

## МОДЕЛЬ ПОВЕРХНЕВОГО ПЕРЕРОЗПОДІЛУ ДОМІШКИ ВПРОВАДЖЕННЯ ПІД ДІЄЮ ІМПУЛЬСНОГО ЛАЗЕРУ

Серед існуючих методів впливу на фізико-механічні та трибологічні властивості тонкого шару поверхні виробів з металів та сплавів особливе місце займає лазерна обробка [1–5]. Зважаючи на широке використання імпульсного лазера у виробничих процесах, залишається актуальним питання регулювання впливу такого випромінювання на перерозподіл легуючих елементів по глибині зони лазерного впливу [6, 7]. Це пов'язано з тим, що домішки впровадження є слабо зв'язаними з матрицею і легко дифундують під впливом зовнішніх факторів [8, 9]. Насамперед це стосується випадку перерозподілу вуглецю у поверхневому шарі аустенітної сталі при лазерній обробці в режимі з оплавленням чи з модуляцією добротності [10–12].

Відомо, що при дії лазерного імпульсу на матеріали прискорюються процеси дифузії атомів з поверхні в матрицю [13–16]. В роботі [13] це пояснюється захопленням атомів пружним полем рухомих дислокаційних уступів, що генеруються внаслідок великих градієнтів термічних напружень, а сам процес описується рівнянням дифузії з додатковим членом, який враховує спрямований рух атомів. В роботі [14] теоретично та експериментально встановлено, що перенесення атомів в глибину металу при імпульсній лазерній обробці пов'язано з процесами термопластичної течії матеріалу. Очевидно, що вплив термомеханічних факторів на перерозподіл атомів домішки впровадження буде ще більш суттєвим. Особливо це стає актуальним в зв'язку зі швидким розвитком 3D технологій друкування виробів зі сплавів і навіть нержавіючої сталі, які базуються на застосуванні лазерного випромінювання [17].

В зв'язку з практичною важливістю в роботі пропонується модель дифузії атомів домішки впровадження під дією градієнтів температури та термічних напружень та приводяться розрахунки для випадку вуглецевих сталей з аустенітною структурою.

### Модель

Задача про вплив пружної хвилі на перерозподіл домішки впровадження на прикладі вуглецю в зоні імпульсної лазерної дії, на відміну від попередньої моделі [18–20], складається з рівнянь теплопровідності (1), хвильових рівнянь (2), рівнянь дифузії (3) для рідкої та твердої фаз відповідно:

$$\frac{\partial T_1}{\partial t} = a \frac{\partial^2 T_1}{\partial x^2} \quad \text{для} \quad 0 < x < S,$$

$$\frac{1}{a} \frac{\partial T_2}{\partial t} = \frac{\partial^2 T_2}{\partial x^2} - \frac{(3\lambda + 2\mu)\alpha}{\chi} \frac{\partial U_2}{\partial x} \quad \text{для} \quad S < x < \infty; \quad (1)$$

$$\frac{\partial^2 U_1}{\partial t^2} = C_s^2 \frac{\partial^2 U_1}{\partial x^2},$$

$$\rho \frac{\partial^2 U_2}{\partial t^2} = (\lambda + 2\mu) \frac{\partial^2 U_2}{\partial x^2} - \alpha(3\lambda + 2\mu) \frac{\partial T_2}{\partial x} - \beta_2 \frac{\partial c_2}{\partial x}; \quad (2)$$

$$\frac{\partial c_1}{\partial t} = D_1 \frac{\partial^2 c_1}{\partial x^2},$$

$$\frac{\partial c_2}{\partial t} = b \frac{\partial}{\partial x} \left( c_2 \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right) \quad (3)$$

початкових умов (4):

$$T_2(x, 0) = \tilde{T}_0, \quad U_2(x, 0) = 0,$$

$$U_{2t}(x, 0) = 0, \quad c_2(x, 0) = \tilde{c}_0 \quad (4)$$

граничних умов на поверхні зразка, що опромінюється (5)

$$c_1(0, t) = \tilde{c}_0, \quad -\chi \frac{\partial T_1}{\partial x} \Big|_{x=0} = Aq_0 f(t), \quad U_1(0, t) = \tilde{U}_0 f(t) \quad (5)$$

та граничних умов на протилежній поверхні (6) (впливом умов на цій поверхні можна знехтувати у зв'язку з тим що процес перерозподілу вуглецю відбувається у приповерхневих шарах зразку (~ 200мкм)):

$$T_2|_{x \rightarrow \infty} = \tilde{T}_0, \quad U_2|_{x \rightarrow \infty} = 0, \quad c_2|_{x \rightarrow \infty} = \tilde{c}_0, \quad (6)$$

а також граничних умов на межі розділу рідкої та твердої фаз

$$\begin{aligned} T_1(s, t) &= T_2(s, t) = T_{nn} \\ \lambda_1 \frac{\partial T_1}{\partial x} \Big|_{x=s(t)} - \lambda_2 \frac{\partial T_2}{\partial x} \Big|_{x=s(t)} &= \rho L \frac{ds}{dt} \\ U_1 \Big|_{x=s(t)} &= U_2 \Big|_{x=s(t)}, \quad \frac{\partial U_1}{\partial x} \Big|_{x=s(t)} = \frac{\partial U_2}{\partial x} \Big|_{x=s(t)} \\ c_1 \Big|_{x=s(t)} &= c_2 \Big|_{x=s(t)}, \quad D_1 \frac{\partial c_1}{\partial x} \Big|_{x=s(t)} = D_2 \frac{\partial c_2}{\partial x} \Big|_{x=s(t)}. \end{aligned} \quad (7)$$

У сформульованій задачі:  $T$  – температура,  $U$  – механічне зміщення,  $c$  – концентрація вуглецю,  $\varphi$  – хімічний потенціал,  $a$  – коефіцієнт температуропровідності,  $b$  – рухомість атомів вуглецю у твердій фазі,  $T_0$  – температура навколишнього середовища ( $T_0 = 300K$ ),  $\lambda$ ,  $\mu$  – коефіцієнти Ламе,  $\alpha$  – коефіцієнт лінійного теплового розширення,  $\beta$  – коефіцієнт концентраційного розширення,  $A$  – коефіцієнт поглинання за потужністю,  $q_0$  – максимальне значення щільності потужності випромінювання,  $\rho$  – густина матеріалу зразка,  $\chi$  – коефіцієнт теплопровідності,  $C_{1s}$  – швидкість звуку в розплаві,  $D_1$  – коефіцієнт дифузії в рідкій фазі,  $f(t) = Bte^{-\gamma t}$  – чинник часу запропонований в роботі [19].

З урахуванням того, що хімічний потенціал  $\varphi$  має вигляд [20]

$$\varphi = \varphi_0 + kT[\ln c_2 - \ln(1 - c_2)] + \Omega(U_0 + 9K\omega^2)c_2 - 3k\omega\varepsilon_{II}, \quad (8)$$

де  $k$  – стала Больцмана,  $\omega = \frac{\beta}{3K}$  – лінійний коефіцієнт концентраційного розширення,  $U_0 = -4k\omega^2 \left(\frac{1-2\nu}{1-\nu}\right)^2$  – ефективна енергія взаємодії,  $\Omega$  – об'єм одного атома тіла,  $K = \lambda + \frac{2}{3}\mu$  – модуль всебічного стиску,  $\nu$  – коефіцієнт Пуассона,  $\varepsilon_{II} = \frac{\partial U_I}{\partial x}$  – діагональні компоненти тензора деформації.

Останнє рівняння з системи (3) набуває вигляду

$$\frac{\partial c_2}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( D_{eff\phi} \frac{\partial c_2}{\partial x} \right) - \beta\Omega b \frac{\partial}{\partial x} \left( c_2 \frac{\partial^2 U_2}{\partial x^2} \right), \quad (9)$$

де  $D_{eff\phi}$  ефективний коефіцієнт дифузії

$$D_{eff\phi} = b \left( kT_2 + \frac{\beta\omega\Omega}{3} \left( 9 - 4 \left( \frac{1-2\nu}{1-\nu} \right)^2 \right) c_2 \right). \quad (10)$$

Співвідношення (9) можна переписати у вигляді

$$D_{eff\phi} = D_0 \left( 1 + \frac{\beta\omega\Omega}{3kT_2} \left( 9 - 4 \left( \frac{1-2\nu}{1-\nu} \right)^2 c_2 \right) \right). \quad (11)$$

де  $D_0 = b k T_2$ .

Вважаючи зміну концентрації невеликою у порівнянні з  $\tilde{c}_0$  напишемо рівняння (8) у лінійному наближенні

$$\frac{\partial c_2}{\partial t} = D_2 \frac{\partial^2 c_2}{\partial x^2} - \beta\Omega b \tilde{c}_0 \frac{\partial^3 U_2}{\partial x^3}, \quad (12)$$

де

$$D_2 = b \left( kT_0 + \frac{\beta\omega\Omega}{3} \left( 9 - 4 \left( \frac{1-2\nu}{1-\nu} \right)^2 \right) \tilde{c}_0 \right).$$

Таким чином, чисельний розв'язок крайової задачі (1)–(7), (12) дозволяє визначити температурний розподіл, механічне зміщення та концентрацію вуглецю для рідкої та твердої фаз.

**Результати розрахунків та їхнє обговорення**

За допомогою запропонованої моделі визначено вплив теплового та акустичного факторів на перерозподіл вуглецю, які виникають в наслідок дії імпульсного лазерного випромінювання.

Розрахунки проводилися при наступних значеннях параметрів та констант матеріалів (табл. 1, 2):

**Таблиця 1** – Значення параметрів для розрахунку моделі

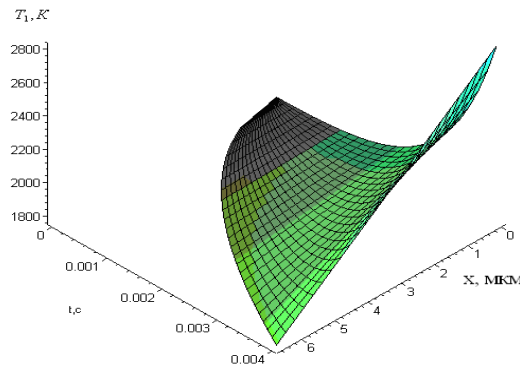
A	$a, \text{ м}^2/\text{с}$	$\alpha, \text{ К}^{-1}$	$\chi, \text{ Вт}/\text{м}\cdot\text{К}$	$q_0, \text{ Вт}/\text{м}^2$	$\tau_0, \text{ мс}$	$\rho, \text{ Кг}/\text{м}^3$	$\gamma, \text{ с}^{-1}$	$D_0, \text{ м}^2/\text{с}$	$\nu$
0,8	$6,84 \cdot 10^{-6}$	$1,2 \cdot 10^{-5}$	42	$4,7 \cdot 10^7$	4	$7,8 \cdot 10^3$	373,45	$8 \cdot 10^{-6}$	0,29

Запропонована модель була використана для розрахунку розподілу концентрації вуглецю в аустенітній сталі, з урахуванням оточуючої холодної матриці, та поздовжньої механічної хвилі, що супроводжує імпульсне лазерне випромінювання. Вважалося, що на поверхню зразку нанесена обмазка з високим вмістом вуглецю.

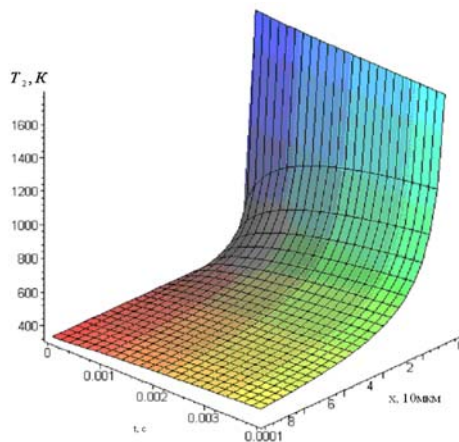
**Таблиця 2** – Додаткові значення параметрів для розрахунку моделі

$\lambda, \text{ Па}$	$\mu, \text{ Па}$	$\beta, \text{ Па}/\text{м}$	$\tilde{T}_0, \text{ К}$	$B, \text{ с}^{-1}$	$\Omega, \text{ м}^3$	$\tau_0, \text{ мс}$	$\tilde{c}_0, \text{ мас}\%$	$\tilde{U}_0, \text{ м}$	$b, \text{ с}/\text{кг}$
$1,1 \cdot 10^{11}$	$8 \cdot 10^{10}$	$1 \cdot 10^{11}$	300	1115,7	$6,2 \cdot 10^{-27}$	1,55	$7,8 \cdot 10^3$	$10^{-6}$	$8 \cdot 10^{-7}$

На основі запропонованої моделі було розраховано розподіл температури в рідкій та твердій фазах в зоні лазерної дії аустенітної сталі в режимі оплавлення. На рис. 1 наведено просторово-часовий розподіл у рідкій фазі, який має близький до лінійного характер зменшення температури по глибині. В твердій фазі просторово-часовий розподіл температури має гіперболічний вигляд в різних часових інтервалах дії лазерного імпульсу (рис. 2).



**Рис. 1.** Просторово-часовий розподіл температури в рідкій фазі



**Рис. 2.** Просторово-часовий розподіл температури в твердій фазі

Показано, що протягом дії лазерного імпульсу зміна температури в рідкій фазі проявляється більш істотно ніж у твердій фазі, що пов'язано з більш високою швидкістю нагрівання рідкої фази. Монотонний характер змін в твердій фазі пов'язаний з перерозподілом тепла по її глибині.

Повздовжня хвиля, яка врахована в моделі, виникає в результаті дії лазерного імпульсу за рахунок істотних перепадів температури. Очевидним є, що характер розподілу механічного зміщення з часом на різних глибинах повторює характер часового розподілу потужності лазерного імпульсу та має максимум при  $t_0 = 3$  мс з подальшим монотонним зменшенням. Просторово-часовий розподіл механічних зміщень наведено на рис. 3. Видно що максимальне зміщення має місце при на 3 мс, а розподіл механічного зміщення по глибині для кожного моменту часу має постійний характер.

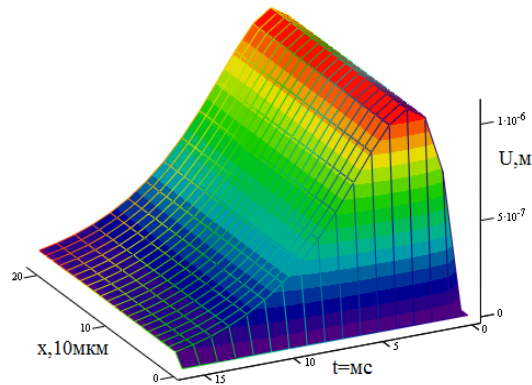


Рис. 3. Просторово-часовий розподіл механічних зміщень

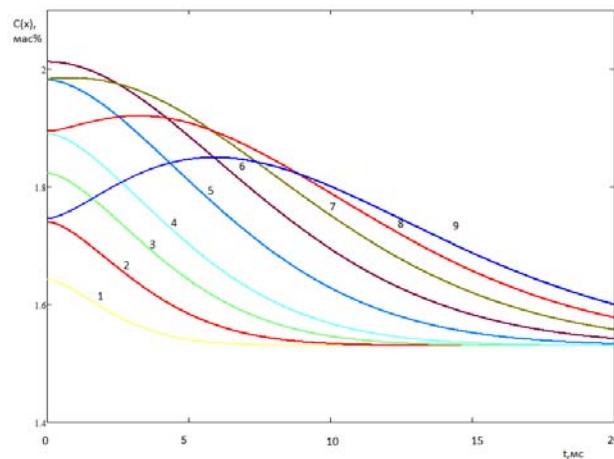


Рис. 4. Розподіл концентрації вуглецю по глибині зразку в різні моменти часу:  
1) 1 мс, 2) 2 мс, 3) 3 мс, 4) 4 мс, 5) 6 мс, 6) 8 мс, 7) 10 мс, 8) 12 мс, 9) 14 мс

Використовуючи запропоновану модель, було розраховано розподіл концентрації вуглецю в зоні лазерного впливу, а також проаналізовані результати розрахунку зміни концентрації вуглецю в аустеніті по глибині зони лазерного впливу для різних моментів часу дії або післядії лазерного імпульсу. Відомо що рівноважна концентрація вуглецю у залізо-нікелевих сталях складає 1,55 масових відсотків. Що стосується максимально можливої концентрації то значення її вибирається згідно з діаграмою стану системи Fe-Me-C. Нами була обрана концентрація 2,14 мас.% вуглецю. Вибір максимально можливої концентрації вуглецю продиктовано можливістю фіксації цього стану при кімнатній температурі в наслідок високої швидкості охолодження розплавленої поверхні оточуючою холодною матриці при локальному нагріві імпульсним лазером ( $10^5$  K/c) поверхневої обмазки, яка містить вуглець.

Більш детальне дослідження розподілу вуглецю в зоні лазерного впливу, під час дії та післядії лазерного імпульсу показало, що в інтервалі існування рідкої фази на поверхні зразку (8 мс) спостерігається переважне збільшення концентрації вуглецю на поверхні до максимальних значень з подальшим зменшенням її по глибині (рис. 4 криві 1–6). Однак в часових інтервалах утворення твердої фази спостерігається поступовий перерозподіл вуглецю по глибині зі зменшенням його концентрації на поверхні (рис.4 криві 7–9). При цьому максимум концентрації зміщується наприклад з 50 мкм при 12 мс до 70 мкм при 14 мс, а рівень зміни концентрації по глибині також буде різним. Така поведінка зміни концентрації вуглецю в аустеніті в зоні лазерної дії підтверджується експериментальними даними [21], що вказує на адекватність обраної моделі.

### Висновки

1. Запропонована математична модель для оцінки перерозподілу вуглецю в аустенітній сталі під впливом імпульсного лазерного випромінювання в режимі оплавлення поверхні з урахуванням поздовжньої механічної хвилі, яка виникає в результаті термічного перепаду між зоною лазерної дії та оточуючою холодною матрицею. В рамках запропонованої моделі проведені розрахунки температурного розподілу в рідкій та твердій фаз в різні моменти дії та післядії лазерного імпульсу.

2. Показано істотне зменшення температури в рідкій фазі по лінійному закону з подальшим монотонним (гіперболічним) її зменшенням в твердій фазі в результаті дії оточуючої холодної матриці.

3. Встановлено, що часовий характер розподілу механічного зміщення в зоні лазерного впливу якісно повторює часову залежність розподілу потужності в лазерному імпульсу з максимумом при  $t_0 = 3$  мс, а саме зміщення є постійним на різних глибинах, хоча абсолютне його значення є різним для кожного моменту часу.

4. Розрахунок концентрації вуглецю в аустеніті в часових межах дії лазерного імпульсу показав, що розчинність вуглецю на поверхні зразку в перші мілісекунди дії лазерного імпульсу істотно вище (0,17 мас. %) ніж в кінці дії імпульсу (0,08 мас. %), що можна пояснити комплексним впливом поздовжньої механічної хвилі, яка випереджує теплову хвилю та немонотонним часовим характером розподілу потужності в лазерному імпульсі.

5. Порівняння розподілу концентрації вуглецю під час дії та після дії лазерного імпульсу показало, що в умовах існування рідкої фази, збільшення концентрації вуглецю спостерігається переважно на поверхні до максимальної можливої концентрації для вибраної системи згідно діаграми стану. При формуванні твердої фази в зоні лазерного впливу після дії лазерного імпульсу відбувається перерозподіл вуглецю з поверхні в глибину зони з формуванням максимальної концентрації в інтервалі 50–70 мкм для моментів часу післядії 12–14 мс. Цей перерозподіл виникає за рахунок масопереносу внаслідок великої рухливості вуглецю у твердій фазі у порівнянні з іншими елементами сплаву.

Запропонована модель може бути використана для оптимізації режимів імпульсної лазерної обробки аустенітних та інших сталей і сплавів.

### Список літератури

1. Laser Precision Microfabrication, Springer Series in Materials Science 135 / K. Sugioka et al. (eds.). – Berline, Heidelberg, Springer-Verlag: 2010), DOI 10.1007/978-3-642-10523-4\_4.
2. Gachot C. Laser Surface Texturing of TiAl Multilayer Films—Effects of Microstructure and Topography on Friction and Wear / C. Gachot, Ph. Grützmacher and A. Rosenkranz. – Lubricants 2018, 6(2), 36; <https://doi.org/10.3390/lubricants6020036>.
3. J. Grun. Laser Surface Hardening. [In: Wang Q.J., Chung YW. (eds) Encyclopedia of Tribology] (Boston, MA, USA, Boston: 2013), DOI: [https://doi.org/10.1007/978-0-387-92897-5\\_1007](https://doi.org/10.1007/978-0-387-92897-5_1007).
4. Григорьянц А. Г. Технологические процессы лазерной обработки / А. Г. Григорьянц, И. Н. Шиганов, А. И. Мисюров. – М. : Изд-во МГТУ им. Н. Э. Баумана, 2006. – 664 с.
5. Laser modification of the materials surface layer – a review paper / J. Kusinski, S. Kas, A. Kopia, A. and etc. // В Pol Acad Sci-Tech. 60, No. 4, 711 – 2012.
6. Pogorelov A. E. Mass transfer mechanism in real crystals by pulsed laser irradiation / A. E. Pogorelov, K. P. Ryaboshapka, A. F. Zhuravlyov // J Appl Phys. 92, 5766 (2002); <https://doi.org/10.1063/1.1512972>
7. Гусев А. А. Перспективы импульсного лазерного легирования и наплавки / Гусев А. А. // Известия Самарского НЦ РАН, 14, № 6. – 2012. – С. 247 – 253.
8. Данільченко В. Ю. Дифузійні характеристики вуглецю у фазонагартваному сплаві H32 / В. Ю. Данільченко, В. Ф. Мазанко, В. С. Яковлев // Вісник Черкаського університету. – 2013. – Вип. 16 (269). – С. 19–24.
9. Філоненко Н. Ю. Вплив попередньої пластичної деформації на дифузію бору та вуглецю в сплавах на основі заліза / Н. Ю. Філоненко, Л. І. Федоренков // Металознавство та обробка металів. – 2010. – № 2. – С. 46–50.
10. Гуреев Д. М. Влияние лазерного воздействия на перераспределение углерода в поверхностных слоях инструментальных сталей / Д. М. Гуреев // Физика и химия обработки материалов. – 1994. – № 1. – С. 27–39.
11. Измайлов Е. А. Направленное перемещение атомов углерода в сталях, стимулированное лазерным излучением / Е. А. Измайлов, В. Г. Горбач // Докл. АН СССР. – 1986. – Т. 286, № 2. – С. 348–351.
12. Сафонов А. Н. Диффузионное перераспределение углерода в углеродистых сталях под воздействием высокоэнергетических источников / А. Н. Сафонов, Е. А. Дубровина // Квантовая электроника. – 1998. – Т. 25, № 8. – С. 701–704.
13. Laser-Stimulated Mass Transfer in Metals / М. Е. Gurevich, L. N. Larikov, V.G. Novitskii and etc. // Phys. Stat. Sol. (A). – Vol. 76. – 1983. – С. 479–484.
14. О природе массопереноса в металлах при лазерном облучении / М. Е. Гуревич, А. Ф. Журавлев, Ю. В. Корнюшин, А. Е. Погорелов // Металлофизика и новейшие технологии. – 1985. – Т. 7, № 2. – С. 113–114.
15. Волосевич П. Ю. Особенности структурных изменений в армко-железе после воздействия докритических потоков импульсного излучения ОКГ / П. Ю. Волосевич, А. Е. Погорелов // Поверхность. Физика, химия, механика. – 1986. – № 9. – С. 126–130.
16. Лазерные технологии обработки материалов: современные проблемы фундаментальных исследований

и прикладных разработок ; под ред. В. Я. Панченко. – М. : Физматлит, 2009. – 664 с.

17. Zhongji Sun, Xipeng Tan, Shu Beng Tor & Chee Kai Chua Simultaneously enhanced strength and ductility for 3D-printed stainless steel 316L by selective laser melting. NPG Asia Materials, 10, 127 (2018), <https://doi.org/10.1038/s41427-018-0018-5>

18. Влияние импульсного лазерного воздействия на перераспределение углерода в стали / И. Г. Величко, В. Е. Данильченко, А. В. Недоля и др. // Доповіді НАН України. – 2008. – № 9. – С. 93–98.

19. Анпілогов Д. І. Вплив фактору часу імпульсного лазерного випромінювання на температурне поле в зоні теплової дії / Д. І. Анпілогов, В.В. Гіржон // УФЖ. – 1997. – № 3. – С. 306–309.

20. Любов Б. Я. Диффузионные процессы в неоднородных твердых средах / Б. Я. Любов. – М. : Наука, 1981. – 296 с.

21. Nedolya A.V. XRPD application for laser-treated surface of Fe-based alloys study / A.V. Nedolya // Nuovo Cimento della Societa Italiana di Fisica D - Condensed Matter, Atomic, Molecular and Chemical Physics, Biophysics. 19(2–4), 609 (1997).

*Одержано 12.07.2021*

© \*Тітов І. М.<sup>1</sup>, Недоля А. В.<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Інженер, UAD-Systems

<sup>2</sup> Канд. фіз.-мат. наук, доцент кафедри прикладної фізики і наноматеріалів, Запорізький національний університет; м. Запоріжжя, Україна

**Titov I., Nedolya A. Model of the impurities redistribution in the surface layer of an alloy under the action of pulsed laser radiation**

---

\* В роботі брав участь О. В. Лисенко