

Динамика концентрации углерода в поверхностном слое стали при насыщении углеродом из газовой фазы в результате воздействия лазерного излучения

П. Я. Кантор¹, Е. А. Маринин², Н. И. Маринина³

¹кандидат физико-математических наук, доцент кафедры физики и методики обучения физике, Вятский государственный университет. Россия, г. Киров. E-mail: Shawl@list.ru

²ассистент кафедры информационных технологий в машиностроении, Вятский государственный университет. Россия, г. Киров. E-mail: marinin@vyatsu.ru

³магистрант кафедры материаловедения и основ конструирования, Вятский государственный университет. Россия, г. Киров. E-mail: sozontova@vyatsu.ru

Аннотация. Представлена модель насыщения поверхности стали углеродом из газовой фазы при лазерном нагреве. Процесс описывается дифференциальным уравнением в частных производных второго порядка. Методом преобразования Фурье получено решение одномерного уравнения диффузии с конвективным членом и потоком углерода, позволяющее описать процесс насыщения поверхности стали углеродом. Численное решение выполнено для легирования низкоуглеродистой стали углеродом при воздействии непрерывного лазерного излучения с движущимся источником. Выявлен характерный временной масштаб процесса и рассмотрено асимптотическое поведение концентрации углерода в поверхностном слое металла на малых и больших временах. Полученное решение позволяет оптимизировать технологические режимы процесса насыщения поверхности стали углеродом в результате воздействия лазерного излучения, исходя из требуемой глубины насыщения и поверхностной концентрации легирующего компонента.

Ключевые слова: диффузия, конвекция, преобразование Фурье, дельта-функция Дирака.

Введение

Процессы модифицирования поверхности материалов с использованием энергии лазерного излучения известны достаточно давно. При этом неотъемлемой составляющей исследования является математическое описание изучаемого процесса. Механизм массопереноса при лазерном легировании имеет сложную природу. В настоящее время в качестве основного фактора, определяющего распределение легирующих элементов в ванне расплава, сформированной воздействием лазерного излучения, рассматривается перемещение расплава, обусловленное термокапиллярным эффектом и силами вязкого трения [1]. Существующие математические описания такого процесса в качестве источника легирующего компонента рассматривают либо нанесенную на поверхность обмазку [2], либо взаимодействие лазерного излучения с поверхностью в условиях повышенного давления газа с легирующим компонентом [3]. При этом в научной литературе отсутствуют решения для случаев, когда легирование осуществляется при атмосферных условиях за счет подачи в зону лазерного воздействия атомарного или ионизированного легирующего элемента газовой или плазменной струей.

Постановка задачи

В работе рассматривается процесс насыщения поверхностного слоя стали в жидком состоянии углеродом из газовой фазы. Источником нагрева служит непрерывное лазерное излучение с длиной волны $\lambda = 1,06$ мкм. Моделирование осуществляется на основе решения одномерного уравнения диффузии с конвективным членом, при этом поток углерода j , направленный к поверхности, считается известным. Не рассматриваются вопросы переноса в кнудсеновском слое, описываемые статистическими методами (например, уравнением Больцмана). При выборе коэффициента диффузии углерода учтена его температурная зависимость. Температура поверхности определялась с помощью тривиального решения одномерного уравнения теплопроводности с движущимся источником и не рассматривается в рамках представленной работы.

Модель

Представим физическую модель процесса следующим образом. Расплавленный металл находится в области $z \geq 0$. На плоскую поверхность $z = 0$ расплавленного железа в направлении оси z падает поток атомов углерода с плотностью j . Динамика концентрации c углерода описывается дифференциальным уравнением диффузии с конвекцией. В нашем случае вполне адекватной представляется одномерная модель, которой соответствует уравнение

$$\frac{\partial c}{\partial t} + u \frac{\partial c}{\partial z} - D \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} = j\delta(z) \tag{1}$$

при начальном условии $c(z, 0) = 0$. Здесь u – скорость конвекции, D – коэффициент диффузии углерода в железе, $\delta(z)$ – дельта-функция Дирака, описывающая источник диффундирующих частиц. Нас интересует решение данного уравнения $c(z, t)$ в области $z \geq 0$ при $t \geq 0$.

Для приведения уравнения (1) каноническому виду (в котором отсутствует производная первого порядка по z) осуществим преобразование искомой функции:

$$c(z, t) = e^{\frac{u(z-ut/2)}{2D}} \rho(z, t). \tag{2}$$

В результате подстановки (2) уравнение (1) приобретает вид

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} - D \frac{\partial^2 \rho}{\partial z^2} = j\delta(z)e^{-\frac{u(z-ut/2)}{2D}}. \tag{3}$$

Далее производим преобразование Фурье, применяя к обеим частям уравнения (3) интегральный оператор $\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \dots e^{-ikz} dz$. Обозначив Фурье-образ функции $\rho(z, t)$

$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \rho(z, t) e^{-ikz} dz$ как $\bar{\rho}(k, t)$, будем иметь:

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} - \frac{D}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial^2 \rho}{\partial z^2} e^{-ikz} dz = \frac{j e^{\frac{u^2 t}{4D}}}{\sqrt{2\pi}}$$

Вычисляем интеграл двукратным интегрированием по частям с учетом того, что при $z \rightarrow \pm\infty$ функция ρ обращается в нуль. Получаем:

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + Dk^2 \bar{\rho} = \frac{j e^{\frac{u^2 t}{4D}}}{\sqrt{2\pi}}.$$

Решение последнего уравнения с учетом нулевого начального условия может быть представлено в виде интеграла:

$$\bar{\rho}(k, t) = \frac{j}{\sqrt{2\pi}} \int_0^t e^{-k^2 D(t-\tau)} e^{\frac{u^2 \tau}{4D}} d\tau.$$

Осуществляем над $\bar{\rho}(k, t)$ обратное преобразование Фурье:

$$\rho(z, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \bar{\rho}(k, t) e^{ikz} dk = \frac{j}{2\pi} \int_0^t e^{\frac{u^2 \tau}{4D}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-k^2 D(t-\tau) + ikz} dk d\tau.$$

Внутренний интеграл здесь сводится к известному интегралу Пуассона:

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-k^2 D(t-\tau) + ikz} dk = e^{-\frac{z^2}{4D(t-\tau)}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\left(k\sqrt{D(t-\tau)} - \frac{iz}{2\sqrt{D(t-\tau)}}\right)^2} dk = \frac{\sqrt{\pi}}{\sqrt{D(t-\tau)}} e^{-\frac{z^2}{4D(t-\tau)}}.$$

Тогда $\rho(z, t) = \frac{j}{2\sqrt{\pi D}} \int_0^t e^{\frac{u^2 \tau}{4D}} \frac{e^{-\frac{z^2}{4D(t-\tau)}}}{\sqrt{t-\tau}} d\tau$, и в итоге получаем:

$$c(z, t) = \frac{j}{2\sqrt{\pi D}} e^{\frac{u}{2D}(z-\frac{u}{2}t)} \int_0^t e^{\frac{u^2}{4D}\tau} \frac{e^{-\frac{z^2}{4D(t-\tau)}}}{\sqrt{t-\tau}} d\tau. \tag{4}$$

Таким образом, получено точное решение уравнения диффузии с конвекцией, описывающее динамику концентрации атомов углерода в приповерхностном расплаве металла.

Для численного расчета профиля концентрации в зависимости от z и t мы приняли $D = 5 \cdot 10^{-9} \text{ м}^2/\text{с}$, $u = 3 \cdot 10^{-4} \text{ м/с}$ и $j = 1$.

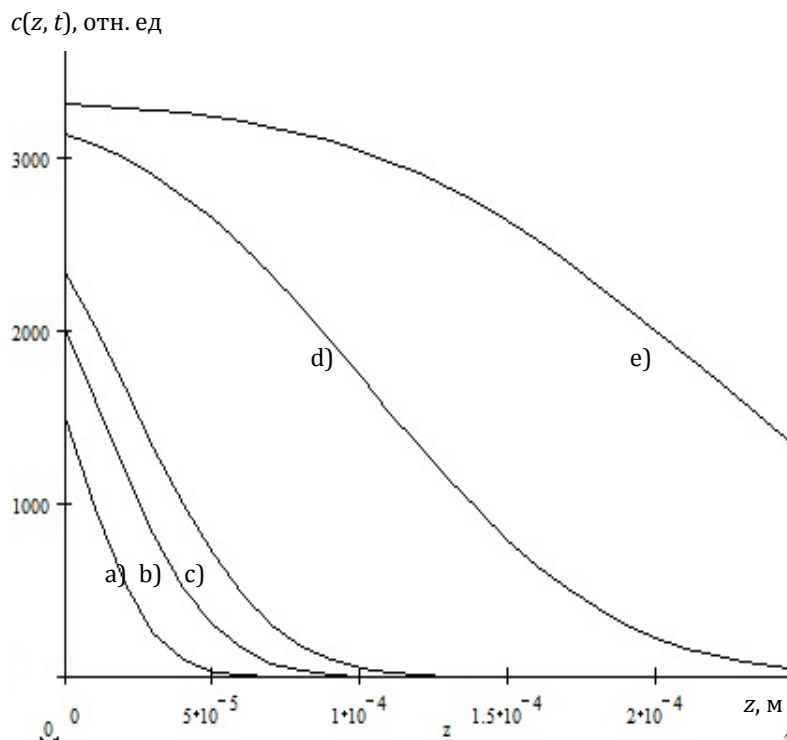


Рис. 1. Профиль концентрации атомов углерода:
 а) $t = 0,04 \text{ с}$; б) $t = 0,08 \text{ с}$; в) $t = 0,12 \text{ с}$; д) $t = 0,4 \text{ с}$; е) $t = 0,8 \text{ с}$

Результаты расчетов профиля концентрации для нескольких моментов приведены на рис. 1.

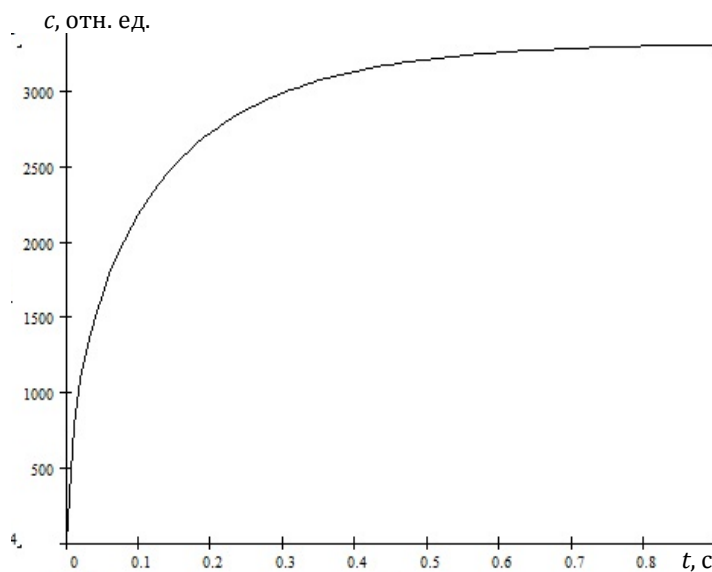


Рис. 2. Зависимость от времени концентрации углерода в поверхностном слое металла

Согласно постановке задачи, наибольший интерес представляет поверхностный слой металла при $z \approx 0$ (рис. 2). Структура решения (4) позволяет определить временной параметр $t_0 = 4D/u^2$. В нашем случае $t_0 \approx 0,22$ с. Рассмотрим асимптотическое поведение функции $c(z, t)$ на временах, существенно отличающихся от t_0 .

При $z \approx 0$ и $t \ll t_0$
$$\int_0^t e^{\frac{u^2}{4D}\tau} \frac{e^{-\frac{z^2}{4D(t-\tau)}}}{\sqrt{t-\tau}} d\tau \approx 2\sqrt{t},$$
 и тогда $c(z, t) \approx j \frac{\sqrt{t}}{\sqrt{\pi D}}$. Т. е. на первых стадиях процесса концентрация углерода в поверхностном слое нарастает пропорционально квадратному корню из времени экспозиции.

В другом крайнем случае, именно когда $t \gg t_0$ интеграл легко вычисляется с помощью замены переменной: $y = \sqrt{t - \tau}$.

$$\int_0^t e^{\frac{u^2}{4D}\tau} \frac{e^{-\frac{z^2}{4D(t-\tau)}}}{\sqrt{t-\tau}} d\tau = 2 \int_0^{\sqrt{t}} e^{\frac{u^2}{4D}t} e^{-\frac{u^2}{4D}y^2} dy \approx 2e^{\frac{u^2}{4D}t} \int_0^{\infty} e^{-\frac{u^2}{4D}y^2} dy = 2e^{\frac{u^2}{4D}t} \frac{\sqrt{4D}}{u} \frac{\sqrt{\pi}}{2},$$

и тогда $c(z, t) \approx \frac{j}{u}$. Смысл полученного результата заключается в том, что на больших временах в

поверхностном слое диффузия перестает играть заметную роль и падающий поток частиц полностью компенсируется конвекционным потоком.

Выводы

Полученное решение позволяет осуществить предварительный выбор технологических режимов (плотность мощности лазерного излучения, скорость перемещения лазерного пятна, поток углерода, направленный к поверхности) процесса насыщения поверхности стали углеродом в результате воздействия лазерного излучения. Основными критериями выбора технологических режимов выступают глубина насыщения, поверхностная концентрация легирующего компонента и концентрационный профиль.

Список литературы

1. Массоперенос при обработке поверхности металлов оплавлением непрерывным лазерным излучением / И. Б. Боровский [и др.] // Докл. АН СССР. 1982. Т. 263. № 3. С. 616–618.
2. Тарасова Т. В. Распределение элементов в ванне расплава при лазерном легировании / Т. В. Тарасова // Металловедение и термическая обработка металлов и сплавов. 2002. № 3. С. 24–27.
3. Углов А. А. Моделирование поверхностного азотирования металлов из газовой атмосферы при импульсном лазерном облучении / А. А. Углов, А. Г. Гнедовец, О. М. Портнов // Физика и химия обработки материалов. 1988. № 2. С. 62–67.

Dynamics of carbon concentration in the surface layer of steel when carbon is saturated from the gas phase as a result of exposure laser radiation

P. Ya. Kantor¹, E. A. Marinin², N. I. Marinina³

¹PhD of physical and mathematical sciences, associate professor of physics and methods of teaching physics, Vyatka State University, Russia, Kirov. E-mail: Shawl@list.ru

²assistant of the Department of information technologies in mechanical engineering, Vyatka State University, Russia, Kirov. E-mail: marinin@vyatsu.ru

³master student of the Department of material science and design principles, Vyatka State University, Russia, Kirov. E-mail: sozontova@vyatsu.ru

Abstract. A model of saturation of the surface of steel with carbon from the gas phase under laser heating is presented. The process is described by a second order partial differential equation. The solution of the one-dimensional diffusion equation with a convective term and a carbon flow is obtained by the Fourier transform method, which allows describing the process of saturation of the surface of steel with carbon. The numerical solution is performed for carbon doping of low-carbon steel under the influence of continuous laser radiation with a moving source. The characteristic time scale of the process is revealed and the asymptotic behavior of the carbon concentration in the surface layer of the metal at small and large times is considered. The obtained solution makes it possible to optimize

the technological modes of the process of saturation of the surface of steel with carbon as a result of exposure to laser radiation, based on the required saturation depth and surface concentration of the alloying component.

Keywords: diffusion, convection, Fourier transform, Dirac Delta function.

References

1. *Massoperenos pri obrabotke poverhnosti metallov oplavleniem nepreryvnym lazernym izlucheniem* – Mass transfer in the treatment of metal surfaces by melting with continuous laser radiation / I. B. Borovsky [et al.] // Report of AS USSR. 1982. Vol. 263. No. 3. Pp. 616–618.
2. *Tarasova T. V. Raspredelenie elementov v vanne rasplava pri lazernom legirovanii* [Distribution of elements in the weld pool during laser alloying] / T. V. Tarasova // *Metallovedenie i termicheskaya obrabotka metallov i splavov* – Metal study and heat treatment of metals and alloys. 2002, No. 3, pp. 24–27.
3. *Uglov A. A. Modelirovanie poverhnostnogo azotirovaniya metallov iz gazovoj atmosfery pri impul'snom lazernom obluchenii* [Simulation of surface nitriding of metals from the gas atmosphere under pulsed laser irradiation] / A. A. Uglov, A. G. Gnedovets, O. M. Portnov // *Fizika i himiya obrabotki materialov* – Physics and chemistry of materials processing. 1988, No. 2, pp. 62–67.