МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ДОЗИРОВАННОГО ЭНЕРГО- И МАССОПЕРЕНОСА ПРИ СОЗДАНИИ НАНОРАЗМЕРНЫХ ПОКРЫТИЙ ЗАДАННОЙ ТОЛЩИНЫ И СВОЙСТВ

Бутенко В.И., Пономаренко А.С. *(кафедра механики ТТИ ЮФУ, г. Таганрог, Россия)*

В современном машиностроении все большее распространение находят лазерные технологии, в том числе связанные с нанесением покрытий. Особенно перспективным является создание на поверхности деталей из железоуглеродистых сплавов наноструктурных покрытий заданной толщины и свойств. В связи с этим возникла необходимость в разработке математической модели процесса дозированного энерго- и массопереноса при создании наноразмерных покрытий кластерного типа в условиях импульсного действия источника возбуждения.

Известно, что построение современных аналитических моделей распространения субстанций, в том числе энергии и вещества, базируется на гипотезе неравновесной термодинамики [1], согласно которой вблизи равновесного состояния постулируется линейная связь между потоками энергии (тепла) q и термодинамическими сигналами x_i, определяемая соотношением

$$q = \sum L_{iк} \cdot x_i \ , \qquad (1)$$

где $L_{iк}$ – кинематические коэффициенты, характеризующие энерго- и массоперенос.

Частными выражениями этой гипотезы является закон Фика о переносе вещества

$$q = -D \cdot grad\ C \qquad (2)$$

и закон Фурье о переносе тепла

$$q = \lambda \cdot \mathrm{grad}\, T \ , \qquad (3)$$

лежащие в основе вывода следующих дифференциальных уравнений:

$$\frac{\partial C}{\partial T} = D \cdot \nabla^2 C \ ; \qquad (4)$$

$$\frac{\partial C}{\partial T} = \alpha \cdot \nabla^2 T \ , \qquad (5)$$

где D – коэффициент диффузии;

∇ – оператор Гамильтона;

C – коэффициент температуропроводности;

α – удельная теплоемкость материала;

T – температура;

λ – коэффициент теплопроводности.

Уравнения (4) и (5) могут быть использованы для описания эволюции высокоэнергетичного импульсного и температурного полей соответственно при моделировании процессов дозированного энерго- и массопереноса.

Современное моделирование процесса переноса, в том числе и моделирование распространения субстанции при импульсном высокотемпературном воздействии на материалы [2], основываются на классических представлениях. Предполагается, что при высокоинтенсивном возмущении поля (концентрации вещества или температуры) линейная связь между потоками и градиентами соответствующих субстанций наступает через определенный период τ_r, который можно назвать временем релаксации. От этого параметра зависит дозированность энерго- и массопереноса и в нем находят свое непосредственное отражение причинно-следственные отношения процесса создания наноразмерных покрытий.

Пусть в начальный период $t < \tau_0$ энергия излучения практически полностью поглощается электронами в поверхностном слое толщиной $10^{-6}…10^{-8}$ м. Вследствие этого происходит резкое повышение электронной температуры T_e, тогда как температура кристаллической решетки T_i практически остается постоянной. С течением времени интенсивность передачи энергии свободным электронам кристаллической решетки возрастает. Начиная со времени $t = \tau_0$, разность температур $T_0 - T_i$ становится незначительной, а поле характеризуется общей температурой. Этот период обычно принимают за нижнюю границу предела релаксации τ_r температурного поля, который связывают со свойствами возмущающего источника. Верхняя граница предела релаксации характеризуется внутренними свойствами моделируемой системы. Очевидно, что между периодом релаксации микропроцессов τ_0 и макровременем релаксации τ_r существует определенная связь $\tau_r = \tau_r(\tau_0)$.

В первом приближении при моделировании процесса дозированного энерго- и массопереноса эту связь можно получить, основываясь на модели случайных блужданий, согласно которой дискретные перемещения частиц при создании наноразмерных покрытий происходят независимо друг от друга, т.е. между направлениями нет корреляции и все они равновероятны. В этом случае процесс переноса признака происходит с бесконечной скоростью, а разностная модель распространения поля согласуется с классической непрерывной моделью [3]. Если же частицы обладают «памятью», т.е. в случае одномерных дискретных перемещений, у которых вероятность перескока в прямом направлении p не равна вероятности перескока в обратном направлении q и, следовательно, существует корреляция между скачками $\gamma = p - q$, то это приводит к релаксационной модели энерго- и массопереноса.

Количественной характеристикой «памяти» перемещающихся частиц при создании наноразмерных покрытий, ответственной за перенос определенной субстанции, может служить фактор корреляции

$$f = \frac{1-\gamma}{1+\gamma}, \tag{6}$$

полученный на основании модели случайных блужданий [3]. Учитывая конечно-разностное уравнение, можно получить связь макроскопического параметра τ_r с микроскопическим параметром τ_0 в виде [1]

$$\tau_r = f^{-1} \cdot \tau_0 . \tag{7}$$

При дозированном энерго- и массопереносе параметр τ_r можно найти, исходя из специфики распространения в материале температурного поля. Пусть в разрабатываемую модель вносится свойство инерции тепла (энергии), по причине которой при интенсивном возмущении температурного поля происходит запаздывание теплоотвода во внутренние слои металла. Тепло локализуется в приповерхностном слое некоторой толщины δ_m. Отношение квадрата этого характерного размера к параметру ,характеризующему скорость изменения температурного поля, может быть принято за верхнюю оценку времени релаксации.

Согласно этим предположениями связь между потоком и градиентом субстанции (например, температуры T) выражается следующим уравнением с запаздывающим аргументом [1]:

$$q(x,\ t+\tau_r) = -\lambda \cdot \mathrm{grad}\, T(x,\ t). \tag{8}$$

Учитывая уравнение (8) и закон сохранения энергии можно получить соответствующее уравнение дозированного энерго- и массопереноса при создании наноразмерных покрытий заданной толщины и свойств в условиях импульсного действия источника возбуждения с отклоняющимся аргументом:

$$\frac{\partial T(x, t+\tau_r)}{\partial T} = a \cdot \nabla^2 \cdot T(x, t). \tag{9}$$

Предлагаемая релаксационная модель дозированного энерго- и массопереноса (9) имеет принципиальное отличие от классической, так как в ней находят отражение не только эволюционные свойства распространения субстанции, но и их волновой, а точнее фронтовой характер. В результате становится возможным управлять процессами энерго- и массопереноса, получая при этом наноразмерные покрытия практически любой толщины с заданным набором эксплуатационных свойств.

Список литературы: 1. Семенцев А.А. Массоперенос легирующих элементов в технологических процессах лазерной обработки. – М.: ООО Изд-во «Машиностроение – 1», 2006. – 147 с.**2**. Рыкалин Н.Н., Углов А.А. Высокотемпературные технологические процессы. – М.: Наука, 1986. – 416 с. **3.** Фок В.А. Решение одной задачи теории диффузии по методу конечных разностей и приложение его к диффузии света. – М.: Труды Гос. оптического института, 1926. Т. 4. – С. 35 – 52.