые превращения в верхнем облучаемом слое. В частности, поведение верхнего слоя (в качестве которого рассматриваются как хром, так и никель) в зависимости от его толщины. Важным представляется определение диапазона интенсивности и длительности лазерных импульсов, при которых происходит полное удаление верхнего слоя.

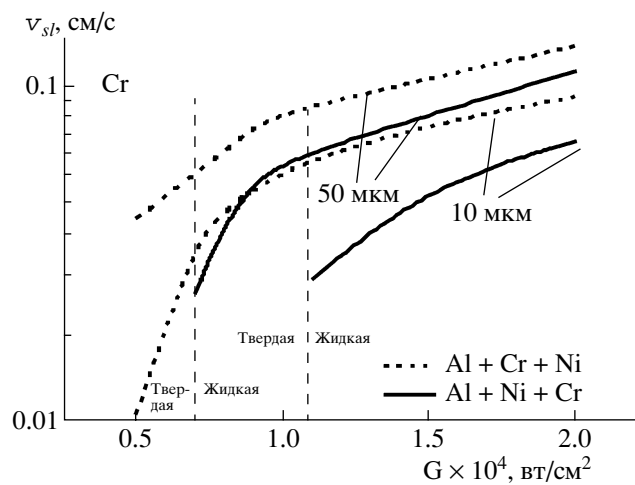
Плавление. В рассматриваемом диапазоне интенсивностей $G = 3 \times 10^5$ Вт/см²– 2×10^4 Вт/см² максимальная скорость плавления алюминиевой подложки ($l = 0.5$ см) возрастает с ростом интенсивности $v_{s, l, \max}^{\text{Al}} = 0.36$ – 0.85 см с⁻¹ и не зависит от толщины покрытий и очередности их расположения (см. фиг. 6). С



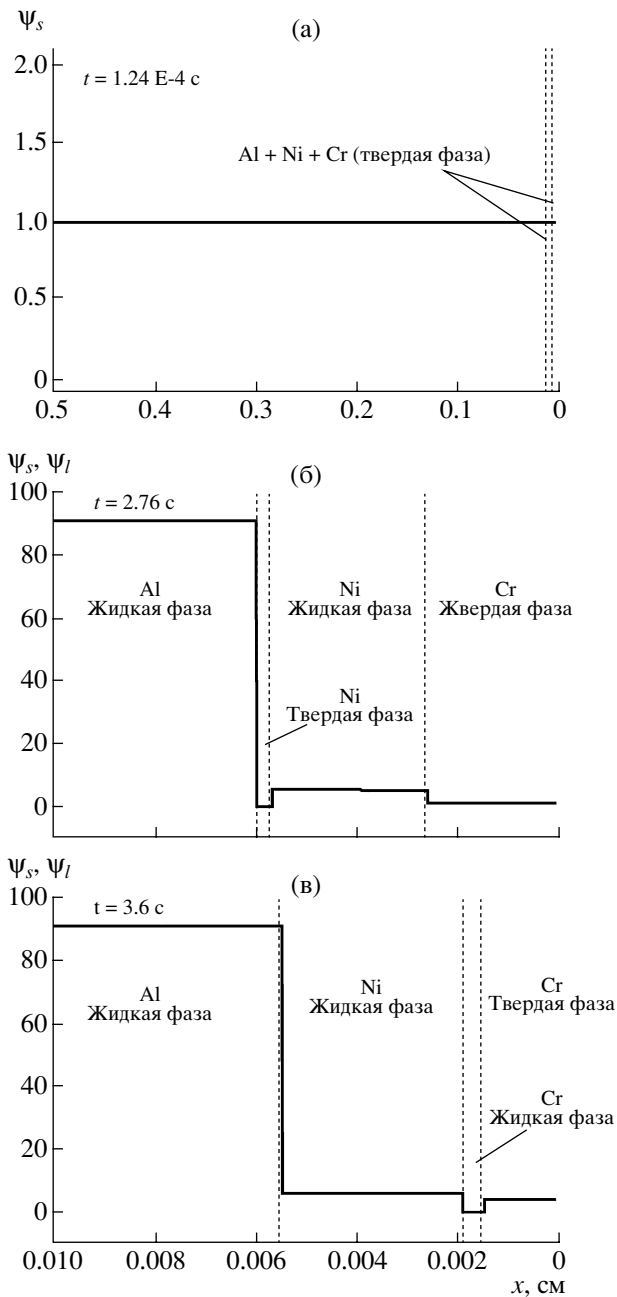
Фиг. 6.



Фиг. 7.



Фиг. 8.



Фиг. 9.

никеле $v_{sl, \max}$ возрастает в 2–3 раза (см. фиг. 7), при этом скорость плавления практически не зависит от положения слоя, т.е. не имеет значения, является ли никель верхним или нижним слоем. В пленке хрома (фиг. 8) картина качественно меняется в зависимости от расположения слоя. Если пленка хрома нанесена последней, т.е. расположена сверху, то при малых толщинах $l \sim 10$ мкм она успевает раньше испариться, чем расплавиться (см. фиг. 8).

Динамику процесса плавления каждого из слоев удобно характеризовать с помощью функций Ψ_s, Ψ_l , показывающих, во сколько раз изменяются пространственные размеры твердой и жидкой фаз под влиянием движения фронтов плавления. На фиг. 9 представлено пространственное распределение функций Ψ_s, Ψ_l на несколько моментов времени. В начальный момент $t = 0$ предполагается, что пространственные размеры физического и расчетного пространств совпадают, поэтому $\Psi_s(0, x) = 1$. Это соотношение сохраняется вплоть до начала плавления алюминия $t = 1.24 \times 10^{-4}$ (фиг. 9а), когда область твердой фазы начинает убывать $\Psi_s(t, x) < 1$ до полного исчезновения $\Psi_s(t, x) = 0$, а область жидкой фазы – возрастать до своего максимального значения $\Psi_{l, Al}(t, x) \approx 92$ (фиг. 9б). В дальнейшем функция $\Psi_{l, Al}(t, x)$ вплоть до начала кристаллизации остается неизменной, так как $v_{sl} = 0$. Здесь же на фиг. 9б показан процесс плавления никеля: $\Psi_{s, Ni}(t, x) \ll 1, \Psi_{l, Ni}(t, x) \gg 1$. Для хрома имеем $\Psi_{s, Cr}(t, x) = 1$, так как процесс плавления еще отсутствует. Распределение $\Psi_s(t, x), \Psi_l(t, x)$ на момент $t = 3.6$ с (фиг. 9в) соответствует стадии полного расплава алюминия и никеля и процессу плавления хрома, характеризующегося соотношениями $\Psi_{s, Cr}(t, x) \ll 1, \Psi_{l, Cr}(t, x) \gg 1$.

Испарение. Испарение хрома благодаря его теплофизическим параметрам протекает намного эффективнее, чем испарение никеля. На фиг. 10 представлены зависимости максимальной скорости испарения хрома и никеля, используемых в качестве верхнего слоя, от интенсивности для двух толщин $l = 10$

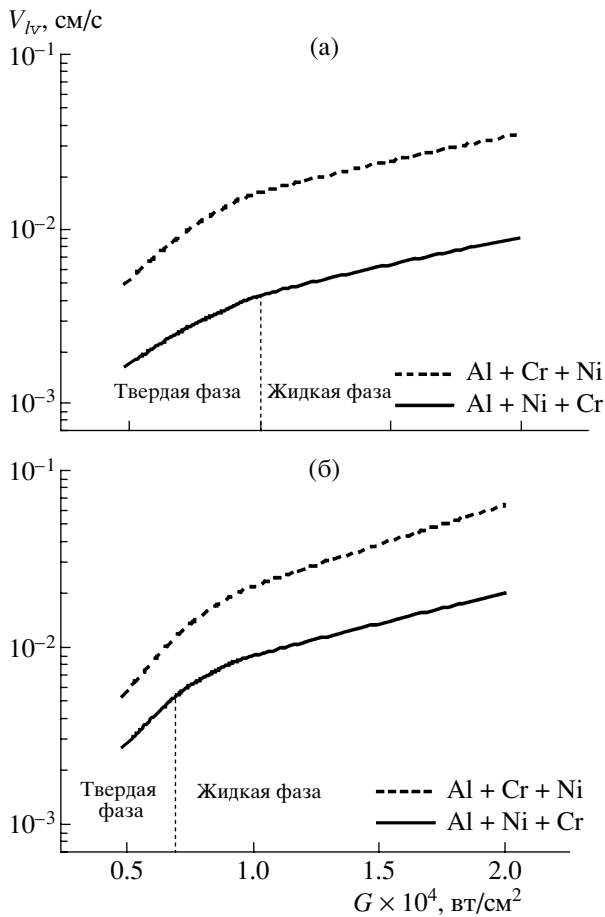
и $l = 50$ мкм, соответствующих минимальному и максимальному значениям толщин покрытий в экспериментах (см. [4]–[7]). Во всем рассматриваемом диапазоне интенсивности $G = (3–30) \times 10^3$ Вт/см² скорость испарения хрома оказалась в 3–5 раз выше, чем у никеля. Высокая скорость испарения сказывается на времени полного удаления облучаемого слоя.

На фиг. 11 приведены зависимости времени полного удаления хрома и никеля $t_v(G)$ от интенсивности для двух толщин $l = 10$ и $l = 50$ мкм.

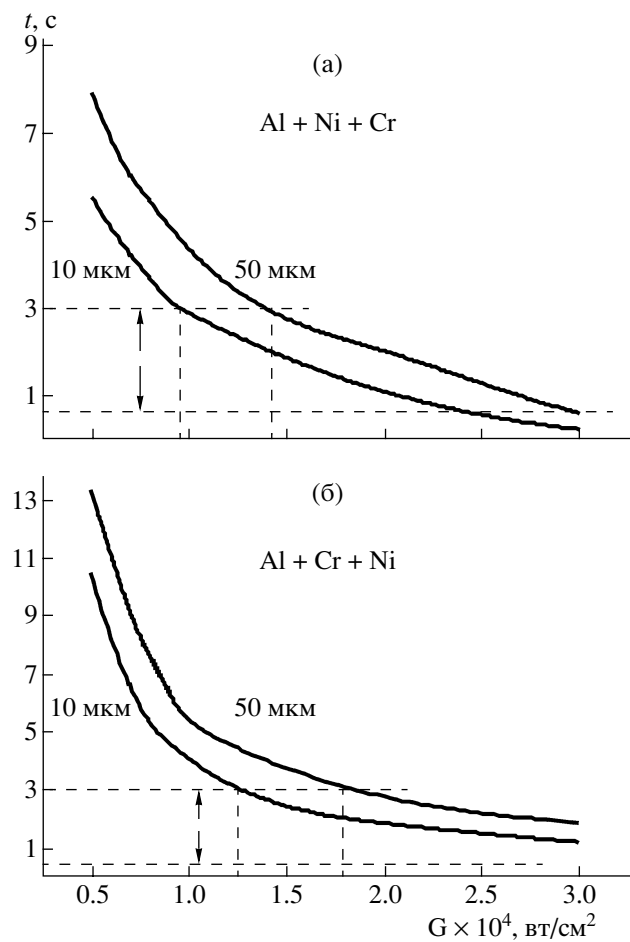
Моделирование показало, что удаление хрома длинными секундными и субсекундными импульсами может осуществляться в двух существенно различающихся режимах:

- а) при низких интенсивностях $G < 10^4$ Вт/см² в виде сублимации, т.е. испарения из твердой фазы;
- б) при более высоких интенсивностях $G \geq 10^4$ Вт/см² в виде испарения из жидкой фазы.

Для никеля основным механизмом удаления является испарение из жидкой фазы.



Фиг. 10.



Фиг. 11.

Диапазон длительности лазерного воздействия $\tau_l = 0.7-3$ с, соответствующий работам [4]–[7], на фиг. 11 выделен двумя горизонтальными пунктирными линиями. Их пересечение с кривыми $t_v(G)$ определяет диапазон значений $G(t)$, достаточных для полного удаления верхнего слоя. Для слоя хрома малой толщины $l = 10$ мкм (фиг. 10а) этот диапазон составляет $9 \times 10^3 \leq G(t) \leq 2.4 \times 10^4$ Вт/см². Увеличение толщины до $l = 50$ мкм сдвигает диапазон интенсивности в сторону повышения $1.4 \times 10^4 \leq G(t) \leq 2.9 \times 10^4$ Вт/см². Слой хрома остаются не полностью удаленными для времени воздействия $t \in [0.67-3.0]$ с, если значения интенсивности оказываются ниже пороговых: $G(t) \leq 9.0 \times 10^3$ Вт/см² для $l = 10$ мкм и $G(t) \leq 1.4 \times 10^4$ Вт/см² для $l = 50$ мкм.

На фиг. 11б представлены аналогичные результаты для никеля. Здесь картина качественно отличается. Как и в случае с хромом, для никеля существуют пороговые значения интенсивности, превышение которых также приводит к удалению слоев никеля: $G(t) \leq 1.3 \times 10^4$ Вт/см² для $l = 10$ мкм и $G(t) \leq 1.9 \times 10^4$ Вт/см² для $l = 50$ мкм. Но если слои хрома удаляются при любой длительности воздействия, то удаление никеля возможно не при любой длительности из $t \in (0.67-3.0)$ с. Слой никеля остается не полностью удаленным при $l = 10$ мкм даже при максимальной интенсивности $G \approx 3 \times 10^4$ Вт/см², если длительность воздействия окажется меньше $\tau_l \leq 1$ с и для $l = 50$ мкм составляет $\tau_l \leq 1.5$ с. Тем самым при удалении никеля с помощью вариации длительности воздействия τ_l можно покрытие сохранить даже при максимальной интенсивности, в то время как для хрома это невозможно.

Полученные соотношения могут быть учтены при построении технологических режимов нанесения многокомпонентных покрытий и их последующего переплава. В частности, целесообразно построить процесс нанесения таким образом, чтобы слой хрома не располагался наверху.

6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

1. Предложенный метод динамической адаптации позволяет проводить математическое моделирование динамики фазовых переходов в многослойных системах. Результаты рассмотренных примеров свидетельствуют о том, что нагрев трехслойной мишени и фазовые превращения в ней протекают значительно более сложным образом по сравнению с гомогенным материалом. Трехслойная система независимо от временного профиля и длительности воздействия, никогда не выходит на стационарные состояния, которые наблюдаются в гомогенных мишенях при воздействии прямоугольных импульсов соответствующей длительности.

2. Предложен способ определения коэффициента диффузии, который позволяет производить расчеты многофронтовых задач Стефана без подгоночных параметров.

3. Моделирование динамики фазовых переходов в трехслойной мишени Al + Ni + Cr показало, что высокая эффективность испарения хрома может приводить к ситуации, когда в процессе переплава одна из легирующих фракций может быть полностью удалена. Понимание данного факта позволит улучшить и обосновать технологию нанесения покрытий.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Рыкалин Н.Н., Углов А.А., Зувев И.В., Кокора А.Н. Лазерная и электронно-лучевая обработка металлов. М.: Машиностр., 1985.
2. Волгин В.И. Влияние лазерного легирования поверхности на твердость алюминиевого сплава АЛ25 // Поверхность. физ., хим., механ. 1983. № 1. С. 125–129.
3. Сафонов А.Н., Григорьянц А.Г., Макушева Н.А., Сергеев А.В. Исследование микроструктуры алюминиевых и медных сплавов после обработки непрерывным CO₂-лазером // Электронная обработка материалов. 1984. № 1. С. 26–29.
4. Дериглазова И.Ф., Левитес И.И., Мульченко Б.Ф. Лазерное легирование алюминиевых поршневых сплавов. Исследование структуры // Автомобильная пром-сть. Лазерная обработка. 1985. № 12. С. 8–10.
5. Дериглазова И.Ф., Боголюбова И.В., Мульченко Б.Ф. Исследование возможности легирования алюминиевых поршней с помощью лазерного излучения. М.: Тр. НПО “НИИТавтопром”, 1987. Вып. 2. С. 33–34.
6. Дериглазова И.Ф., Мульченко Б.Ф., Воробьев С.С. и др. Лазерное упрочнение канавок алюминиевых поршней // Автомобильная пром-сть. Технология, материалы. 1987. № 9. С. 25–26.
7. Боголюбова И.В., Дериглазова И.Ф., Мульченко Б.Ф. Лазерное поверхностное легирование сплава АЛ25 // Металловедение и термич. обработка металлов. 1988. № 5. С. 24–25.
8. Mazhukin V.I., Samarskii A.A. Mathematical modeling in the technology of laser treatments of materials. Review // Surv. Math. Ind. 1994. V. 4. P. 85–149.
9. Дарьин Н.А., Мажукин В.И. Математическое моделирование задачи Стефана на адаптивной сетке // Дифференц. ур-ния. 1987. Т. 23. № 7. С. 1154–1160.
10. Бреславский П.В., Мажукин В.И. Математическое моделирование процессов импульсного плавления и испарения металла с явным выделением фазовых границ // Инж.-физ. журнал. 1989. Т. 57. № 1. С. 107–114.
11. Mazhukin V.I., Smurov I., Dupuy C., Jeandel D. Simulation of laser induced melting and evaporation processes in superconducting ceramics // J. Numer. Heat Transfer. Part A. 1994. V. 26. P. 587–600.
12. Cheynet B., Dubois J.-D., Milesi M. Donnees thermodynamiques des elements chimiques // Techniques l'Ingenier, traite Materiaux metalliques. Strasburg: Imprimerie, 1993. P. M 64-1 – M 64-22.
13. Laurent M., Vuillermoz P.L. Conductivite Thermique des solides // Techn. de l'Ingenier, traite Constantes physico-chimiques. Strasburg: Imprimerie, 1995. P. K 420-1 – K 420-30.
14. Numerical data and functional relationships in science and technology. Vol. 6 / Ed. von H. Borchers, E. Schmidt. Berlin etc.: Springer, 1964.
15. Смилз К.Дж. Металлы. Справочник. Изд. 5-е. М.: Металлургия, 1980.
16. Физические величины. Справочник / Под ред. И.С. Григорьева, Е.З. Мейлихова. М.: Энергоатомиздат, 1991.
17. Landolt-Bornstein. Zahlenwerte und Funktionen aus Physik-Chemie-Astronomie-Geophysik und Technik. II. Band. Eigenschaften der Materie in ihren aggregatustanden, 4. Teil Kalorische zustandsgrößen / Hsg Berlin etc.: Springer, 1961.
18. Тихонов А.Н., Самарский А.А. Уравнения математической физики. М.: Изд-во МГУ, 1999.
19. Самарский А.А. Теория разностных схем. М.: Наука, 1977.
20. Самарский А.А., Николаев Е.С. Методы решения сеточных уравнений. М.: Наука, 1978.