УДК 620.178.15 DOI: 10.20310/1810-0198-2016-21-1-165-170

МОДЕЛИРОВАНИЕ КОМПЛЕКСА ПРОЦЕССОВ, ПРОТЕКАЮЩИХ В ПОВЕРХНОСТНЫХ СЛОЯХ НАНОСТРУКТУРНОГО МНОГОКОМПОНЕНТНОГО МЕТАЛЛИЧЕСКОГО СПЛАВА ПОД ДЕЙСТВИЕМ ЛАЗЕРНЫХ ИМПУЛЬСОВ

© И.В. Ушаков, А.Ю. Батомункуев

Методами компьютерного моделирования рассмотрены процессы прогрева и охлаждения тонкого металлического образца под действием серии наносекундных лазерных импульсов. Выявлены области прогрева, в которых возможен запуск процессов структурной релаксации, кристаллизации и рекристаллизации аморфно-нанокристаллического материала. Обсужден механизм избирательного лазерного воздействия на дефектные области. Показана возможность инициирования разрушений в областях концентрации механических напряжений и последующих их залечиваний при лазерном прогреве. Значительное повышение механических свойств обусловлено тем, что глубина обработанного слоя достигает 20–25 % от общей толщины образца.

Ключевые слова: селективная лазерная обработка; компьютерное моделирование; упрочнение; наноструктурные материалы; лазерный нагрев материала.

Обзор современных научных работ в области лазерного управления процессами в твердых многокомпонентных материалах показывает, что данное и смежные направления исследований являются актуальными и привлекают внимание многих исследователей.

При селективной лазерной обработке образцов (полученных в порошковой металлургии) излучение воздействует на материал с микрозеренной структурой [1–3].

В случае аморфных сплавов, которые контролируемым отжигом переводятся в нанокристаллическое состояние, полученная нанозеренная структура обрабатывается лазерным излучением [4–7]. Материалы, используемые в работах [1–7], отличаются составом, размером зерен, толщиной. Отличаются параметры лазерного излучения. Но в отмеченных работах общей является идея селективного лазерного воздействия на отдельные области нано- или микромасштаба.

Селективное лазерное плавление, используемое авторами работ [1–3], фактически является лазерным управлением процессами в твердых материалах. Селективное лазерное управление процессом аддитивного производства с использованием цифровых данных 3D САD-модели использовали для создания трехмерных изделий за счет послойного плавления специального порошка лазерным излучением. В этом случае предварительно нанесенный на образец порошок (подложка или предыдущий слой) будет плавиться избирательно в зависимости от режимов обработки.

Наблюдается аналогия между технологиями лазерного формирования свойств поверхности наноструктурных материалов и лазерными технологиями создания защитных покрытий в порошковой металлургии.

Избирательное лазерное плавление материала характеризуется малой областью термического воздействия, а также высокими скоростями нагрева и охлажде-

ния материала. Это способствует формированию специфической структуры. Следует учитывать, что ряд процессов, происходящих в обрабатываемом материале и приводящих к эволюции структуры и свойств, начинаются задолго до плавления. Соответственно критическую плотность мощности лазерного излучения для данного материала можно подобрать экспериментально. Иногда при критической плотности мощности начинается плавление материала, хотя, учитывая многокомпонентный состав обсуждаемых материалов, это не всегда верно. Действительно, отдельные кристаллиты могут отличаться химическим составом и структурой. Соответственно, они будут плавиться при разных температурах. При разных температурах в них будут протекать процессы релаксации механических напряжений, аннигиляции дислокаций и пр.

В ходе анализа процессов, протекающих в наноструктурном материале при воздействии лазерного излучения, необходимо учитывать изменение оптических свойств поверхности, специфику передачи энергии сплаву, а также процессы, происходящие при лазерном испарении.

Однако новые работы в области селективного лазерного воздействия на твердые многокомпонентные материалы, демонстрируя перспективы нового подхода, являются преимущественно экспериментальными. Дальнейшее развитие предложенных подходов требует анализа физических процессов, протекающих в материалах под действием лазерных импульсов. Протекание этих процессов во многом определяется температурными режимами в твердом материале. Таким образом, целью данной работы является выявление методами компьютерного моделирования специфики процессов нагрева и охлаждения в поверхностных слоях наноструктурного многокомпонентного металлического сплава под действием лазерных импульсов.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Воздействие лазерного излучения на материал приводит к его нагреву, затем плавлению поверхностного слоя и испарению части материала. При достаточной плотности мощности и энергии лазерных импульсов возможно возникновение плазменного факела. Однако и в этом случае большая часть энергии не проникает вглубь непрозрачного металлического сплава образца, а отражается. При некоторых режимах лазерной обработки может сложиться динамическое равновесие, когда плазма экранирует образец от лазерного излучения, проплавляет и испаряет слой материала. Происходит формирование расплавленного слоя определенной толщины, под которым находится слой прогретого материала. Толщина этого слоя и характер его прогрева после достижения динамического равновесия существенно меняться не будут. Эти представления позволяют упростить компьютерную модель прогрева и охлаждения материала.

Данная работа посвящена моделированию процессов, происходящих в аморфно-нанокристаллическом сплаве при воздействии лазерного излучения. Для построения модели используются экспериментальные данные, полученные в ряде работ [4–5; 7]. Часть результатов модельного эксперимента была проверена с использованием материалов и технологий, указанных в работах [5].

Кратко опишем исходные данные, которые использовали при составлении модели. Использовали аморфно-нанокристаллический материал, полученный контролируемой кристаллизацией из аморфной ленты марки 82К3ХСР (Со_{71.66}B_{4,73}Fe_{3.38}Cr_{3.14}Si_{17.09}). Лазерные импульсы генерируются оптическим квантовым генератором ELS-01 со следующими характеристиками v_{имп} до 50 Гц, $\lambda = 1064$ нм, $E_{имп}$ 50–100 мДж, $\tau \approx 15$ –20 нс. Плотность мощности варьировали от 3·10¹² до 3·10¹⁴ Вт/м². Большую часть образцов облучали импульсами с плотностью мощности 9·10¹³ Вт/м².

Экспериментально установлено, что при оптическом пробое возникает над поверхностью образца плазма. Более подробно характеристики материала, методики его подготовки и параметры лазерных установок описаны в [5–6].

В этом случае можно не анализировать процесс нагрева верхнего слоя материала лазерным излучением. Можно не учитывать процесс плавления материала, его испарения и формирования лазерной плазмы. При составлении модели анализируем только процессы прогрева после возникновения плазменного факела. Данное упрощение существенно облегчает моделирование и не приводит к сильным искажениям результатов.

С использованием численных методов определена специфика прогрева и остывания образца тонкой пленки многокомпонентного аморфно-нанокристаллического металлического сплава при обработке серией лазерных импульсов длительностью 15–20 нс.

Составленная модель необходима для оценки глубины прогревания образца в зависимости от времени обработки, количества импульсов и других факторов. Это особенно важно для класса наноструктурных многокомпонентных сплавов, т. к. они находятся в неравновесном состоянии, а учитывая их малую толщину (20–40 мкм), можно ожидать, что воздействие серии лазерных импульсов может запустить процесс структурных превращений.

На рис. 1 показаны результаты расчета прогрева образца при помощи изотермических линий. Выделены особенности изменения температур со временем. С увеличением времени обработки зоны повышенных температур проникают вглубь образца.



Рис. 1. Распределение температур в зависимости от времени при обработке образца: а) через 1 мкс; б) через 5 мкс (нижняя изотерма достигает глубины 2,7·10⁻⁶ м при температуре в 650 К); в) через 10 мкс; г) через 50 мкс. Рис. 1г приведен с примерным указанием температур изотерм и соответствующих интервалов на рис. 2



Рис. 2. Распределение температур в образце. Выделенные зоны температур: 1 – 1150 К; 2 – 925 К; 3 – 650 К; 4 – 375 К (0,05 мс после начала нагрева)

При составлении модели учитываются свойства материала и подложки, на которой размещен образец. Также на термические процессы влияет окружающая среда, с которой также происходит теплообмен.

При анализе кинетики протекания процессов нагревания и остывания сделаны различные допущения. При моделировании нагрева учитывается внешний фактор – окружающая среда, т. к. большая часть полученной от импульса энергии рассеивается из-за образования плазмы. А в модели остывания не учитываются внешние факторы, а только свойства образца и подложки.

Для модели заданы начальные условия, которые основаны на литературных данных, экспериментальных результатах и параметрах лазерной обработки (табл. 1).

На рис. 1а показаны изотермы прогрева поверхности образца через ($5 \cdot 10^{-6}$ с) 5 мкс после образования плазменного факела. Поверхность образца нагрета до 1300 К. Нижняя изотерма достигает наибольшей глубины в 1,8·10⁻⁶ м под центральной частью области облучения. Температура нижней изотермы отмеченной на рисунке изотермы достигает 650 К.

Дальнейшее изменение характера расположения изотерм показано на рис. 1в-г. Все рис. 1а-г соответствуют прогреву образца после прекращения подвода энергии, т. к. лазерная плазма существует 200 нс.

Глубина расположения нижней изотермы 6·10⁻⁷ м, что примерно соответствует 1/5 толщины образца. Тем-

Таблица 1

Основные параметры лазерной обработки

Время существования	$1,8 \cdot 10^{-7}$		
плазмы, с			
Время импульса, с	$2 \cdot 10^{-8}$		
Частота следования	20		
импульса, Гц	20		
Диаметр зоны	25 10^{-5}		
воздействия, м	23.10		
Размеры образца, м	$1,5 \cdot 10^{-3} - 2,5 \cdot 10^{-3} - 0,03 \cdot 10^{-3}$		
Площадь облучения	1.8.10 ⁻⁷		
лазером, м ²	1,8.10		
Диаметр, м	$4,8 \cdot 10^{-4}$		
Температура нагрева	2000		
образца, К	3000		

пература нижней изотермы 650 К. Этой температуры, по многочисленным экспериментальным и расчетным данным, достаточно как для инициирования процессов структурной релаксации (в аморфном материале), так и для запуска процессов кристаллизации/рекристаллизации. Хотя для их реализации требуется не только достаточно высокая температура, но и достаточное время. Последний аспект обсужден в следующей части работы. Помимо температуры на образец действует шоковое давление порядка 100 КБар. Давление инициируется плазмой и распространяется в виде ударной волны вглубь образца. Ударная волна такой мощности должна вызывать упругие и пластические деформации. Аморфно-нанокристаллические сплавы, как правило, очень твердые и очень хрупкие. Экспериментально установлена возможность резкого возрастания коэффициента микропластичности после такой лазерной обработки.

В зависимости от условий лазерной обработки могут конкурировать два процесса: процесс распространения ударной волны в прогретом материале (первый вариант); распространение ударной волны в холодном материале, с последующим прогревом (второй вариант).

В первом случае ударная волна будет стимулировать процессы пластической деформации и релаксации напряжений вблизи концентраторов механических напряжений. Концентраторами напряжений могут выступать трещины и зародыши трещин, скопления дислокаций в кристаллитах (отдельные кристаллиты могут иметь размеры, значительно превосходящие средний размер), отдельные участки межзеренных областей и пр. Результатом будет не только релаксация напряжений, но и ряд сложных процессов, подробно обсужденных в [6].

Второй процесс будет заключаться в прохождении ударной волны через непрогретый материал. В этом случае следует ожидать инициирования наноразрушений и деформации, которые будут быстро залечиваться/релаксироваться при прогреве образца.

В обоих случаях будет наблюдаться повышение пластических свойств при сохранении высокой микротвердости, связанной с существованием нанокристаллического состояния образцов.

Видно, что на глубине 2,3·10⁻⁵ м температура прогрева уже недостаточная для запуска механизмов структурной релаксации, рекристаллизации. Пластическое деформирование также оказывается сильно затрудненным, что проверялось экспериментально при индентировании образцов при температурах 350–370 К.

Расчеты показывают среднее значение скорости прогрева – 0,006 м/с, в то время как скорость распространения ударной волны ≈5500 м/с. То есть при однократном импульсе реализуется первый вариант воздействия и упрочнения материала.

Результаты воздействия различаются при воздействии одного импульса и при воздействии серии лазерных импульсов, т. к. образец успевает прогреться.

Полученные результаты находят экспериментальное подтверждение. В частности, при использованных режимах лазерной обработки наблюдается повышение пластичности и микротвердости. Наибольший интерес имеют случаи одновременного возрастания микротвердости в 1,5–2 раза и 2–3-кратного возрастания пластичности (коэффициента вязкости микроразрушения) [6].

Таблица 2

Номер импульса	Средняя глубина нагрева, ×10 ⁻⁵ м			
	при <i>t</i> = 1150	при <i>t</i> = 925	при <i>t</i> = 650	
Ι	0,095	0,216	0,296	
II	0,101	0,254	0,378	
III	0,121	0,269	0,465	
IV	0,143	0,332	0,549	
V	0,154	0,377	0,636	
VI	0,162	0,423	0,723	
VII	0,178	0,461	0,811	
VII	0,196	0,513	0,903	
IX	0,214	0,558	0,998	
X	0,233	0,599	1,087	

Глубина прогрева образца в зависимости от номера импульса. Второй столбец – глубина расположения изотермы 1150 К, третий – 925 К, четвертый – 650 К

Таблица 3

Температура прогрева образца в зависимости от импульса

Номер импульса	Средняя температура образец/подложка					
	0,1 мс	1 мс	10 мс	25 мс	40 мс	
Ι	355	336	310	305	304	
II	359	341	324	317	309	
III	363	358	337	329	315	
IV	367	359	339	336	321	
V	375	364	348	344	328	
VI	379	373	359	351	332	
VII	381	378	364	358	336	
VII	383	379	367	361	339	
IX	391	386	372	365	347	
Х	398	391	379	367	353	



Рис. 3. Распределение температур после обработки материала (остывание): а) 0,05 мс; б) 0,1 мс; в) 2,5 мс; г) 25 мс. 1 – зона образования расплава; 2 – образец; 3 – подложка

В табл. 2 и 3 показаны изменения температуры прогрева, полученные при моделировании.

На рис. 3 показаны изотермы остывающего образца. Из полученных данных, очевидно, следует, что температура нагрева в центре образца и на границе с подложкой при облучении серией из 10 импульсов никогда не достигает значений, достаточных для рекристаллизации или активации процессов пластической деформации.

В то же время практически в три раза – с $0.215 \cdot 10^{-5}$ до $0.599 \cdot 10^{-5}$ м – возрастает глубина прогрева до температур активации процессов рекристаллиазции, пластической деформации и залечивания.

выводы

 Полученная компьютерная модель в целом адекватно отражает протекающие в материале физические процессы, что подтверждается результатами экспериментов.

 Выявлен действующий механизм селективного воздействия лазерного излучения на дефектные области. Механизм заключается в инициировании разрушений в дефектных областях с их последующим полным или частичным залечиванием при прохождении волны прогрева.

 Обработка тонких образцов аморфно-нанокристаллического металлического сплава серией импульсов лазерного излучения наносекундной длительности с плотностью мощности ≈9·10¹³ Вт/м² создает условия для избирательного воздействия на отдельные дефектные области.

4. Воздействие серии лазерных импульсов создает условия для упрочнения слоя толщиной 6–7 мкм, что позволяет существенно упрочнить наноструктурные ленты толщиной 30 мкм.

 Высокие скорости нагрева и охлаждения образца, а также сравнительно небольшое время пребывания материала при высоких температурах позволяет сохранить исходную аморфно-нанокристаллическую структуру.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- Маранц А.В., Сентюрина Ж.А., Ядройцев И.А., Ядройцева И.А., Нарва В.К., Смуров И.Ю. Сравнение свойств материалов сталь – ТіС, полученных методами лазерных технологий и порошковой металлургии // Известия вузов. Порошковая металлургия и функциональные покрытия. 2013. № 1. С. 22-26.
- Макаров Г.Н. Применение лазеров в нанотехнологии: получение наночастиц и наноструктур методами лазерной абляции и лазерной нанолитографии // Успехи физических наук. М., 2013. Т. 183. С. 675-719.
- Маранц А.В. Разработка и исследование процессов лазерной обработки композиционных материалов сталь СПН14А7М5-ТіС: автореф. дис... канд. тех. наук. М., 2013. 28 с.
- Ушаков И.В., Сафронов И.С. Механические характеристики аморфного металлического сплава, подвергнутого обработке импульсным лазерным излучением в глубоком вакууме // Вестник Тамбовского университета. Серия Естественные и технические науки. Тамбов, 2013. Т. 18. Вып. 1. С. 133-134.
 Ушаков И.В., Сафронов И.С. Влияние лазерной обработки на
- Ушаков И.В., Сафронов И.С. Влияние лазерной обработки на микротвердость и особенности разрушения тонких лент аморфнонанокристаллического металлического сплава // Физика и химия обработки материалов. 2013. № 2. С. 11-15.
- Сафронов И.С. Выявление механизмов формирования механических свойств тонкой ленты металлического сплава при импульсной лазерной обработке: автореф. дис. ... канд. физ.-мат. наук. Тамбов, 2013.
- Ушаков И.В., Сафронов И.С. Механические характеристики тонкой ленты многокомпонентного аморфно-нанокристаллического металлического сплава, обработанного серией наносекундных лазерных импульсов // Тяжелое машиностроение. 2012. № 10. С. 6-9.

Поступила в редакцию 21 декабря 2015 г.

Ушаков Иван Владимирович, Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС», г. Москва, Российская Федерация, доктор технических наук, доцент, профессор кафедры физики; Тамбовский государственный технический университет, г. Тамбов, Российская Федерация, профессор кафедры «Автоматика и компьютерные системы управления», e-mail: ushakoviv@mail.ru

Батомункуев Амагалан Юрьевич, Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС», г. Москва, Российская Федерация, аспирант, кафедра физики, e-mail: amgalan-ngu-621@yandex.ru

UDC 620.178.15 DOI: 10.20310/1810-0198-2016-21-1-165-170

MODELLING OF COMPLEX PROCESSES IN SURFACE LAYERS OF NANOSTRUCTURAL MANY COMPONENT METALLIC ALLOY IRRADIATED BY LASER IMPULSES

© I.V. Ushakov, A.Y. Batomunkuev

The processes of heating and cooling thin metallic sample irradiated by series of nanosecond laser impulses are investigated by method of computer modeling. The areas of important processes of structural relaxation, crystallization and recrystallization of amorphous nano-crystal material are revealed. The mechanisms of selected laser treatment of defected areas are discussed. The process of destruction in areas of mechanical stress concentration and their healing under influence of laser heating is described. The depth of treated layer is about 20–25 % thickness from general thickness of sample. It is important reason of significant increasing of mechanical properties.

Key words: selected laser treatment; computer modeling; strengthening; nanostructural materials; laser heating of material.

REFERENCES

- Marants A.V., Sentyurina Z.A., Yadroytsev I.A., Yadroytseva I.A., Narva V.K., Smurov I.Yu. Sravnenie svoystv materialov stal TiC, poluchennykh metodami lazernykh tekhnologiy i poroshkovoy metallurgii. *Izvestiya vuzov. Poroshkovaya metallurgiya i funktsionalnye* pokrytiya, 2013, no. 1, pp. 22-26.
- Makarov G.N. Primenenie lazerov v nanotekhnologii: poluchenie nanochastits i nanostruktur metodami lazernoy ablyatsii i lazernoy nanolitografii. Uspekhi fizicheskikh nauk, Moscow, 2013, vol. 183, pp. 675-719.
- 3. Marants A.V. Razrabotka i issledovanie protsessov lazernoy obrabotki kompozitsionnykh materialov stal SPN14A7M5-TiC. Avtoreferat dissertatsii ... kandidata tekhnicheskikh nauk. Moscow, 2013, 28 p.
- 4. Ushakov I.V., Safronov I.S. Mekhanicheskie kharakteristiki amorfnogo metallicheskogo splava, podvergnutogo obrabotke impulsnym lazernym izlucheniem v glubokom vakuume. Vestnik Tambovskogo universiteta. Seriya Estestvennye i tekhnicheskie nauki – Tambov University Reports. Series: Natural and Technical Sciences. Tambov, 2013, vol. 18, no. 1, pp. 133-134.
- Ushakov I.V., Safronov I.S. Vliyanie lazernoy obrabotki na mikrotverdost i osobennosti razrusheniya tonkikh lent amorfnonanokristallicheskogo metallicheskogo splava. Fizika i khimiya obrabotki materialov, 2013, no. 2, pp. 11-15.
- Safronov I.S. Vyyavlenie mekhanizmov formirovaniya mekhanicheskikh svoystv tonkoy lenty metallicheskogo splava pri impulsnoy lazernoy obrabotke. Avtoreferat dissertatsii ... kandidata fiziko-matematicheskikh nauk. Tambov, 2013.
- Ushakov I.V., Safronov I.S. Mekhanicheskie kharakteristiki tonkoy lenty mnogokomponentnogo amorfno-nanokristallicheskogo metallicheskogo splava, obrabotannogo seriey nanosekundnykh lazernykh impulsov. *Tyazheloe mashinostroenie*, 2012, no. 10, pp. 6-9.

Received 21 December 2015

Ushakov Ivan Vladimirovich, National University of Science and Technology "MISiS", Moscow, Russian Federation, Doctor of Technics, Associate Professor, Professor of Physics Department; Tambov State Technical University, Tambov, Russian Federation, Professor of "Automatics and Computer Systems of Control" Department, e-mail: ushakoviv@mail.ru

Batomunkuev Amagalan Yuryevich, National University of Science and Technology "MISiS", Moscow, Russian Federation, Post-graduate Student, Physics Department, e-mail: amgalan-ngu-621@yandex.ru