

МОДЕЛИРОВАНИЕ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ ПРИ СЕЛЕКТИВНОМ ЛАЗЕРНОМ СПЕКАНИИ

Р.В. Гришаев, Ф.Х. Мирзаде, М.Д. Хоменко

*Институт проблем лазерных и информационных технологий Российской академии наук
140700, Московская обл., г. Шатура, ул. Святоозерская, 1.*

E-mail: top20072007@rambler.ru

Введение

Настоящая статья посвящена численному моделированию СЛП металлических порошков. Для получения высококачественного конечного изделия необходим оптимальный выбор условий проведения технологического процесса. Здесь следует иметь в виду как параметры лазерного излучения (мощность излучения, размер пятна фокусировки, временные характеристики, скорость сканирования луча), так и параметры потока частиц (скорость потока, концентрация и размеры частиц, физические и химические свойства порошка). Эти параметры определяют качество и микроструктурные свойства наплаваемых слоев. Эмпирический подбор этих параметров крайне затруднителен и трудоёмок. Задача поиска оптимальных режимов проведения процесса для достижения целевых параметров материала и изделия требует более глубокого понимания физических процессов и явлений и разработки физико-математических моделей с применением численных методов.

К настоящему времени в литературе исследовались (как теоретически, так и экспериментально) тепловые и тепло-гидродинамические модели [1-4] динамики формирования ванны расплава на поверхности подложки при СЛС с учетом поглощения и распространения лазерного излучения в системе дисперсных частиц, испарения частиц, реакций окислений частиц. Рассматривались модели процесса прямого лазерного спекания двухкомпонентной металлической порошковой смеси, учитывающей сопряженные процессы тепло - и массопереноса и гидродинамики расплава [5,6]. Подробная модель нагрева и плавления частиц инжектируемых микрочастиц проведена в работе [7], в которой учитывалась кинетика фазового перехода (ФП).

Целью настоящей работы является исследование сопряженных процессов переноса тепла и фазовых превращений (плавления/кристаллизации) при СЛП, в рамках модели, включающей в себя нелинейные уравнения теплопроводности и кинетическое уравнение для конверсионных полей. Фазовое превращение, рассматриваемое как неравновесный кинетический процесс, связано с возникновением и ростом частиц новой фазы в метастабильной (перегретой или переохлажденной) системе. Моделирование кинетики фазового превращения проводится на основе уравнения Колмогорова-Аврами для неоднородных конденсированных систем.

1. Физическая модель

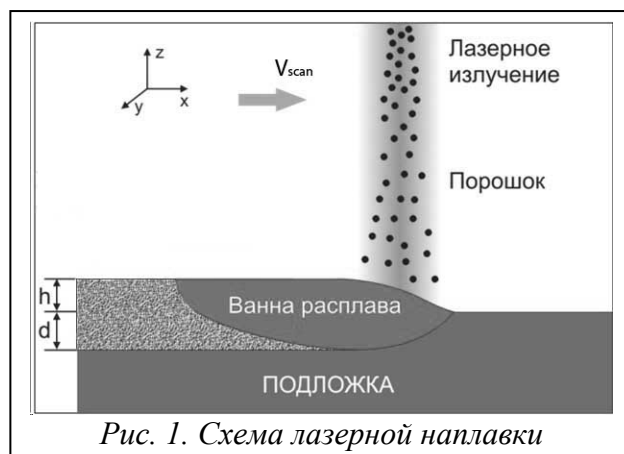
Процесс послойного нанесения ультрадисперсных частиц порошка при лазерной наплавке технически реализуется при помощи дозаторов, подавая (коаксиально) частицы порошка газовым потоком в зону действия излучения непрерывного лазера. Процесс СЛС с инъекцией порошка схематически показан на Рис. 1.

В начальный момент времени на твердую поверхность мишени падает лазерный луч, движущийся от некоторой точки x_0 в положительном направлении оси x со скоростью V_{scan} . Считаем, что твердая фаза контактирует с газом. Одновременно, в область воздействия лазерного излучения (ЛИ) газовым потоком вносятся монодисперсные частицы (для простоты, сферической формы) однокомпонентного порошка с начальным радиусом r_{p0} и температурой T_0 . Лазерное излучение, проходящее сквозь потока частиц, селективно поглощается и рассеивается движущимися частицами порошка, а также поглощается и рассеивается на поверхности металлической подложки. Поглощенная частицами энергия тратится на их нагревание и расплавление и за вычетом потерь тепла на теплопроводность и радиационное охлаждение. Энергия, поглощенная поверхностью и перенесенная на поверхность частицами, расходуется на нагревание поверхностного слоя мишени.

Те участки поверхности, которые поглотили достаточное количество энергии, расплавляются на ту или иную глубину, образуя ванну расплава. В дальнейшем, когда лазерный луч покидает эти участки, происходит их остывание за счет теплопередачи в непрогретые части образца, последующая кристаллизация и формирование наплавленного слоя. Распределение интенсивности в лазерном пучке и профили концентрации порошка в струе считаются гауссовыми. Считаем, что частицы порошка, попадающие в ванну расплава, мгновенно расплавляются. Ограничимся значениями интенсивности излучения (I_0), при которых практически отсутствует испарение частиц порошка и поверхностного слоя подложки. Большие интенсивности приводят к образованию плазменного факела, который негативно влияет на наплавку. Влияние гидродинамического переноса тепла учитывается введением эффективного коэффициента теплопроводности в зоне расплава [8].

2. Уравнения прямого моделирования

Математическая постановка задачи включает в себя сопряженную систему уравнений для эволюции свободной поверхности границы раздела фаз жидкость - газ (Ж - Г), переноса энергии для газовой, жидкой и твердой фаз и кинетики фазовых превращений (плавления и кристаллизации). В данной



работе представлены основные моменты, а более подробный вывод уравнений и описание математической модели представлены в нашей работе [9]

1.1 Уравнение свободной поверхности.

Задача нахождения свободной границы сводится к решению уравнения в частных производных [10]. В общем случае, когда эволюция функции уровня определяется инжекцией металлических частиц и гидродинамическим течением жидкости, уравнение для функции уровня имеет вид:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \alpha \frac{\delta \dot{m}}{\pi \rho_p d_j^2} \exp\left(-\frac{8 \cdot r^2}{d_j^2}\right) \cdot |\nabla \phi| = 0, \quad (1)$$

где α - эффективность захвата частиц порошка поверхностью, \dot{m} - скорость подачи порошка, ρ_p - плотность порошка, d_j - диаметр струи порошка.

2.2 Уравнение переноса тепла.

Для бинарной (двухфазной) системы уравнение теплопереноса с ФП может быть записано в виде [26]:

$$c\rho \frac{\partial T}{\partial t} = \nabla(\lambda \text{div} T) + q\delta(\phi) + \rho(1-f_l)\Delta c \frac{\partial T}{\partial t} - \rho L \frac{\partial f_l}{\partial t} \quad (2)$$

В уравнении энергии (2) первое слагаемое в правой части характеризует перенос тепла за счет теплопроводности (c , λ и ρ - теплоемкость, теплопроводность и плотность среды соответственно), следующее слагаемое это поток энергии на границе жидкость - газ умноженный на дельта функцию, следующие два - мощность тепловых источников при ФП, наконец, последнее учитывает потери тепла при ФП (L - теплота плавления). $f_l(x, y, z, t) = M_l / M_0$ - массовая доля жидкой фазы, образовавшейся/исчезнувшей в точке к моменту времени t (M_0 и M_l - соответственно масса всего расплава и жидкой фазы. $f_l = 0$ для твердой фазы, $f_l = 1$ для полностью превратившей фазы и для двухфазной зоны может изменяться от нуля до единицы). Здесь мы полагаем, что влиянием течения жидкости можно пренебречь. Заметим, что последнее оправдано, если толщина слоя расплавленного металла достаточно мала.

Для потока на границе Ж-Г, можно записать:

$$q = \frac{2P_{las}}{\pi R_b^2} \exp\left(-\frac{2r^2}{R_b^2}\right) \exp\left(-\frac{3Q_{ext}\dot{m}h}{\pi \rho_p D^2 v_p}\right) + q_p - h(T - T_0) - \sigma \varepsilon (T^4 - T_0^4), \quad (3)$$

здесь P_{las} - мощность лазерного луча, $r = \sqrt{(x - vt)^2 - y^2}$, v - скорость сканирования, вторая экспонента учитывает затухание лазерного излучения при прохождении коаксиального потока частиц порошка, q_p - учитывает тепловое влияние частиц r_p и v_p радиус и скорость частиц соответственно, D - диаметр потока частиц на подложке, Q_{ext} - коэффициент перекрытия потока порошка лазерным излучением.

Предполагается, что диаметр лазерного пучка близок к диаметру потока

Таблица 1. Параметры процесса

| | | |
|-------------------|---------------------------|---------|
| P, кВт | Мощность излучения лазера | 0,6-1,5 |
| V_{scan} , мм/с | Скорость сканирования | 12-25 |
| m, г/мин | Скорость подачи порошка | 1-6 |
| R, мм | Радиус лазерного луча | 0,35 |
| d_j , мм | Диаметр пучка порошка | 0,7-0,8 |
| R_p , мкм | Размер частиц порошка | 50 |

порошка, поэтому $Q_{ext} \approx 1$. Считается, что частицы попадая в ванну расплава нагреваются/охлаждаются до ее температуры. Энергия, которую дополнительно вносят частицы можно рассчитать:

$$q_p = \begin{cases} F_p \rho_s [c_s (T_{particle} - T_{melting}) + c_l (T_{melting} - T_{surface}) - L], & T_{particle} < T_{melting} \\ F_p \rho_l c_l (T_{particle} - T_{surface}), & T_{particle} > T_{surface} \end{cases}$$

Твердые частицы нагреваются до температуры плавления, расплавляются, а затем нагреваются до температуры ванны расплава, тем самым у нее отбирая энергию. Горячие капли остывают до температуры ванны расплава тем самым отдают тепло.

1.2 Уравнение кинетики плавления/кристаллизации.

Согласно [11] кинетика массового фазового превращения может быть описана при помощи уравнения:

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

где $\Delta T = T - T_m$ перегрев в случае плавления, $\Delta T = T_m - T$ - переохлаждение в случае кристаллизации. Использование этого уравнения подробно описано в работе [9]

Система уравнений (1), (2) и (4) замкнута и полностью описывает поведение температурного поля и распределение объемных долей новой фазы при селективном лазерном нанесении металлических порошков на субстраты.

3. Результаты расчетов

В рамках рассматриваемой модели было проведено численное моделирование теплопереноса при одновременном протекании фазовых превращений (плавления/ кристаллизации) в процессе наплавки частиц порошка *Fe* в нескольких режимах. Тепловые параметры для *Fe* взяты из работ [11, 12]. Основные параметры процесса приведены в Таблице 1. На рисунке 2 приведено распределение температуры и профили объемных долей жидкой фазы в плоскости *x-z*, черным показаны границы области расплава, а оттенками серого - температурные поля. Наблюдается расхождение профилей полей температуры и объемных долей новой фазы.

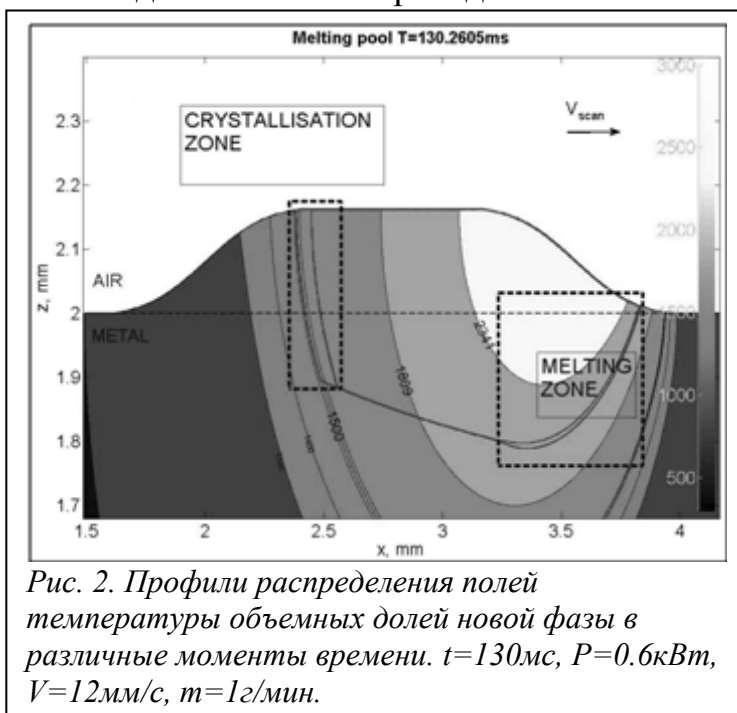


Рис. 2. Профили распределения полей температуры объемных долей новой фазы в различные моменты времени. $t=130\text{мс}$, $P=0.6\text{кВт}$, $V=12\text{мм/с}$, $m=1\text{г/мин}$.

Изотерма температуры плавления 1809К показана на рис. 2, а плавление

происходит при значительном перегреве. Это происходит вследствие того, что скорость нуклеации на температуре плавления равна нулю, как будет показано ниже, и возрастает только с ростом перегрева. Кристаллизация так же инициируется после достижения определенных значений переохлаждения.

На рис. 3 оттенками серого показано распределение абсолютных значений скорости охлаждения в зоне кристаллизации в координатах x - z . Заметим, что скорость охлаждения по мере уменьшения температуры и удаления от источника лазерного излучения уменьшается. В зоне плавления поглощается скрытая теплота плавления, а в зоне кристаллизации тепло выделяется. Поэтому зона кристаллизации прогревается сильнее, чем остальные участки

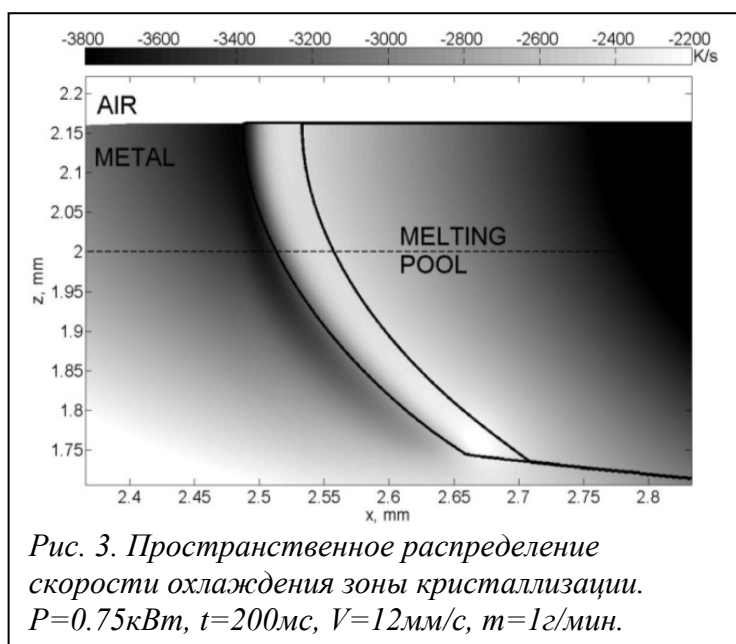


Рис. 3. Пространственное распределение скорости охлаждения зоны кристаллизации. $P=0.75\text{кВт}$, $t=200\text{мс}$, $V=12\text{мм/с}$, $m=1\text{г/мин}$.

образца. Нижняя часть зоны кристаллизации теплее, чем приповерхностная, где имеет место потери тепла из-за интенсивного теплообмена с воздухом (Рис. 3). Более прогретая зона после кристаллизации резко начинает остывать (скорость охлаждения увеличивается). Численные расчеты показали, что характерная скорость охлаждения зависит от мощности излучения и является величиной порядка 10^3 - 10^4 К/с. Так же расчеты показывают, что скорость охлаждения падает со временем, до выхода максимальной температуры на стационар.

На рис. 4а оттенками серого показана скорость нуклеации в зоне кристаллизации (шкала соответствует значениям скорости) в момент времени, когда высота наплавленного слоя выходит на стационарное значение. Здесь черным пунктиром показан уровень подложки, а черными линиями обозначены три контура жидкой фазы соответствующие трем различным значениям объемных долей: $g_l=0.01$, $g_l=0.95$ и $g_l=0.99$. Видно, что скорость нуклеации достигает заметных значений для ФП в переходной зоне жидкость - твердое тело. На рис. 4б показаны температурные зависимости скорости нуклеации и скорости роста в сечении А-А на рис. 4а. Отметим, что интенсивный процесс кристаллообразования происходит, когда достигается температура $0.85T_{\text{melt}}$.

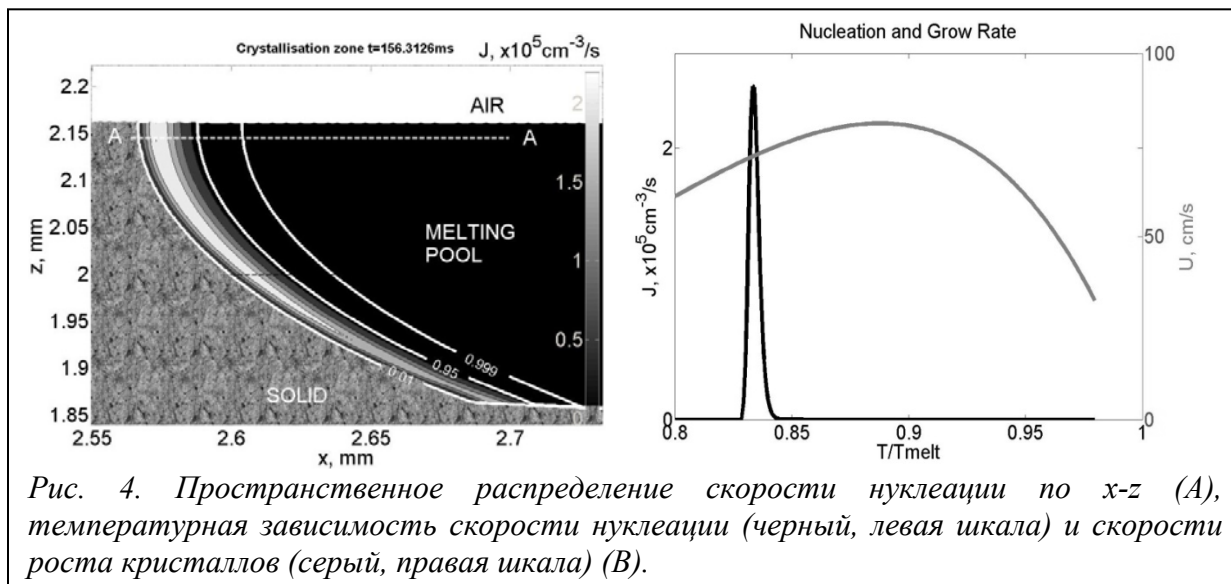


Рис. 4. Пространственное распределение скорости нуклеации по x - z (А), температурная зависимость скорости нуклеации (черный, левая шкала) и скорости роста кристаллов (серый, правая шкала) (В).

В дальнейшем скорость нуклеации с ростом переохлаждения резко возрастает, достигая значений порядка $10^5 \text{ cm}^{-3} \text{ s}^{-1}$. Дальнейший рост переохлаждения приводит к ее падению, что обусловлено ростом объемной доли новой фазы. Расчеты показывают, что характерные для железа переохлаждения [12] достигаются на скоростях охлаждения наблюдаемых в процессе СЛС. Так же можно заметить, что скорость роста кристаллов имеет максимум в зоне, где кристаллизации еще не происходит, а в зоне нуклеации она является убывающей функцией. Как видно из (6) новая фаза может увеличиваться вследствие зародышеобразования, а так же роста уже образовавшихся центров новой фазы.

Обнаружено качественное различие динамики температуры поверхности и объемной доли твердой фазы в ходе процесса кристаллизации для разных скоростей охлаждения (Рис. 5). При больших скоростях охлаждения изменение температуры имеет монотонный характер. При малых - падение температуры не монотонно. Такое поведение температуры обусловлено тепловыделением при кристаллизации: несущественным в первом случае и значительным во втором.

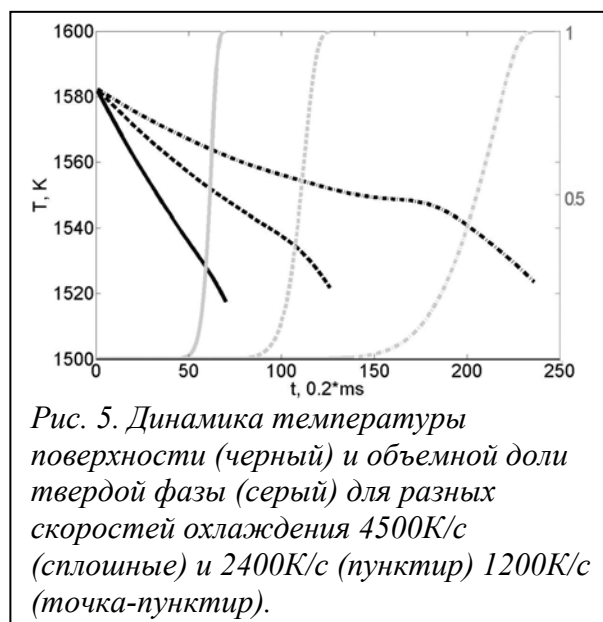


Рис. 5. Динамика температуры поверхности (черный) и объемной доли твердой фазы (серый) для разных скоростей охлаждения 4500K/c (сплошные) и 2400K/c (пунктир) 1200K/c (точка-пунктир).

Заметим, что основными входными параметрами СЛС являются мощность ЛИ, скорость сканирования и скорость подачи порошка. Максимальная температура системы, глубина проплавления и высота наплавки - это наиболее важные выходные параметры, по которым можно определить поведение расплава в процессе ЛН (СЛС). Было проведено параметрическое исследование на двумерной модели, (Таблица 1).

На рис. 6 показана зависимость высоты наплавки и глубины проплавления от скорости сканирования. Расчеты выполнены при постоянной величине подачи порошка равной $\dot{m} = 1$ г/мин, и для двух значений мощности ЛИ $P = 0.6$ кВт (пунктир) и $P = 0.75$ кВт (сплошная линия). Видим, что глубина проплавления уменьшается с увеличением скорости сканирования. Высота наплавки зависит от скорости сканирования слабее, чем глубина проплавления.

При увеличении мощности ЛИ энергия, вносимая в ванну расплава, увеличивается, что приводит к увеличению глубины проплавления.

Высота наплавленного слоя влияет на проплавление подложки поэтому для определения влияния ЛИ на глубину проплавления она фиксируется подбором скорости подачи порошка и скорости сканирования.

На рис. 7 приведены зависимости глубины проплавления от мощности ЛИ при фиксированной высоте наплавленного слоя. Черным цветом показаны результаты для $h=60$ мкм ($\dot{m} = 1$ г/мин $V_{scan} = 16$ мм/с), а серым - $h=182$ мкм ($\dot{m} = 3$ г/мин $V_{scan} = 16$ мм/с). Глубина проплавления растет с увеличением мощности ЛИ. Так же на рис. 7 можно проследить влияние скорости подачи порошка на рассеивание ЛИ. Более плотный поток пропускает меньше лазерной мощности к подложке, поэтому глубина ее проплавления уменьшается.

Заключение и выводы

Разработаны 3D численная физико-математическая модель процесса СЛС, вычислительный алгоритм и программный комплекс, позволяющие прогнозировать пространственно-временную динамику полей температуры и объемных долей новой фазы при лазерном нанесении на подложку покрытий из однокомпонентного порошка. Модель базируется на решении самосогласованных нелинейных уравнениях теплопроводности и кинетики фазовых превращений.

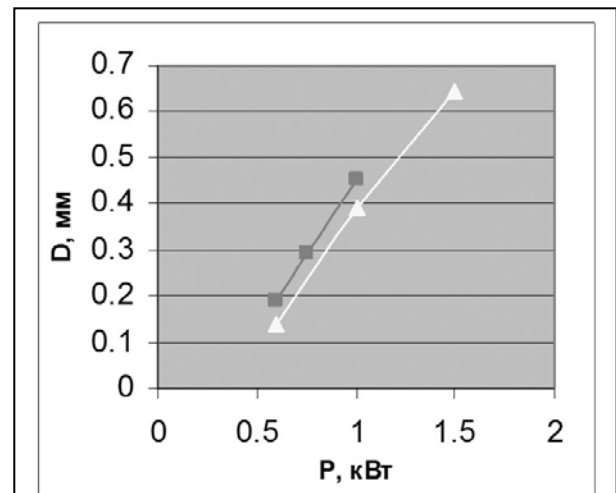


Рис. 6. Глубина проплавления (черный) и величина наплавленного слоя (серый) в зависимости от скорости сканирования для разных мощностей (пунктир - 0.6кВт сплошная - 0.75кВт)

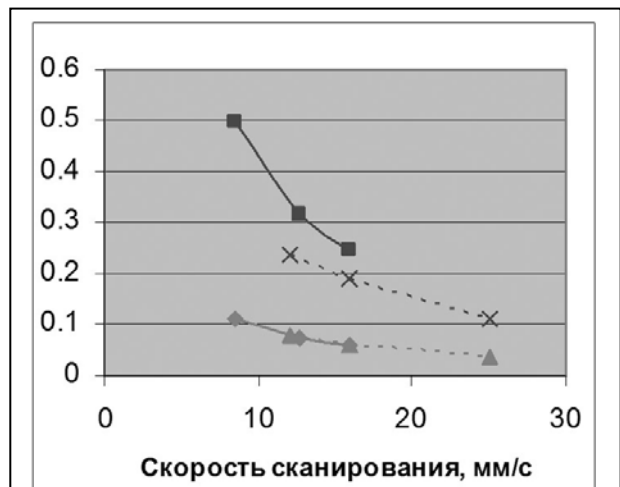


Рис. 7. Зависимость глубины проплавления от мощности ЛИ при постоянной величине наплавки $\dot{m} = 1$ г/мин (черный), $V_{scan} = 16$ мм/с (серый), $\dot{m} = 3$ г/мин, $V_{scan} = 16$ мм/с (белый)

Рассчитана пространственно-временная динамика изотерм, свободной поверхности расплава и профилей распределения жидкой и твердой фазы для различных параметров процесса и характеристик излучения. Поскольку плавление происходит с заметным перегревом, а кристаллизация с переохлаждением, зона расплава имеет границу, не совпадающую с изотермой температуры плавления.

Обнаружено качественное различие поведения процесса кристаллизации расплава при низкой и высокой скоростях сканирования луча. При больших скоростях охлаждения изменение температуры имеет монотонный характер. При малых - падение температуры не монотонно. Это связано с выделением скрытой теплоты при кристаллизации: несущественным в первом случае и вполне заметным во втором.

Проанализировано влияние потока массы частиц, мощности ЛИ и скорости сканирования на поведение во времени ванны расплава, а так же на максимальную температуру системы. Установлено глубина проплавления растет с увеличением мощности, а высота наплавки уменьшается с увеличением скорости сканирования. Профиль наплавленного слоя согласуется с известными экспериментальными данными. Полученные результаты позволяют разработать предсказательные рекомендации по параметрам лазерного воздействия при СЛС с точки зрения оптимальных режимов обработки, контроля структуры и свойств наплавленного материала.

Работа выполнена при поддержке РФФИ: грант № ЮАР-а 11-08-93966, а так же Минобрнауки России по государственному контракту от 17.05.2012 № 07.524.12.4019

1. Gladush G. G., Smurov I. // *Physics of Laser Materials Processing: Theory and Experiment* Berlin, Springer-Verlag, 2011, 534 p.
2. Shaoyi Wen and Yung C. Shin "Modeling of transport phenomena during the coaxial laser direct deposition process" *J. Appl. Phys.* **108**, 044908 (2010); <http://dx.doi.org/10.1063/1.3474655>
3. Hoadley A. F., Rappaz M. // *A thermal model of laser cladding by powder injection* // *Metal. Trans.*, 1992, Vol. 238. p. 632-637
4. J. Choi L. Han Y. Hua "Modeling and Experiments of Laser Cladding With Droplet Injection" *Journal of Heat Transfer* **978** / Vol. 127, (2005)
5. V.G. Niziev, A.V. Koldoba, F.Kh. Mirzade, V.Ya. Panchenko, Yu.A. Poveschenko, M.V. Popov, *Mathematical modeling*, 2011, Vol 23, №4, pp. 90-112
6. V.G. Niziev, F.Kh. Mirzade, V.Ya. Panchenko, G.V. Ustugova, V.M. Chechetkin, *Mathematical modeling*, 2011, Vol 23, №8, pp. 75-89
7. Grishaev R.V., Mirzade F.Kh., Khomenko M.D., "Numerical modeling of heating and melting of microparticle under laser radiation" // *Perspectivnie materiali*, 2011, Special Vol №10, pp. 135-142
8. C. Lampay, A. F H Kaplanz, J. Powllyx and C. Magnusson, *J. Phys. D: Appl. Phys.* 30 (1997) 1293–1299.
9. Mirzade F.Kh., Khomenko M.D., Niziev V.G., Grishaev R.V., Panchenko V.Ya. "Three dimensional model of melting and crystallization kinetics during laser cladding process" // *SPIE Proceedings of 19th International Symposium on High-Power Laser Systems and Applications* (2012) 8677-15

10. S. Osher, R. Fedkiw, "Level Set Methods and Dynamic Implicit Surfaces", Applied mathematical sciences №153 Springer-Verlag New York (2003)
11. Skripov V.P., Koverda V.P., Spontaneous crystallization of undercooled liquid. M.: Nauka, 1984, 231 p.
12. Skapski A.S. A theory of surface tension of solids I. Application to metals. - Acta met., 1956, vol. 4, № 6, p. 576-582.
13. A.V. Evteev, A.T. Kosilov, E.V. Levchenko, O.B. Logachev, Kinetics of isothermal nucleation in supercooled melt of iron, Fizikatvyordogotela, 2006, Vol. 48, issue 5, pp. 557-582.