

УДК 519.6:532.517+621.7

## ОПТИМИЗАЦИЯ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ МОДИФИЦИРУЮЩЕГО МАТЕРИАЛА ПРИ ЛАЗЕРНОЙ ОБРАБОТКЕ ПОВЕРХНОСТИ МЕТАЛЛА\*

**Попов В.Н.**, д.ф.-м.н., главный научный сотрудник (popov@itam.nsc.ru)  
**Черепанов А.Н.**, д.ф.-м.н., профессор, главный научный сотрудник (ancher@itam.nsc.ru)

Институт теоретической и прикладной механики им. С.А. Христиановича СО РАН  
(630090, Новосибирск, ул. Институтская, 4/1)

**Аннотация.** Улучшение эксплуатационных свойств деталей при лазерной обработке поверхностей может быть получено модифицированием расплава подготовленными наноразмерными частицами тугоплавких соединений (карбиды, нитриды и др.). Это позволяет увеличить количество центров кристаллизации, измельчить структуру и повысить однородность затвердевшего металла. Известно, что термокапиллярная конвекция способствует гомогенному распределению материалов, проникающих в расплавленный металл. Так же известно, что присутствие в расплаве поверхностно-активных веществ влияет на характер конвекции. Существуют данные, что структура течений в расплаве зависит от количества поверхностно-активного вещества в металле. Поэтому проводятся исследования с целью получить данные о взаимосвязи характеристик лазерной обработки металла и степени однородности распределения модифицирующих добавок. С использованием численного моделирования оценивается влияние характеристик импульсного лазерного воздействия на распределение модифицирующих частиц при наличии в металле поверхностно-активного вещества. С помощью предлагаемой математической модели рассматриваются следующие нестационарные процессы: разогрев и плавление металла, теплоперенос в расплаве, движение жидкости, зарождение и рост твердой фазы после окончания импульса. При численной реализации модели сначала решается уравнение теплопроводности. При возникновении расплавленного металла определяется граница жидкой фазы. Далее совместно решаются уравнение конвективного теплопереноса и уравнения, описывающие движение несжимаемой жидкости. После завершения лазерного импульса расчеты продолжаются до момента полного затвердевания материала подложки. Предполагается, что модифицирующие наноразмерные частицы под действием конвективных потоков проникают в глубину расплава с его поверхности. Движение и распределение частиц в жидкости моделируются с помощью маркеров. Перемещение маркеров определяется локальными скоростями расплава в окрестности каждого. По результатам численных экспериментов было определено влияние параметров импульсного лазерного воздействия на характер течения и распределение частиц в расплаве. Найдены оптимальные характеристики для плавления подложки лазерным импульсом для различных концентраций поверхностно-активного вещества в железе.

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

DOI: 10.17073/0368-0797-2017-7-505-511

Для улучшения эксплуатационных свойств поверхностей деталей широко применяется их модифицирование с помощью лазерного излучения [1 – 4]. Одним из перспективных способов решения этой задачи является модифицирование расплава наноразмерными модификаторами, состоящими из специально подготовленных частиц тугоплавких соединений (нитриды, карбонитриды и др.) [4, 5]. Такой подход позволяет увеличить количество центров кристаллизации и измельчить структурные составляющие затвердевшего металла для повышения его однородности.

Исследование процессов в поверхностном слое металла при воздействии лазерного импульса показало, что одним из главных факторов, влияющих на эффективность модифицирования, является термокапиллярная конвекция, которая может способствовать гомогенному распределению вносимых материалов,

проникающих в ходе подплавления в расплав [1, 6]. В работах [7 – 13] было рассмотрено влияние растворенных в расплаве поверхностно-активных веществ (ПАВ) на характер конвекции и определено, что структура течений в расплавленном металле зависит от количества присутствующих в нем примесей. По результатам исследований [11, 12] можно сделать вывод, что различные количества ПАВ в металле требуют различных режимов воздействия лазерного импульса для получения высокой однородности распределения модифицирующих добавок в расплаве.

Целью настоящей работы являлось исследование распределения модифицирующего материала, проникающего в металлическую подложку с ее поверхности при импульсном лазерном воздействии. Рассматривается процесс, включающий разогрев металла, его плавление, тепло- и массоперенос в расплаве и далее, после окончания импульса, зарождение и рост твердой фазы. В качестве объекта исследований используется сплав, содержащий железо, 0,42 % С, 0,005 ÷ 0,040 % S (по

\* Работа выполнена в рамках партнерского интеграционного проекта ИМАШ УрО РАН – ИТПМ СО РАН № 4 и при финансовой поддержке грантов РФФИ № 14-08-00633, № 13-01-00227.

массе). Эта система выбрана ввиду наличия в литературе теплофизических параметров и физических констант, необходимых для проведения расчетов и анализа происходящих процессов [10, 13]. С помощью математической модели [12], описывающей термо- и гидродинамические явления, анализируется характер формирующихся течений и распределение модифицирующих наноразмерных частиц в зависимости от количества поверхностно-активного вещества в металле и режимов импульсного лазерного воздействия.

Рассматривается воздействие импульсного лазерного луча с фокусным пятном радиуса  $r_0$  на металлическую подложку из сплава железа с содержанием серы, являющейся поверхностно-активным веществом (см. схему на рис. 1). Продолжительность импульса  $t_n$ ; плотность мощности потока описывается распределением Гаусса. Поверхность подложки покрыта слоем специально подготовленных модифицирующих наноразмерных частиц тугоплавкого соединения, которые могут служить активными центрами кристаллизации [5]. Под воздействием энергии лазерного импульса 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. Смачиваемые частицы под действием конвективных потоков проникают в глубину проплавленной лунки. Для расплава условия прилипания на твердом фронте кристаллизации отражают факт молекулярного сцепления между поверхностью твердого тела и вязкой жидкостью. 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 влияния 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 растворенных 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 теплоемкости [14]. Предполагается, что при рассматриваемых режимах нагрева небольшие величины конвективных скоростей обуславливают плоскую форму свободной поверхности жидкости [15].

Распределение температурного поля в твердом и жидком материале подложки описывается уравнениями конвективного теплопереноса в цилиндрической системе координат, которые для безразмерных переменных запишем в виде:

при воздействии лазерного импульса

$$c_{ef}[\theta_t + (\nabla u)\theta] = \frac{1}{Pr} \nabla^2 \theta; \quad 0 \leq r \leq r_g; \\ -z_g \leq z \leq 0; \quad 0 \leq t \leq t_n; \quad (1)$$

после завершения разогрева

$$\theta_t + (\nabla u)\theta = \frac{1}{Pr} \nabla^2 \theta + St(f_s)_t; \quad 0 \leq r \leq r_g; \\ -z_g \leq z \leq 0; \quad t > t_n, \quad (2)$$

где  $\theta$  – температура;  $t$  – время;  $Pr = \nu/a$  – число Прандтля;  $\nu$  – кинематическая вязкость расплава;  $a$  – температуропроводность;  $u$  – вектор скорости в расплавленном металле с компонентами  $u, w$  в расплавленном металле в радиальном ( $r$ ) и вертикальном ( $z$ ) направлениях соответственно (в твердом металле  $u \equiv 0, w \equiv 0$ );  $St = \frac{\kappa}{c_p T_m}$  – число Стефана;  $\kappa$  – удельная теплота плавления;  $c_p$  – удельная теплоемкость;  $f_s$  – доля твердой фазы в материале.

Эффективная теплоемкость, учитывающая скрытую теплоту фазового перехода  $\kappa$ , описывается соотношением  $c_{ef} = 1 + \delta(\theta)St$ , где  $\delta(\theta) = 1$  при  $\theta \in \left[1 - \frac{\Delta\theta}{2}, 1 + \frac{\Delta\theta}{2}\right]$

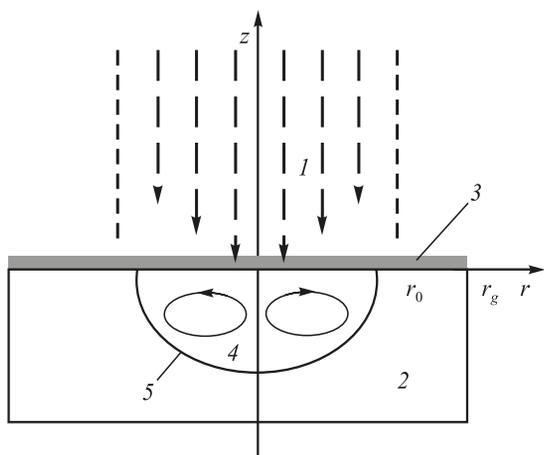


Рис. 1. Схема воздействия лазерного импульса на подложку: 1 – луч лазера; 2 – металлическая подложка; 3 – частицы модифицирующего материала на ее поверхности; 4 – расплав; 5 – граница проплавленной зоны

Fig. 1. Scheme of the action of laser pulse on the substrate: 1 – laser beam; 2 – metal substrate; 3 – particles of the modifying material on its surface; 4 – melt; 5 – boundary of the melted zone

и  $\delta(\theta) = 0$ , если  $\theta \notin \left[1 - \frac{\Delta\theta}{2}, 1 + \frac{\Delta\theta}{2}\right]$ ;  $\Delta\theta$  – температурный интервал, на котором «размазывается» фазовая граница. Безразмерные параметры определяются с помощью характерного размера  $r_0$ , скорости  $v_0 = v/r_0$ , 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  $\zeta(r, z, t)$  определяется условием

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

где  $n$  – единичный вектор нормали.

При затвердевании предполагается, что все наночастицы являются центрами кристаллизации, тогда доля твердой фазы  $f_s$  в двухфазной зоне расплава определяется согласно работ [16, 17] 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 рас-

тущего 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 уравнений (1) и (2) следующие:

– на оси симметрии:

$$\frac{\partial\theta}{\partial r} = 0; \quad r = 0; \quad -z_g \leq z \leq 0;$$

– на внешней боковой границе расчетной области

$$\frac{\partial\theta}{\partial r} = 0; \quad r = r_g; \quad -z_g \leq z \leq 0;$$

– на верхней границе ( $z = 0$ ):

при нагреве от источника  $t \leq t_H$

$$\frac{\partial\theta}{\partial z} = q(r); \quad 0 \leq r \leq 1; \quad \frac{\partial\theta}{\partial z} = \alpha(\theta_c - \theta); \quad 1 \leq r \leq r_g;$$

после завершения импульса ( $t > t_H$ )

$$\frac{\partial\theta}{\partial z} = \alpha(\theta_c - \theta); \quad 0 \leq r \leq r_g;$$

– на нижней границе расчетной области

$$\frac{\partial\theta}{\partial z} = 0; \quad 0 \leq r \leq r_g; \quad z = -z_g,$$

где  $\alpha = \frac{\alpha_0 r_0}{\lambda}$ ;  $q(r) = \frac{[q_0 \exp(-2r^2)] r_0}{\lambda T_m}$ ;  $\alpha_0 = \varepsilon \sigma_0 (T^2 + T_c^2) \times (T + T_c)$ ;  $q(r)$  – плотность мощности теплового источ-

ника (в безразмерном виде);  $\sigma_0$  – постоянная Стефана-Больцмана;  $\lambda$  и  $\varepsilon$  – 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  $\zeta(r, z, t)$  течение в жидкости описывается уравнениями Навье-Стокса в приближении Буссинеска

$$u_t + (\nabla u)u = -\nabla p + \nabla^2 u + k\text{Gr}(\theta - 1); \quad \nabla u = 0, \quad (3)$$

где  $p = p/p_0$  – давление;  $p_0 = \rho v_0^2$ ;  $\rho$  – плотность материала подложки;  $\text{Gr} = \beta_p g r_0^3 \frac{T_m}{v^2}$  – число Грасгофа;  $g$  – ускорение свободного падения;  $\beta_p$  – коэффициент объемного теплового расширения расплава;  $k$  – единичный вектор вдоль координатной оси  $z$ .

Граничные условия для уравнений (3) следующие: – на поверхности расплав – твердая фаза  $\zeta(r, z, t)$

$$u = 0; \quad w = 0;$$

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

$$u = 0; \quad \frac{\partial w}{\partial r} = 0;$$

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

$$\frac{\partial u}{\partial z} = \frac{\text{Mn}}{\text{Pr}} \frac{\partial\theta}{\partial r} \eta; \quad w = 0,$$

где  $r_f < r_f(t)$  – радиус лунки расплавленного металла на свободной поверхности;  $\text{Mn}$  – число Марангони.

При наличии в расплаве поверхностно-активных веществ для описания поверхностного натяжения используется эмпирическая формула [13]

$$\sigma = \sigma_0 - k_\sigma (T - T_m) - TR\Gamma_s \ln(1 + KC_s), \\ K = S_l \exp\left(-\frac{\Delta H^\circ}{RT}\right),$$

где  $\sigma_0$  – поверхностное натяжение в чистом металле в точке плавления;  $k_\sigma = -\frac{\partial\sigma}{\partial T}$  – для чистого металла;  $R$  – универсальная газовая постоянная;  $C_s$  – концентрация примеси ПАВ на поверхности расплава;  $S_l$  – константа, соответствующая энтропии сегрегации;  $\Delta H^\circ$  – стандартная теплота адсорбции;  $\Gamma_s$  – избыток примеси в поверхностном слое на единицу площади.

Тогда

$$\frac{\partial\sigma}{\partial T} = -k_\sigma - R\Gamma_s \ln(1 + KC_s) - \frac{KC_s}{1 + KC_s} \frac{\Gamma_s \Delta H^\circ}{T}, \quad (4)$$

откуда определяются число Марангони  $Mn = -\frac{k_{\sigma} T_m r_0}{\rho \nu a}$  и

$$\eta = 1 + \frac{R \Gamma_s \ln(1 + KC_s)}{k_{\sigma}} + \frac{KC_s}{1 + KC_s} \frac{\Gamma_s \Delta H^{\circ}}{T k_{\sigma}}$$

Начальные условия для уравнения теплопереноса (1)

$$\theta = \theta_0,$$

для уравнения (3) в только что расплавленном металле

$$u = 0; w = 0.$$

Предполагается, что хорошо смачиваемые модифицирующие наноразмерные частицы под действием конвективных потоков проникают в глубину проплавленной лунки. Движение и распределение наночастиц в расплаве оценивали с помощью  $M$  маркеров, начальное положение которых описывается координатами  $(r_m^0, z_m^0)$ ,  $0 \leq r_m^0 \leq 1$ ,  $z_m^0 = -r_p$ ,  $m = 1, \dots, M$ . Маркеры перемещаются в соответствии с локально осредненными скоростями в ближайшей окрестности каждого. Конвективное перераспределение маркеров происходило только в расплаве, а в затвердевшей области фиксировали последние вычисленные координаты.

При реализации модели, которая включает в себя уравнения Навье-Стокса и конвективного теплопереноса, применяли конечно-разностный алгоритм. Для аппроксимации уравнений в расчетной области использовали равномерную пространственную сетку, которая разбивает расчетную область на ячейки. Вдоль временной переменной используется постоянный шаг. Разностные уравнения строили посредством аппроксимации балансных соотношений, получаемых интегрированием исходных уравнений с использованием соответствующих граничных условий. При аппроксимации уравнений Навье-Стокса в области расплавленного материала по аналогии с методами типа MAC и SIMPLE [18, 19] составляющие скоростей определяли в серединах боковых граней ячеек, а давление рассчитывали в центрах ячеек. Распределение температуры в расчетной области описывается значениями в узлах сетки.

Порядок проведения расчетов следующий. Первоначально рассчитывается разогрев подложки под влиянием энергии лазерного луча. После появления жидкой лунки на каждом временном шаге вычисляется температурное поле и определяется граница фазового перехода. Подстановка рассчитанных значений температуры в уравнения количества движения делает возможным определение составляющих поля скоростей. Для вычисления давления используется метод искусственной сжимаемости [20]. Проводится несколько итераций по согласованию распределения давления и скоростей. В завершение вычисляется положение маркеров в расплаве. После завершения лазерного импульса расчеты

продолжаются до момента полного затвердевания материала подложки.

Численные исследования проводили при параметрах:  $r_0 = 0,001$  м;  $z_g = 0,0006$  м;  $r_g = 0,0015$  м;  $t_n = 2 \div 10$  мс;  $T_c = 300$  К;  $T_0 = 300$  К;  $q_0 = (2 \div 6) \cdot 10^8$  Вт/м<sup>2</sup>. Теплофизические свойства сплава:  $\rho = 7065$  кг/м<sup>3</sup>;  $c_p = 787$  Дж/(кг·К);  $\lambda = 27$  Вт/(м·К);  $\kappa = 2,77 \cdot 10^5$  Дж/кг;  $T_l = 1775$  К;  $\nu = 8,5 \cdot 10^{-7}$  м<sup>2</sup>/с;  $k_{\sigma} = 4,3 \cdot 10^{-4}$  Н/(м·К);  $\beta_p = 1,18 \cdot 10^{-4}$  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/м<sup>2</sup>;  $\Delta H^{\circ} = -1,88 \cdot 10^8$  Дж/моль;  $K_v = 0,025$  м/(с·К);  $d_p = 10^{-7}$  м;  $N_p = 2,0 \cdot 10^{18}$  1/м<sup>3</sup> [10, 13]; концентрация серы в металле  $C_s = 0,005 \div 0,040$  % (по массе).

На рис. 2, 3 в безразмерных координатах в части расчетной области, прилегающей к зоне расплавленного металла, отображены структура течения и распределение модифицирующих частиц при концентрации поверхностно-активного вещества в расплаве 0,01 % (по массе) при различных характеристиках лазерного импульса. Рис. 2 иллюстрирует результаты, полученные при  $q_0 = 4 \cdot 10^8$  Вт/м<sup>2</sup>,  $t_n = 4$  мс. Рис. 2, а отображает поле скоростей в расплаве в момент завершения лазерного импульса (здесь и далее стрелки на рисунке указывают направление, а их длина характеризует интенсивность потока). Из расчетов определено, что к моменту прекращения лазерного импульса в лунке образуется два тороидальных вихря. В расплаве вблизи свободной поверхности в центральной области лунки существует расходящееся течение. Наряду с этим незначительный перегрев на периферии лунки формирует встречное

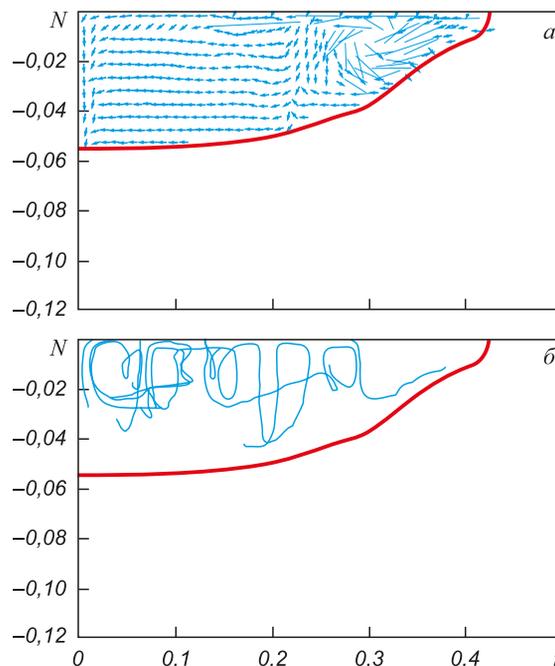


Рис. 2. Поле скоростей (а), а также траектории и распределение маркеров (б) в расплаве при  $q_0 = 4 \cdot 10^8$  Вт/м<sup>2</sup>,  $t_n = 4$  мс

Fig. 2. Field of velocities (a), trajectories and markers distribution (b) in the melt at  $q_0 = 4 \cdot 10^8$  W/m<sup>2</sup>,  $t_n = 4$  ms

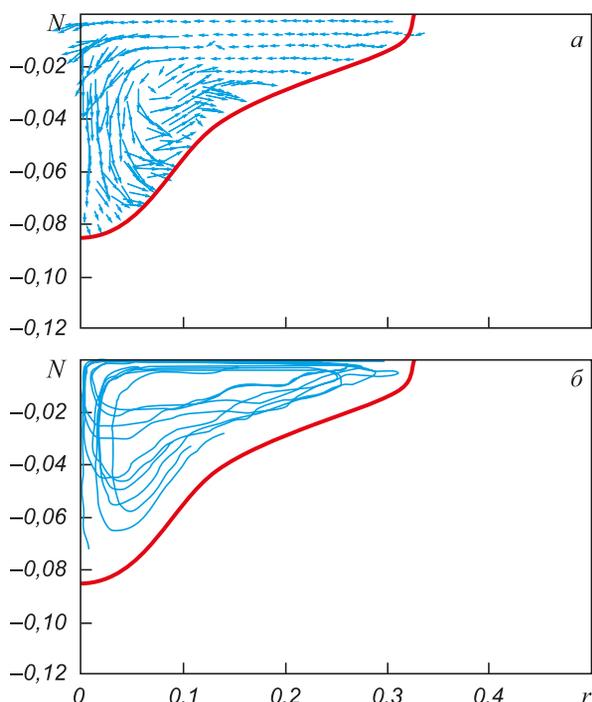


Рис. 3. Поле скоростей (а), а также траектории и распределение маркеров (б) в расплаве при  $q_0 = 2,5 \cdot 10^8 \text{ Вт/м}^2$ ,  $t_n = 8 \text{ мс}$

Fig. 3. Field of velocities (a), trajectories and markers distribution (b) in the melt at  $q_0 = 2.5 \cdot 10^8 \text{ W/m}^2$ ,  $t_n = 8 \text{ ms}$

интенсивное течение от границы фазового перехода к центру (рис. 2, а). Их столкновение образует нисходящий поток, который способствует проникновению модифицирующих частиц в глубь расплава (рис. 2, б). Восходящие движения жидкости в центральной и периферийной частях лунки препятствуют проникновению модифицирующей добавки в глубь расплава. Схожая структура движения жидкости существует некоторое время до завершения импульса, что иллюстрируют представленные траектории движения маркеров.

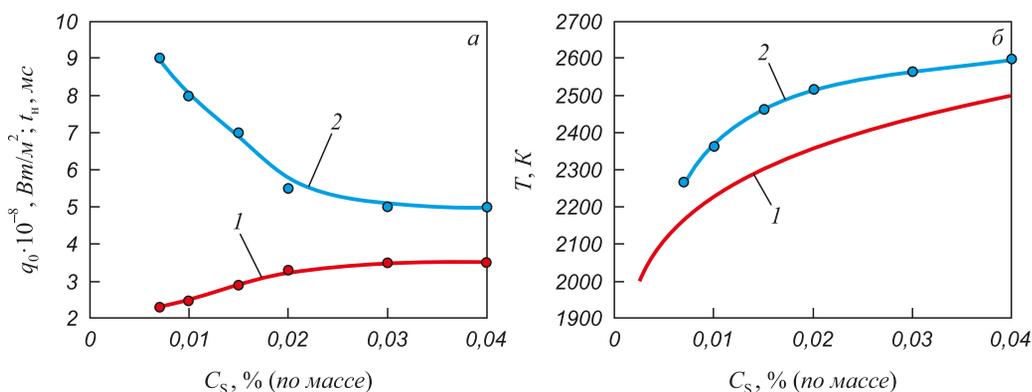


Рис. 4. Значения мощности потока  $q_0$  и продолжительности импульса  $t_n$  (а), оценочные и расчетные максимальные значения температур расплава (б) при различных концентрациях ПАВ в металле для получения однородного распределения наночастиц:

● – вычисленные значения

Fig. 4. Values of the flux power  $q_0$  and the pulse duration  $t_n$  (a), estimated and calculated maximum melt temperatures (b) at different surfactant concentrations in the metal to obtain homogeneous distribution of the nanoparticles:

● – calculated values

Рис. 3 иллюстрирует результаты, полученные при  $q_0 = 2,5 \cdot 10^8 \text{ Вт/м}^2$ ,  $t_n = 8 \text{ мс}$ . Из представленных данных следует, что при таких параметрах разогрева к моменту прекращения импульса в расплаве формируется только один вихрь с направлением течения вблизи свободной поверхности жидкости от границы фазового перехода к центру лунки с сильным нисходящим потоком в этой области (рис. 3, а). Это приводит к тому, что модифицирующие частицы увлекаются течением и проникают в центральной части лунки в глубь расплава, а затем расходящимся потоком с высокой равномерностью распределяются по всему его объему (рис. 3, б).

В ходе численных экспериментов было определено, что при различных ( $0,005 \% < C_s \leq 0,040 \%$ ) концентрациях поверхностно-активного вещества в расплаве существуют режимы воздействия лазерного импульса для получения структуры течения и наиболее однородного распределения наноразмерных частиц в расплаве, совпадающие с представленными на рис. 3. На рис. 4, а представлены кривые, иллюстрирующие предельные значения максимальной плотности мощности потока  $q_0$  (1) и продолжительности лазерного импульса  $t_n$  (2) для различных концентраций ПАВ, определенные по результатам расчетов. В случае увеличения продолжительности импульса для представленных мощностей потока в расплаве возникают несколько тороидальных вихрей, распределение вводимых частиц может быть не достаточно гомогенным. Схожий результат получается при увеличении мощности потока для установленных величин  $t_n$ .

Из анализа результатов расчетов и формулы (4) следует, что для различных концентраций ПАВ в металле можно определить максимальные температуры разогрева свободной поверхности расплава, при которых вблизи нее формируется устойчивое течение с направлением от границы фазового перехода к центру лунки. Кривая 1 (рис. 4, б) иллюстрирует рассчитан-

ные значения температур по формуле (4). Однако при решении рассматриваемой в настоящей работе задачи определено, что максимальные значения температур на поверхности центральной части расплава могут превышать теоретические на величину до 150 К (рис. 4, б, кривая 2) при сохранении устойчивости течения от периферии лунки к центру. Это объясняется тем, что при Гауссовом распределении плотности мощности потока имеет место сравнительно небольшая область перегрева, в которой не удается сформироваться встречному течению.

После отключения источника энергии интенсивность конвекции снижается, так как температурные градиенты в жидкости уменьшаются, металл остывает, чему способствует низкая начальная температура подложки. После снятия перегрева в расплаве начинается объемно-последовательная кристаллизация в направлении к поверхности подложки, продолжающаяся 0,5 – 1,5 мс, ширина двухфазной зоны не превышает 10 мкм. По результатам численных расчетов определено, что гомогенное зарождение кристаллов при наличии в расплаве высокоактивированных наночастиц никак не сказывается на кинетике кристаллизации, так как при реальных скоростях охлаждения необходимые условия для возникновения такого типа зародышеобразования не достигаются.

Очевидно, что не все наноразмерные частицы будут центрами кристаллизации, однако определение режимов обработки, зависящих от присутствия ПАВ в расплаве, может способствовать проникновению значительного их количества в глубину расплава, что приведет к измельчению структурных составляющих затвердевшего металла и повышению его однородности. Необходимо отметить, что, так как не рассматривается механизм взаимодействия с расплавом частиц модифицирующего вещества, расположенных на поверхности подложки, получены качественные оценки процесса.

**Выводы.** В результате численного моделирования показано, что при изменении продолжительности и мощности потока импульса при наличии в жидком металле ПАВ можно формировать различные структуры течения, способствуя более однородному распределению модифицирующих частиц. Поверхностно-активные вещества, являясь компонентами расплава, существенно влияют на процессы модифицирования. При повышении качества поверхностного слоя металла необходимо принимать во внимание его состав, выбирая с учетом этого режимы обработки.

#### БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Майоров В.С. Лазерное упрочнение металлов. – В кн.: Лазерные технологии обработки материалов: современные проблемы фундаментальных исследований и прикладных разработок / Под ред. В.Я. Панченко. – М.: Физматлит, 2009. С. 439 – 469.
2. Веденов А.А., Гладуш Г.Г. Физические процессы при лазерной обработке материалов. – М.: Энергоатомиздат, 1985. – 208 с.
3. 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.
4. Montealegre M.A., Castro G., Rey P. etc. Surface treatments by laser technology // Contemporary Materials. 2010. Vol. 1 (1). P. 19 – 30.
5. Плазмохимический синтез ультрадисперсных порошков и их применение для модифицирования металлов и сплавов / В.П. Сабуров, А.Н. Черепанов, М.Ф. Жуков и др. – Новосибирск: Наука. Сибирская издательская фирма РАН, 1995. – 344 с.
6. Зуев А.Л., Костарев К.Г. Особенности концентрационно-капиллярной конвекции // Успехи физических наук. 2008. Т. 178. № 10. С. 1065 – 1085.
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. Ribic B., Tsukamoto S., Rai R., DebRoy T. Role of surface active elements during keyhole mode laser welding // Journal of Physics D: Applied Physics. 2011. Vol. 44 (48). Article 485203.
9. Seyhan I., Egry I. The surface tension of undercooled binary iron and nickel alloys and the effect of oxygen on the surface tension of Fe and Ni // International Journal of Thermophysics. 1999. Vol. 20. No. 4. P. 1017 – 1028.
10. Ehlen G., Ludwig A., Sahn P.R. Simulation of time-dependent pool shape during laser spot welding: transient effects // Metall. Mater. Trans. A. 2003. Vol. 34A. P. 2947 – 2961.
11. 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.
12. Попов В.Н., Черепанов А.Н., Дроздов В.О. Моделирование конвективного тепло-массопереноса при лазерной обработке металла с использованием модифицирующих материалов // Изв. вуз. Черная металлургия. 2013. № 12. С. 3 – 7.
13. 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. 19B. P. 483 – 491.
14. Будак Б.М., Соловьева Е.Н., Успенский А.Б. Разностный метод со сглаживанием коэффициентов для решения задач Стефана // Журнал вычислительной математики и математической физики. 1965. Т. 5. № 5. С. 828 – 840.
15. Höche D., Müller S., Rapin G. etc. 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. Колмогоров А.Н. К статистической теории кристаллизации металлов // Известия АН СССР. Сер. математическая. 1937. Вып. 3. С. 355 – 359.
18. Harlow F.H., Welch J.E. Numerical calculation of time-dependent viscous incompressible flow of fluid with free surface // Phys. Fluids. 1965. Vol. 8. P. 2182 – 2189.
19. 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.
20. Chorin A.J. A numerical method for solving incompressible viscous flow problems // J. Comput. Phys. 1967. Vol. 2. P. 12 – 26.

Поступила 2 февраля 2017 г.

## OPTIMIZATION OF MODIFYING MATERIAL DISTRIBUTION DURING LASER PROCESSING OF THE METAL SURFACE

V.N. Popov, A.N. Cherepanov

Institute of Theoretical and Applied Mechanics named after S. Christianovich, Russia, Novosibirsk

**Abstract.** The improvement of operational properties of metal parts during the laser surface treatment can be obtained by modifying the melt with the prepared nano-sized particles of refractory compounds (carbides, nitrides, and others.). It allows the number of crystallization centers to be increased, the structure to be grinded and the uniformity of the solidified metal to be raised. It is known that thermocapillary convection promotes the homogeneous distribution of materials penetrating into the molten metal. It is also known that the presence of surface-active substances in the melt influences the character of convection. There is evidence that the structure of flow in the melt depends on the amount of surface-active substances in the metal. Therefore, the studies were conducted to obtain data on the relationship of characteristics of metal processing by laser and the uniformity degree of modifying additives distribution. Using the numerical modeling the effects of characteristics of pulsing laser action on allocation of modifying particles are estimated at the presence of surface-active substance in metal. With the help of mathematical proposed model the following non-stationary processes are considered: heating and melting of the metal, heat transfer in the melt, fluid motion, nucleation and growth of the solid phase after termination of the pulse. During the numerical realization of the model the heat conduction equation was firstly solved. Upon appearance of molten metal the boundary of the liquid phase was determined. Further the coupled equations of convective heat transfer and motion of an incompressible fluid were solved. After the laser pulse termination, the calculations are continued until the complete solidification of the substrate material is achieved. It was supposed that modifying nano-sized particles under the influence of convective flows penetrate into depth of a melt from its surface. The movement and distribution of particles in a fluid was modeled using markers. The movement of the markers was determined by the local velocity of the melt. According to the results of numerical experiments, the effect of the parameters of pulsed laser action on the nature of the flow and distribution of the particles in the melt were determined. Optimum parameters for the melting of the metal substrate by a laser pulse are proposed for various surface-active substances concentrations.

**Keywords:** modification, impulse laser radiation, convective heat and mass transfer, nano-sized refractory particles, numerical simulation.

DOI: 10.17073/0368-0797-2017-7-505-511

### REFERENCES

1. Maiorov V.S. Laser hardening of metals. In: *Lazernye tekhnologii obrabotki materialov: sovremennye problemy fundamental'nykh issledovaniy i prikladnykh razrabotok* [Laser technologies of material processing: modern problems of fundamental research and applied developments]. Panchenko V.Ya. ed. Moscow: Fizmatlit, 2009, pp. 439–469. (In Russ.).
2. Vedenov A.A., Gladush G.G. *Fizicheskie protsessy pri lazernoi obrabotke materialov* [Physical processes in the laser treatment of materials]. Moscow: Energoatomizdat, 1985, 208 p. (In Russ.).
3. 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, pp. 1388–1398.
4. Montealegre M.A., Castro G., Rey P., Arias J.L., Vázquez P., González M. Surface treatments by laser technology. *Contemporary Materials*. 2010, vol. 1 (1), pp. 19–30.
5. Saburov V.P., Cherepanov A.N., Zhukov M.F. etc. *Plazmokhimicheskii sintez ul'tradispersnykh poroshkov i ikh primeneniye dlya modifitsirovaniya metallov i splavov* [Plasma-chemical synthesis of ultradisperse powders and their application for the modification of metals and alloys]. Novosibirsk: Nauka, Sibirskaya izdatel'skaya firma RAN, 1995, 344 p. (In Russ.).
6. Zuev A.L., Kostarev K.G. Certain peculiarities of solutocapillary convection. *Physics-Uspeski*. 2008, vol. 51, no. 10, pp. 1027–1045.
7. Gladush G.G., Likhanskii V.V., Loboiko A.I. Influence of surfactants on heat and mass transfer in melting of the surface of a substance by a laser pulse. *Quantum Electronics*. 1997, vol. 24, no. 3, pp. 268–272.
8. Ribic B., Tsukamoto S., Rai R., DebRoy T. Role of surface active elements during keyhole mode laser welding. *Journal of Physics D: Applied Physics*. 2011, vol. 44 (48), article 485203.
9. Seyhan I., Egry I. The surface tension of undercooled binary iron and nickel alloys and the effect of oxygen on the surface tension of Fe and Ni. *International Journal of Thermophysics*. 1999, vol. 20, no. 4, pp. 1017–1028.
10. 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. 34A, pp. 2947–2961.
11. Popov V.N., Tsivinskii M.Yu., Tsivinskaya Yu.S. Numerical evaluation of the contribution of a surface-active substance in melt to convective mass transfer caused by pulsed laser action on metal. *Mathematical Models and Computer Simulations*. 2012, vol. 4, no. 5, pp. 527–533.
12. Popov V.N., Cherepanov A.N., Drozdov V.O. The modeling of convective heat and mass transfer in laser metal processing with the use of modifier materials. *Izvestiya VUZov. Chernaya metallurgiya = Izvestiya. Ferrous Metallurgy*. 2013, no. 12, pp. 3–7. (In Russ.).
13. 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. 19B, pp. 483–491.
14. Budak B.M., Solov'eva E.N., Uspenskii A.B. A difference method with smoothing of the coefficients for the solution of Stefan's tasks. *Zhurnal vychislitel'noi matematiki i matematicheskoi fiziki*. 1965, vol. 5, no. 5, pp. 828–840. (In Russ.).
15. Höche D., Müller S., Rapin G. etc. Marangoni convection during free electron laser nitriding of titanium. *Metall. Mater. Trans. B*. 2009, vol. 40, no. 4, pp. 497–507.
16. Balandin G.F. *Osnovy teorii formirovaniya slitka* [Basics of the theory of ingot formation]. Moscow: Mashinostroenie, 1979, 335 p. (In Russ.).
17. Kolmogorov A.N. To the statistical theory of metals crystallization. *Izvestiya AN SSSR. Ser. matematicheskaya*. 1937, no. 3, pp. 355–359. (In Russ.).
18. Harlow F.H., Welch J.E. Numerical calculation of time-depend viscous incompressible flow of fluid with free surface. *Phys. Fluids*. 1965, vol. 8, pp. 2182–2189.
19. 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, pp. 1787–1806.
20. Chorin A.J. A numerical method for solving incompressible viscous flow problems. *J. Comput. Phys.* 1967, vol. 2, pp. 12–26.

**Acknowledgements.** The work was performed within the framework of the partner integration project IMASh UrB RAS – ITAM SB RAS No. 4 and with the financial support of RFBR grants No. 14-08-00633, No. 13-01-00227.

### Information about the authors:

V.N. Popov, Dr. Sci. (Phys.-Math.), Chief Researcher  
(popov@itam.nsc.ru)

A.N. Cherepanov, Dr. Sci. (Phys.-Math.), Professor, Chief Researcher  
(ancher@itam.nsc.ru)

Received September 2, 2017