ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ НАГРЕВА И ПЛАВЛЕНИЯ МИКРОЧАСТИЦЫ ЛАЗЕРНЫМ ИЗЛУЧЕНИЕМ

Р.В. Гришаев, Ф.Х. Мирзаде, М.Д. Хоменко
Институт проблем лазерных и информационных технологий РАН
top20072007@rambler.ru

Введение

Хорошо известно [1-3], что процесс послойного нанесения ультрадисперсных частиц порошка при селективном лазерном спекании (СЛС) может быть реализован при помощи дозаторов, подавая порошок (металлические частицы) газовым потоком в зону действия лазерного излучения (ЛИ). При этом происходит поглощение и рассеяние энергии ЛИ частицами (газ не поглощает), нагрев и расплавление частиц излучением, поверхностью мишени, оплавление поверхности мишени излучением, попадание частиц на расплавленную поверхность, перемешивание и диффузионное взаимопроникновение материала частиц и подложки, кристаллизация образовавшегося слоя материала. Ниже представлена и численно исследована физико-математическая модель нагрева одиночной частицы без учета кинетики фазового перехода под воздействием лазерного излучения. Учитывается температурная нелинейность поглощательной способности вещества частицы, теплообмен частицы с окружающим газом, а также потери энергии, связанные с радиационным охлаждением. Она позволяет определить температурное распределение частицы газе под воздействием лазерного излучения. Так же модель позволяет оценить влияние нелинейностей поглощательной способности и потери связанные с кондуктивным и радиационным теплообменом с окружающей средой. Заметим, что подобные работы ранее проводились для аэрозольных частиц без учета нелинейного поглощения и охлаждения [4] для неравномерно распределенного источника тепла внутри частицы. Рассматривались [5] также химические процессы происходящие при лазерном облучении частиц.

1. Математическая модель

Рассмотрим металлическую частицу в виде шара с радиусом R, которая в начальный момент времени подвергается воздействию лазерного излучения с интенсивностью I. Кинетика поведения частицы, введенной в лазерный пучок, зависит от ее начальной температуры, агрегатного состояния, теплофизических свойств материала и параметров лазерного излучения (ЛИ). Поглощенная частицами энергия тратится на их нагревание и расплавление (при $t > T_{melt}$, где T_{melt} температура плавления) и за вычетом потерь тепла на теплопроводность и радиационное охлаждение. Ограничимся значениями интенсивности излучения (I_0), при которых практически отсутствует испарение частицы. Поскольку испарение интенсивно происходит при температуре $T > T_{vapour}$, где T_{vapour} - температура испарения металла при

атмосферном давлении, то в значительном интервале температур $T_m < T < T_{vapour}$ всегда можно реализовать режимы без испарения частицы. Кроме того, предполагается, что нагревание металлических частиц происходит в защитном, химически инертном газе, поэтому процессы окисления, воспламенения и горения частиц под влиянием лазерного излучения можно не учитывать. При численном моделировании будем использовать метод сквозного счета [6], при котором граница фазового перехода не выделяется специально. Для описания используется модель со сглаженными теплофизическими характеристиками. Все зависимости теплофизических свойств от температуры (T) рассматривались в некоторой окрестности температуры плавления T_{ph}, то есть на интервале $\left[T_{ph} - \Delta T, \quad T_{ph} + \Delta T\right]$.

Нелинейное уравнение теплового баланса одиночной частицы с учетом вышеперечисленных допущений, для случая аксиально-симметричного распределения температуры, запишем в виде:

$$(c(T)\rho + Q\delta(T - \Delta T))\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2 \lambda(T)\frac{\partial T}{\partial r}\right). \qquad (1)$$

Здесь левая часть определяет изменение энергии в единице объеме частицы за счет изменения во времени температуры и за счет фазового перехода. Правая часть отражает диффузионный перенос внутренней энергии.

Граничные условия задачи имеют вид:

$$-\lambda \left.\frac{\partial T}{\partial r}\right|_{r=R} = \alpha_b I - \frac{2\lambda_0 T_0}{3R}\left(\left(\frac{T}{T_0}\right)^{3/2} - 1\right) - \sigma\left(T^4 - T_0^4\right), \qquad (2а)$$

$$-\lambda \left.\frac{\partial T}{\partial r}\right|_{r=0} = 0. \qquad (2б)$$

В (2а) первое слагаемое в правой части учитывает нагрев частицы за счет внешнего излучения (α_b - коэффициент поглощения), второе слагаемое характеризует кондуктивный теплообмен частицы с окружающим воздухом (λ_0 - теплопроводность воздуха, $T_0 = const$ t его температура), наконец третье слагаемое – потери энергии за счет излучения черного тела (σ - постоянная Стефана-Больцмана). Заметим, что приближение одиночной частицы применимо, если выполняется неравенство:

$$L_T = \sqrt{4\chi\tau_{las}} << N^{-1/3} = L_p, \qquad (3)$$

где L_T - характерный масштаб теплового поля частицы, χ - температуропроводность частицы, τ_{las} - длительность лазерного воздействия, N - концентрация частиц, L_p - среднее расстояние между ними.

2. Алгоритм расчета

Уравнение (1) с граничными условиями (2) решалось численно на интервале [0,R]. В начальный момент времени на сетке задавалась температура $T_0 = 273\,K$. Задача решалась методом конечных разностей. Реализация нелинейной разностной схемы осуществлялась на основе

итерационного уточнения коэффициентов. Скачок теплопроводности и теплоемкости задавался следующим образом:

$$c_{ef} = \begin{cases} c_1, \ T < T_{ph} - \Delta T \\ c_m + Q / 2\Delta T, \ T_{ph} - \Delta T < T < T_{ph} + \Delta T \\ c_2, \ T > T_{ph} + \Delta T \end{cases}, \tag{4}$$

$$\lambda = \begin{cases} \lambda_1, \ T < T_{ph} - \Delta T \\ \lambda_1 - \dfrac{\lambda_1 - \lambda_2}{2\Delta T}\left(T - T_{ph} + \Delta T\right), \ T_{ph} - \Delta T < T < T_{ph} + \Delta T \\ \lambda_2, \ T > T_{ph} + \Delta T \end{cases}, \tag{5}$$

где, $c_1\ \lambda_1$ – значения коэффициентов теплоемкости и теплопроводности материала соответственно до плавления, а $c_2\ \lambda_2$ – после плавления, $c_m = \begin{cases} c_1, \ T < T_{ph} \\ c_2, \ T > T_{ph} \end{cases}$, $2\Delta T$ температурный интервал переходной зоны между фазами, который подбирается с учетом введенной сетки таким, чтобы обеспечить требуемую точность учета скрытой теплоты плавления.

Поглощательная способность задавалась при помощи эмпирической формулы:

$$\alpha_b(T) = \begin{Bmatrix} 0.1 + 2.7 * 10^{-4}(T - T_0), \ T < T_{ph} \\ 0.6, \ T > T_{ph} \end{Bmatrix} \tag{6}$$

выведенной в [7].

3. Численные расчеты

Для моделирования спекания и плавления капли использовались следующие значения параметров и физических констант: Диаметр частиц $R = 10 - 100 \times 10^{-6}$ м; внутренняя теплота плавления или застывания железа $Q = 267000$ Дж/кг; удельная теплоемкость железа до плавления $c_1 = 450$ Дж/(К·г); удельная теплоемкость расплавленного железа $c_2 = 824$ Дж/(К·г); плотность железа $\rho = 7874$ кг/м^3; удельная теплопроводность железа до плавления $\lambda_1 = 15$ Вт/(м·К); удельная теплопроводность расплавленного железа $\lambda_2 = 32$ Вт/(м·К); температура плавления железа $T_{ph} = 1813$ К; начальная температура частицы $T_0 = 273$ К; интенсивность лазерного луча $I = 1 \div 70$ кВт/см^2; удельная теплопроводность воздуха $\lambda_0 = 0{,}03$ Вт/(м·К); полуинтервал переходной зоны между фазами $\Delta T = 1K$. Энергия лазерного излучения селективно поглощается микрочастицей при более слабом поглощении окружающим газом. Поэтому в течение действия лазерного излучения превышение температуры частицы со временем над температурой газа приводит к возрастанию теплообмена частицы с окружающим газом. В результате поглощенная частицей энергия передается газовой среде. Характерное время теплообмена частицы (с радиусом r0) можно оценить как $t_g \approx r_0^2 / 4\chi$ (χ - температуропровдность газа). При $\chi = 2.10^{-3} cm^2 c^{-1}$, $r_0 = 1\mu m$ это

время составляет $t_g = 1.2.10^{-6} c$. Заметим, что при $t_{Las} >> t_g$, взаимодействие ЛИ с микрочастицей происходит при развитом теплообмене с окружающем газом. В этом случае теплоотвод от частицы может полностью компенсировать тепловыделение в частице за счет поглощения энергии излучения. Если же $t_{Las} << t_g$ взаимодействие ЛИ с микрочастицей может сопровождаться перегревом частицы при значительном уменьшении (даже отсутствии) теплообмена частицы с газом.

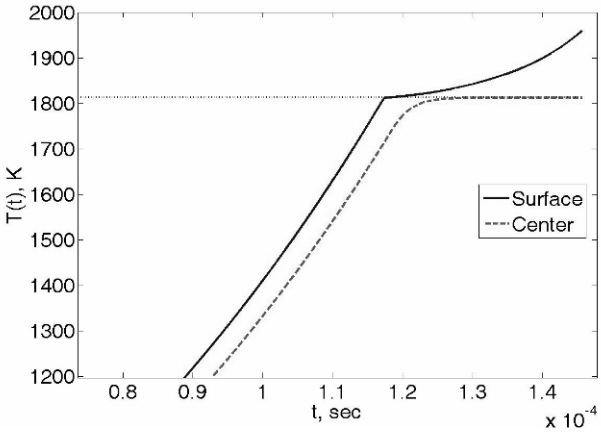

Рис. 1. Динамика температуры частицы для трех значений радиальной координаты. Сплошная кривая отображает значения температуры на поверхности, пунктирная – в центре. Радиус частицы $R = 10$ мкм , интенсивность излучения $I = 60$ кВт/см^2.

Полученные результаты численного моделирования представлены на рисунках 1-3. На рисунке 1 представлена динамика температурного поля частицы для двух значений радиальной координаты. Видно, что на графике изменения температуры выделяются участки: 1 – нагрева частицы до

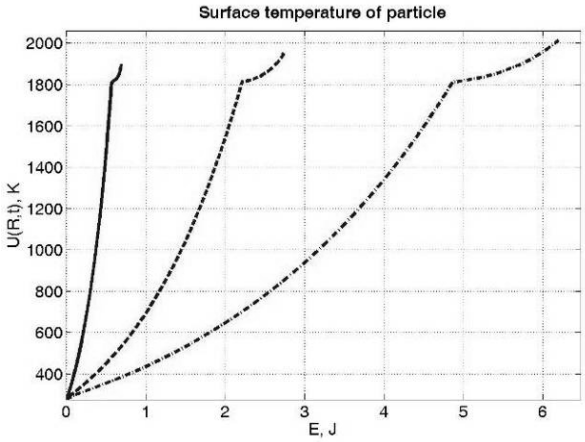

Рис. 2. Зависимость температуры поверхности от поглощенной энергии для частиц различных радиусов. Сплошная кривая для частиц $R = 5$ мкм, пунктирная для - $R = 10$ мкм, а штрихпунктирная - $R = 15$ мкм. Интенсивность излучения $I = 60$ кВт/см^2.

температуры плавления; 2 - плавление; 3 – нагрев до температуры испарения. За счет энергии лазерного излучения температура частицы начинает повышаться до температуры плавления. Затем в момент времени рост замедляется, а затем вовсе прекращается, пока к частице не будет подведена энергия, обеспечивающая плавление. После плавления возобновляется дальнейший рост температуры, который происходит до тех пор, пока

температура частицы не достигнет температуры кипения. Расчет прекращается, когда в центре частицы достигается температура плавления. Так же на рисунке виден нелинейный рост температуры частицы и отставание температуры внутри частицы от температуры на поверхности. Отставание исчезает при уменьшении интенсивности излучения. Так же наблюдалось запаздывание температуры при увеличении размера частицы, которое исчезает только при больших интенсивностях чем для частиц с меньшими радиусами.
На рисунке 3 отображена зависимость времени полного проплавления частицы от интенсивности облучения частицы радиуса $R = 10$ мкм с учетом кондуктивного и радиационного охлаждения - сплошная, и без учета охлаждения – пунктир. Заметим сильное влияние охлаждения на время полного проплавления при малых интенсивностях. При больших интенсивностях влияние охлаждения ослабевает, и им полностью можно пренебречь. Это связано с доминирующим влиянием поглощения с ростом интенсивности излучения.

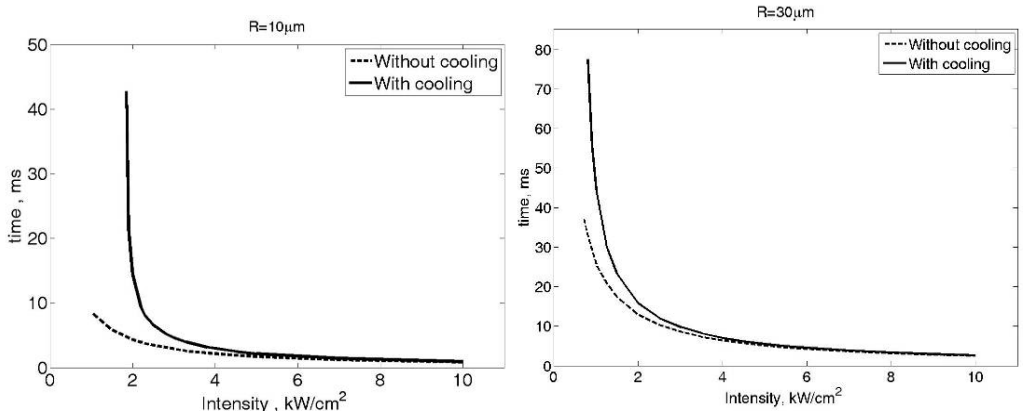

Рис. 3. Зависимость времени полного проплавления частицы (t_2) от интенсивности облучения с учетом (серый) и без учета (черный) кондуктивного и радиационного охлаждения. Радиус частицы $R = 10$ мкм (а) $R = 30$ мкм (б)

Выводы

Разработан вычислительный алгоритм и создана программа, позволяющая за время, зависящее от требуемой точности, рассчитывать параметры плавления частиц различных радиусов при различных интенсивностях. Рассчитано температурное поле частицы с учетом температурных нелинейностей поглощательной способности и теплообмена с газом (воздухом), а так же теплового излучения с поверхности. Исследована динамика фронта плавления частиц различных размеров, и ее зависимость от интенсивности излучения. Оценены характерные времена начала плавления и полного проплавления частиц в зависимости от размеров частиц и от интенсивности излучения.

1. Шишковский И. В. «Лазерный синтез функциональных мезоструктур и объемных изделий». Физматлит. М.: 2009, 424 стр.

2. Лазерные технологии обработки материалов: современные проблемы фундаментальных исследований и прикладных разработок.//Под редакцией В.Я. Панченко. М.:Физматлит, 2009 -664 с.
3. Панченко В. Я., Низьев В. Г., Гладуш Г. Г., Мирзаде Ф. Х. Физические проблемы селективного лазерного спекания порошков в технологии прямого изготовления трехмерных изделий // Сборник докладов XII Международной научной конференции "Физико-химические процессы при селекции атомов и молекул" Цниатоминформ, 2008 г. стр.231-236.
4. Astafieva L.G.,. Prishivalko A.P. “Heating of solid aerosol particles exposed to intense optical radiation” J. Heat Mass Transfer Vol. 41, №2, pp. 489-499
5. Nonlinear interaction of intense laser radiation with solid aerosol. Inner-institute collection, Barnaul, 1988.
6. Самарский А.А. Вабищевич П.Н.«Вычислительная теплопередача». М.:2009 Едиториал УРСС 784 с.
7. Анисимов С.И., Имас Я.А., Романов Г.С., Ходыко Ю.В. Действие излучения большой мощности на металлы. М., Наука, 1970, 272 с