

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КИНЕТИКИ ПЛАВЛЕНИЯ МИКРОЧАСТИЦЫ ПРИ СЕЛЕКТИВНОМ ЛАЗЕРНОМ СПЕКАНИИ

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

Введение

Хорошо известно [1-2], 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, оплавление поверхности мишени излучением, попадание частиц на расплавленную поверхность, перемешивание и диффузионное взаимопроникновение материала частиц и подложки, кристаллизация образовавшегося слоя материала.

1. Модель плавления микрочастиц с учетом кинетики фазового перехода

Для выбора правильного режима лазерного воздействия необходимо правильно оценить характерные времена процессов протекающих в частицах металлического порошка. Обычно процессы плавления и влияния охлаждения исследуются на основе решения задачи Стефана. Температура на границе фаз считается постоянной и равной температуре плавления, а все процессы моделируются в заданном интервале около нее. Такой подход оправдан при слабой неравновесности процессов. Однако известно [3], что процессы при лазерном воздействии протекают в условиях сильной неравновесности, поэтому при их моделировании необходимо учитывать кинетику протекания таких процессов.

В данной главе рассмотрены процессы плавления микрочастицы на основе совместного решения уравнения теплопроводности, отвечающего за теплоотвод от фазовой границы и уравнения Колмогорова, учитывающего кинетику образования фазового перехода. Таким образом рассматривается сопряженная задача кинетики объемного плавления микрочастицы и теплообмена внутри частицы и окружающим газом. Такой подход впервые рассмотрен в работах [4,5]. Этот подход применялся для описания плавления и кристаллизации пластин кремния [6]. В этой работе рассматривается воздействие наносекундного лазерного излучения и двумерный механизм роста. Это оправдано при взаимодействии излучения с плоской поверхностью кремния. В данной же работе рассматривается нагрев микрочастиц железа лазерным излучением, когда зародышеобразование и дальнейший рост

зародышей возможны во всем объеме, то есть реализуется объемный (трехмерный) механизм плавления.

2. Основные уравнения

Математическая модель процессов плавления микрочастицы описывается одномерным уравнением теплопроводности:

$$c\rho \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \lambda \frac{\partial T}{\partial r} \right) - \rho L \frac{\partial b}{\partial t}, \quad (1)$$

здесь последний член в правой части отвечает за объемное поглощение тепла вследствие плавления, ρ – плотность железа (использовалось значение для железа 7874 kg/m^3).

С граничными условиями, учитывающими теплоотвод и поглощение на поверхности частицы:

$$\begin{aligned} -\lambda \left. \frac{\partial T}{\partial r} \right|_{r=R} &= \alpha_b I - \frac{2\lambda_0 T_0}{3R} \left(\left(\frac{T}{T_0} \right)^{3/2} - 1 \right) - \sigma (T^4 - T_0^4), \\ -\lambda \left. \frac{\partial T}{\partial r} \right|_{r=0} &= 0, \end{aligned} \quad (2)$$

здесь $T_0=300\text{K}$ - температура окружающего газа, а $\lambda_0=0.03\text{W}/(\text{m}\cdot\text{K})$ – его удельная теплопроводность.

Количество новой фазы в рамках вероятностной модели Колмогорова определяется соотношением:

$$b(r, t) = 1 - \exp \left\{ -\frac{4\pi}{3} \int_0^t J(T(r, \xi)) \left[r_* + \int_{\xi}^t \nu(T(r, t'')) dt'' \right]^3 d\xi \right\}, \quad (3)$$

здесь $J(T)$ - частота зародышеобразования. Это уравнение описывает трехмерный рост зародышей со скоростью $\nu(T)$ начиная с минимального значения критического радиуса зародыша r_* . Эти параметры могут быть определены, исходя из энергетической теории фазовых переходов, подробно рассмотренной в [7]

Частота гомогенного зародышеобразования в настоящей работе описывалась уравнением:

$$J(\Delta T) = (1 - b) N_0 \frac{k_B T}{h} \exp \left(-\frac{E_a}{k_B T} \right) \exp \left\{ -\frac{16\pi \gamma^3 \Omega^2}{3k_B T \Delta S^2 \Delta T^2} \right\}, \quad (4)$$

здесь b – количество расплавленного вещества, N_0 – число узлов в единице объема k_B - постоянная Больцмана, h - постоянная Планка, E_a – энергия активации, γ - поверхностная энергия раздела фаз, Ω – объем атома, ΔS – энтропия.

А зависимость линейной скорости роста от температуры имеет следующий вид:

$$\nu(t) = d_0 \frac{k_B T}{h} \exp \left(-\frac{E_a}{k_B T} \right) \left[1 - \exp \left(-\frac{\Delta S \Delta T}{k_B T} \right) \right], \quad (5)$$

здесь d_0 – размер атома, а остальные обозначения использованы как в (4)

3. Вычислительный алгоритм

Система уравнений 1 – 3 решалась численно на одномерной пространственной сетке с постоянным шагом. В начальный момент времени на сетке задавалась температура $T_0 = 1803\text{K}$. Считалось, что нагрев до этой температуры происходит схеме, где отсутствует влияние объемного поглощения тепла от фазового перехода. Задача решалась методом конечных разностей. Коэффициенты теплопроводности и теплоемкости моделировались следующим образом:

$$c(r, t) = c_1 b(r, t) + c_2 (1 - b(r, t)) \quad (6)$$

$$k(r, t) = k_1 b(r, t) + k_2 (1 - b(r, t)),$$

здесь c_1 - удельная теплоемкость твердой компоненты равна $450 \text{ J}/(\text{kg}\cdot\text{K})$, c_2 - удельная теплоемкость расплавленной компоненты $824 \text{ J}/(\text{kg}\cdot\text{K})$, k_1 - теплопроводность твердой компоненты равна $15 \text{ W}/(\text{m}\cdot\text{K})$, а k_2 - теплопроводность жидкой компоненты $32 \text{ W}/(\text{m}\cdot\text{K})$. Для аппроксимации по времени использовалась неравномерная сетка. Когда температура и количество новой фазы испытывает значительный скачек - шаг по времени уменьшается. Это происходит до тех пор, пока изменение во времени температуры не будет иметь заданное значение. Такая адаптация необходима для увеличения точности расчета. Совместно с уравнениями распространения энергии итерационно согласовывались уравнения кинетики фазового перехода.

4. Результаты моделирования

При спекании используются металлические порошки с частицами микронных размеров. Радиусы частиц использовались в интервале $R = 10 \div 100 \text{ мкм}$; Для таких частиц можно использовать макроскопические параметры без учета размерных эффектов [8]. В расчетах использовалась интенсивность лазерного луча, характерная для лазерного спекания $I = 1 \div 60 \text{ кВт}/\text{см}^2$. Результаты численного моделирования представлены на рисунках 1-4.

На рисунке 1 представлена динамика температурного поля частицы и значения объемной доли расплавленного вещества для двух значений радиальной координаты. Температурная шкала показана по отношению к температуре плавления. Сплошные кривые представляют распределения на поверхности частицы, а пунктирные в центре. Заметно, что нарастание новой фазы наблюдается только при значительном перегреве. На момент начала плавления величина перегрева достигает своего первого максимума. Например на рисунке 1 перегрев на поверхности равен $1.168 \cdot T_m$ и слабо зависит от мощности излучения и размеров частицы. Он определяется кинетическими параметрами плавления. Когда же процесс плавления начинается - перегрев резко уменьшается за счет резкого возрастания доли новой фазы производная, которой входит в (1) как сток тепла. Дальнейший нагрев частицы лазерным

излучением приводит вновь к увеличению перегрева и скорости роста объемной доли внутри частицы. Однако в центре частицы новая фаза растет медленно, поэтому перегрев опять увеличивается. Ближе к окончанию процесса центр частицы разогревается до температуры интенсивного зародышеобразования. Видно, что b интенсивно растет, а рост температуры прекращается.

На рисунке 2 показана динамика производной по времени объемной доли для различных значений радиальной координаты. Видно, что характер изменения во времени объемной доли на поверхности значительно отличается от характера изменения в центре частицы. На поверхности $\partial b / \partial t$ имеет один резкий максимум соответствующий первому максимуму температуры поверхности частицы. При продвижении к центру частицы максимум производной уменьшается и имеет более плавный характер. В центре же рост новой фазы значительно медленнее, чем на хорошо прогреваемой поверхности. Это связано с тем, что поверхность быстро разогревается

лазерным излучением, а центр частицы прогревается только за счет

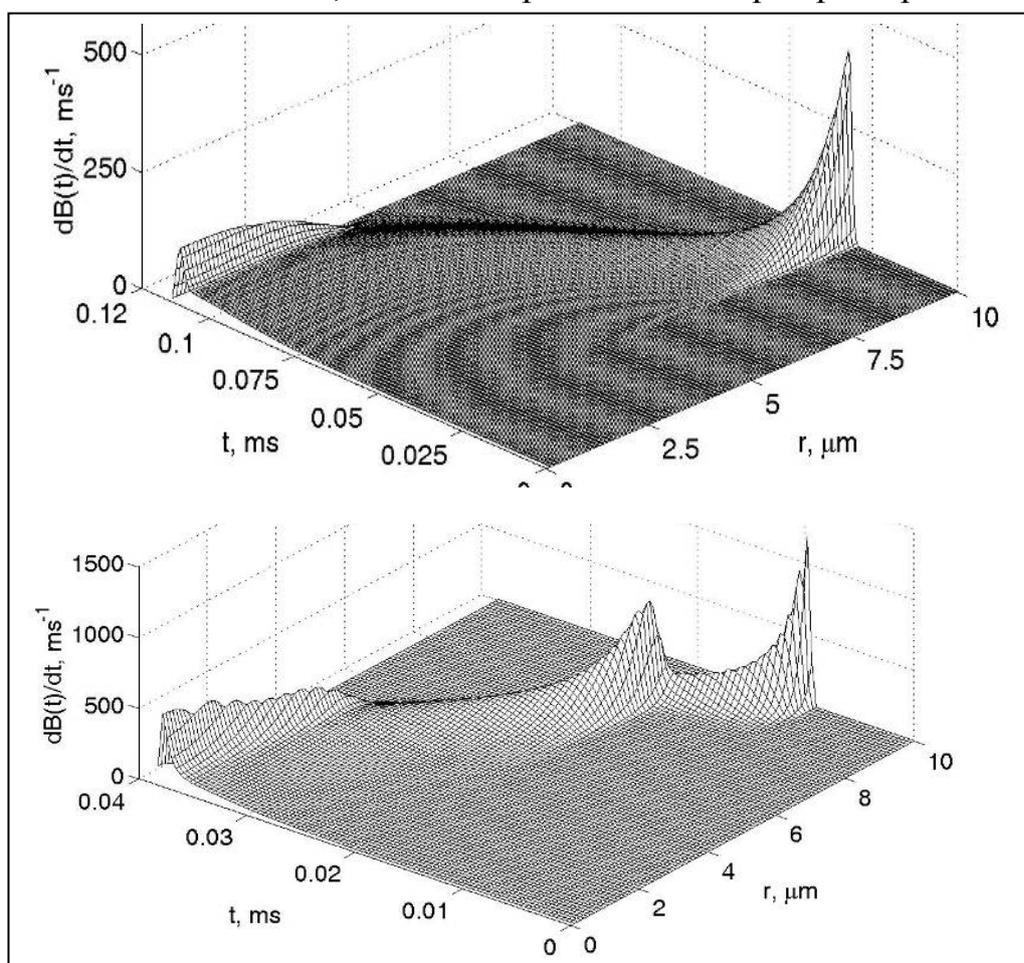


Рис. 3. Динамика скорости роста новой фазы для различных значений радиальной координаты. Интенсивность $I=20\text{кВт/см}^2$ (а) и $I=60\text{кВт/см}^2$ (б). Радиус частицы $R=10\text{мкм}$.

теплопроводности. Так же рисунок 3 отображает интенсивность объемного поглощения энергии вследствие плавления (последний член в уравнении (9)). При плавлении поверхности эта интенсивность высока (за счет этого падает температура) и

уменьшается по мере продвижения вглубь частицы (энергия нагрева доминирует над объемным поглощением). При увеличении интенсивности можно наблюдать два и более пространственно разделенных максимума скорости роста новой фазы, что будет соответствовать двум и более резким падениям температуры. На рисунке 3а видно два максимума на поверхности частицы и в ее центре, а на 3б - три максимума. Это связано с достижением в этих точках температуры интенсивного зародышеобразования.

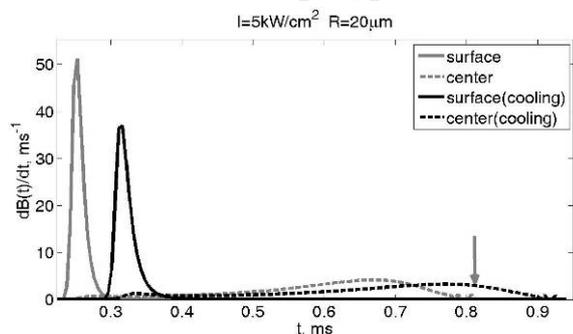


Рис. 4. Динамика скорости роста новой фазы для различных значений радиальной координаты с учетом (черный) охлаждения и без (серый). Интенсивность $I=5\text{kW/cm}^2$. Радиус частицы $R=20\mu\text{m}$.

Охлаждение не изменяет качественно кинетическую картину плавления, но его учет значительно влияет на количественные показатели. На рисунке 4 показано влияние охлаждения на кинетику фазового перехода. Представлены скорости образования новой фазы для двух значений радиальной координаты (на поверхности – сплошная, в центре - пунктирная). Красные кривые соответствуют расчету без охлаждения, а синие - с его учетом.

Стрелкой показано время окончания расчета без учета охлаждения. Видно, что плавление начинается значительно позже, если учитывать охлаждение частицы. Время задержки плавления равно 0.2 мс и 0.3 мс без учета и с учетом охлаждения соответственно. Так же различно и время плавления, максимум скорости образования новой фазы при охлаждении частицы достигает меньших значений.

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 поглотительной 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. Так же исследовано влияние кинетики плавления на температурные поля частицы различных размеров в зависимости от интенсивности облучения. Показано, что плавление микрочастиц происходит при значительном перегреве и имеет резко нелинейный характер. Выявлено, что процессы плавления могут протекать не одинаково на поверхности и в центре частицы в зависимости от интенсивности.

Список литературы

1. Лазерные технологии обработки материалов: современные проблемы фундаментальных исследований и прикладных разработок.//Под редакцией В.Я. Панченко. М.:Физматлит, 2009 -664 с.
2. Шишковский И. В. «Лазерный синтез функциональных мезоструктур и объемных изделий». Физматлит. М.: 2009, 424 стр.
3. В. Xiao, Y. Zhang, Laser sintering of metal powders on sintered layers. *J. of Phys. D: Appl. Phys.* **40**, 6725-6734, 2007.
4. Y. Zhang, A. Faghri, C.W. Buckley, T.L. Bergman, Three-dimensional sintering of two-component metal powders with stationary and moving laser beams. *Int. J. of Heat and Mass Transfer* **49**, issue 7-8, 1489-1492, 2006.
5. Колмогоров А.Н. К статистической теории кристаллизации металлов. Изв. АН СССР, сер. Мат., 1937, вып. 3, с.355-359.
6. Беленький В.З. Геометрико-вероятностные модели кристаллизации. - М.: Наука, 1980, 88с. 33
7. Жвавий С.П., «Моделирование процессов плавления и кристаллизации монокристаллического кремния при воздействии наносекундного лазерного излучения» Журнал технической физики, 2000, том 70, вып. 8 стр. 58-62
8. Скрипов В.П., Коверда В.П. «Спонтанная кристаллизация переохлажденных жидкостей» М., 1984, 231 стр.
9. Евтеев А.В., Косилов А.Т., Левченко Е.В.,. Логачев О.Б. «Кинетика изотермической нуклеации в переохлажденном расплаве железа». Физика твердого тела, 2006, том 48, вып. 5 стр. 557-582.
10. Свойства и применение дисперсных порошков // Сборник под ред. Скорохода В. В. - Киев: Наукова думка, 1986. - 180 с.

Аннотация

Численно исследованы процессы теплопереноса с учетом кинетики плавления в микрочастице, происходящие при селективном лазерном спекании. Модель базируется на самосогласованных уравнениях для температурного поля и кинетики фазового перехода (типа уравнения Колмогорова). Исследовано влияние параметров частиц и излучения на динамику плавления частицы. Показано, что плавление микрочастиц происходит при значительном перегреве и имеет резко нелинейный характер. Так же исследовано влияние радиационного и кондуктивного охлаждения на характерное время процесса плавления.

Abstract

Processes of heat transfer due to kinetics of melting in microparticle occur at selective laser sintering have been investigated numerically. The model is based on self-consistent equations of energy and kinetics of phase change (Kolmogorov type equations). Influence of parameters of particles and laser radiation on the dynamics of melting is considered. It is shown that melting goes with considerable superheating and have sharply nonlinear behavior. The influence of conductive and radiative cooling on characteristic time of melting is also investigated.