ИЗВЕСТИЯ ВЫСШИХ УЧЕБНЫХ ЗАВЕДЕНИЙ
Т. 58, № 4 ФИЗИКА 2015

УДК 533.9:539.4.015.2

*Ю.Ф. ИВАНОВ***, Е.А. ПЕТРИКОВА*, О.В. ИВАНОВА***, И.А. ИКОННИКОВА***, А.В. ТКАЧЕНКО*****

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕМПЕРАТУРНОГО ПОЛЯ СИЛУМИНА, ОБЛУЧЕННОГО ИНТЕНСИВНЫМ ЭЛЕКТРОННЫМ ПУЧКОМ [1]

Приведены результаты численного моделирования температурных полей и фазовых превращений в поверхностном слое силумина, облученного интенсивным импульсным электронным пучком. Сравнительный анализ выявил хорошее качественное и количественное согласие результатов тепловых расчетов и структурно-фазовых исследований, выполненных на силумине, облученном электронным пучком при вариации плотности энергии пучка электронов и длительности импульса воздействия.

Ключевые слова: *высокоинтенсивный импульсный электронный пучок, алюминий, кремний, силумин, облучение, численные оценки параметров облучения, структура.*

Введение

В абсолютном большинстве случаев физические, химические, прочностные и многие другие свойства поверхности материалов и изделий определяют срок службы машин, механизмов и агрегатов в целом. Одним из перспективных методов воздействия на структуру и свойства поверхностного слоя материала являются импульсные электронные пучки [1, 2]. По сравнению с широко распространенной лазерной, электронно-пучковая технология обладает большими возможностями контроля и регулирования количества подводимой энергии, отличается локальностью распределения энергии в приповерхностном слое обрабатываемого материала и высоким коэффициентом полезного действия [1–3]. Сверхвысокие скорости (10^8–10^{10} К/с) нагрева до температур плавления и последующего охлаждения тонкого приповерхностного слоя материала (10^{-7}–10^{-6} м), весьма малые (10^{-6}–10^{-3} с) времена воздействия высоких температур, формирование предельных градиентов температуры (до 10^7–10^8 К/м), обеспечивающих охлаждение приповерхностного слоя за счет теплоотвода в интегрально холодный объем материала со скоростью 10^4–10^9 К/с, создают условия для образования в приповерхностном слое аморфной, нано- и субмикрокристаллической структуры. Столь существенные изменения структурно-фазового состояния поверхностных слоев приводят к значительному улучшению физико-химических и прочностных свойств материала, недостижимому при традиционных методах поверхностной обработки [1–3].

Цель настоящей работы: 1) численное моделирование температурных полей и процессов фазовых превращений, протекающих в поверхностном слое силумина, облучаемого интенсивным импульсным электронным пучком субмиллисекундной длительности воздействия; 2) оценка оптимальных энергетических параметров облучения (по результатам моделирования); 3) экспериментальные исследования фазового состава и дефектной субструктуры поверхностного слоя силумина, облученного электронным пучком при оптимальных параметрах.

Материал и методика исследования

В качестве модифицируемого материала был выбран сплав алюминий – кремний (силумин) эвтектического состава [4]. Дополнительными легирующими элементами, формирующими интерметаллидные фазы, являлись хром, марганец, железо, никель, магний и медь, суммарная концентрация которых не превышала 5 ат. %. Высокоскоростную термическую обработку в режиме плавления поверхностного слоя проводили интенсивным импульсным электронным пучком (установка «СОЛО», ИСЭ СО РАН), варьируя плотность энергии пучка электронов в пределах от 10 до 30 Дж/см^2, длительность импульса воздействия пучка электронов 100–200 мкс, количество импульсов 3–5. Исследования фазового и элементного состава, дефектной субструктуры поверхностного слоя осуществляли методами оптической и сканирующей электронной микроскопии.

[1] Работа выполнена за счет Российского научного фонда (грант № 14-29-00091).

Математическая модель

Задача о нахождении температурного поля в определенном диапазоне плотности энергии пучка электронов сводится к решению уравнения теплопроводности. Рассматривается одномерный случай нагрева и охлаждения пластины толщиной d. Система координат выбрана так, что ось x направлена в глубь образца. При $x = 0$ задан тепловой поток, а на тыльной стороне пластины теплообмен отсутствует. В координатном виде уравнение теплопроводности принимает вид

$$c\rho\frac{\partial T}{\partial t} = \lambda\frac{\partial^2 T}{\partial x^2},$$

где c – удельная теплоемкость; ρ – плотность; λ – теплопроводность материала.

Граничные условия для импульсного воздействия электронным пучком следующие:

$$-\lambda\frac{\partial T}{\partial x} = q(t), \quad q(t) = \begin{cases} q_0, & 0 < t \le t_0, \\ 0, & t > t_0. \end{cases}$$

Здесь q_0 – среднее значение теплового потока за время воздействия пучка электронов t_0. Начальная температура $T(0, x) = T_0$ по всей глубине образца $0 < x < d$.

Для численного решения поставленной задачи использована разностная сетка с шагом τ по времени: $t_j = j\tau$ – и с шагом h по пространству: $x_i = ih$. Здесь j – номер слоя по времени, i – номер слоя по пространству. Значение температуры определяется в узлах сетки. Используется аппроксимация дифференциального уравнения теплопроводности с первым порядком по времени и со вторым по пространству, при этом была выбрана явная схема:

$$T_{j+1,i} = T_{j,i} + \frac{\tau(T_{j,i+1} - 2T_{j,i} + T_{j,i-1})}{c\rho h^2}.$$

На основе численного решения уравнения теплопроводности проведено моделирование температурных полей при электронно-пучковой обработке поверхности образцов силумина эвтектического состава (Al – 12 ат. % Si) и чистых алюминия и кремния. Расчеты выполнялись для интенсивного электронного пучка с плотностью энергии, изменяющейся в диапазоне от 5 до 40 Дж/см^2 и длительностью импульса 50, 100, 150 и 200 мкс. Толщина поверхностного слоя для тепловых расчетов $d = 10^{-3}$ м, время наблюдения 300 мкс.

Учет плавления и испарения материала проводился из следующих физических соображений [1]. При достижении ячейкой температуры плавления $T_{\text{пл}}$ ее температура фиксировалась и полагалась равной температуре плавления, а все подводимое тепло

$$q = \frac{\left(T_{j,i} - T_{\text{пл}}\right)c}{q_{\text{пл}}},$$

где $T_{j,i}$ – температура ячейки, предполагалось, идет на плавление образца; $q = 1$ означает переход вещества в жидкое состояние. Процесс кристаллизации моделировался таким же образом, только значение q уменьшалось от 1 до 0. Процесс испарения и конденсации моделировался аналогичным образом.

Численное решение задачи проводилось для следующих теплофизических значений алюминия и кремния [5, 6], взятых при T = 1000 К. Для алюминия коэффициент теплопроводности $\lambda = 93\cdot10^{-2}$ Вт/(см·К), удельная теплоемкость $c_p = 1177\cdot10^{-3}$ Дж/(г·К), плотность $\rho = 2.6$ г/см^3, температура плавления 933 К, температура испарения 2793 К, теплота плавления $q_{\text{пл}} = 385$ кДж/кг, теплота испарения $q_{\text{исп}} = 10444$ кДж/кг. Для кремния коэффициент теплопроводности $\lambda = 31\cdot10^{-2}$ Вт/(см·К), удельная теплоемкость $c_p = 946\cdot10^{-3}$ Дж/(г·К), плотность $\rho = 2.33$ г/см^3, температура плавления 1688 К, температура испарения 3573 К, теплота плавления $q_{\text{пл}} = 1409$ кДж/кг, теплота испарения $q_{\text{исп}} = 10072$ кДж/кг. Для эвтектического силумина берется температура плавления и кристаллизации эвтектического сплава 850 К [7].

Заметим, что в жидком состоянии в равновесных условиях алюминий и кремний полностью растворимы друг в друге, а в твердом состоянии образуют эвтектическую смесь двух ограниченных твердых растворов [7].

Верификацию предложенной модели тепловых полей осуществляли путем сопоставления результатов оценки толщины расплавленного слоя, полученного расчетным и экспериментальным способами (таблица). Видно, что между расчетными и экспериментально определенными значениями толщины расплавленного слоя для двухфазного (жидкость + твердое тело) состояния наблюдается неплохое качественное и количественное согласие. Последнее позволяет утверждать, что модельные представления адекватно отражают процессы, протекающие в силумине при облучении его поверхности интенсивным электронным пучком, и могут быть использованы при трактовке экспериментально полученных результатов.

Теоретически рассчитанные и экспериментально полученные значения толщины расплавленного слоя образцов алюминия, кремния и силумина эвтектического состава, облученных интенсивным электронным пучком при длительности импульса 150 мкс

E_s, Дж/см^2	Расчеты								Эксперимент
	Алюминий		Кремний		Эвтектический сплав				
					Алюминий		Кремний		
	d (ж), мкм	d (ж+т), мкм	d (ж), мкм	d (ж+т), мкм	d (ж), мкм	d (ж+т), мкм	d (ж), мкм	d (ж+т), мкм	d, мкм
15	0	18	0	10	0	30	0	60	23
20	9	39	0	25	15	51	5	80	30
25	27	57	0	35	33	69	15	95	55

Примечание. d (ж) – толщина однофазного (жидкость) поверхностного слоя; d (ж+т) – толщина двухфазного (жидкость + твердое тело) поверхностного слоя.

Результаты расчета тепловых характеристик исследуемых материалов представлены на рис. 1–6. Установлено, что максимальная температура прогрева поверхности, достигаемая в момент завершения действия импульса, для кремния выше, чем для алюминия при одинаковой плотности энергии пучка как для чистых материалов (рис. 1), так и для сплава Al–Si эвтектического состава (рис. 2). Разница температур прогрева ΔT для чистых материалов составляет 700 К при плотности энергии пучка электронов E_s = 10 Дж/см^2 и 2300 К при E_s = 18 Дж/см^2 для t_0 = 50 мкс (рис. 1, *а*) и ΔT = 2300 К при E_s = 30 Дж/см^2 для t_0 = 150 мкс (рис. 1, *б*). Для алюминия и кремния при t_0 = 50 мкс максимальная температура изменяется от температуры плавления (933 К для алюминия и 1688 К для кремния) при E_s = 10 Дж/см^2 до температуры кипения (2793 К для алюминия и 3573 К для кремния) при E_s = 40 Дж/см^2.

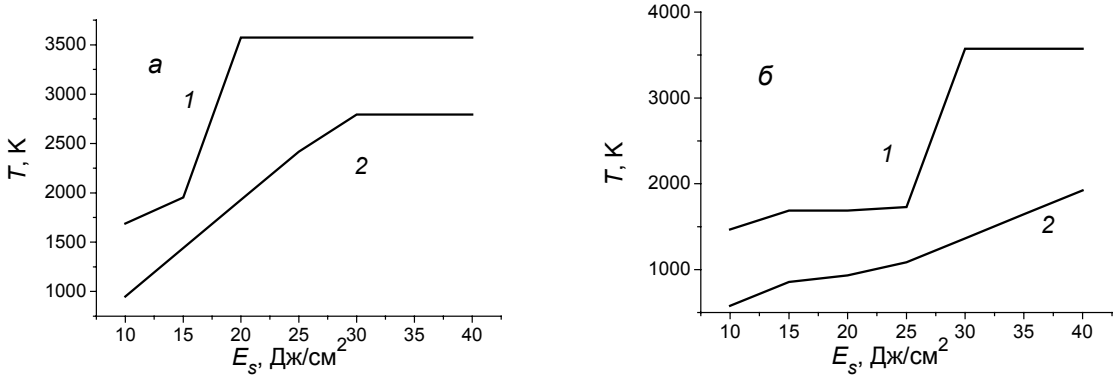

Рис. 1. Зависимость максимальной температуры прогрева поверхности кремния (кр. *1*) и алюминия (кр. *2*), облученных электронным пучком, от плотности энергии пучка с учетом плавления и испарения материала: *а* – t_0 = 50 мкс; *б* – t_0 = 150 мкс

Для сплава эвтектического состава величина ΔT мала для плотностей энергий ниже 15 Дж/см^2 при t_0 = 50 мкс (рис. 2, *а*) и ниже 25 Дж/см^2 при t_0 = 150 мкс (рис. 2, *б*). При длительности импульса воздействия пучка t_0 = 50 мкс максимальная температура изменяется от 788 К до температуры кипения 2793 К для алюминия и от 850 К до температуры кипения 3573 К для кремния. При длительности импульса воздействия пучка t_0 = 150 мкс максимальная температура изменяется от 581 до 2201 К для алюминия и от 850 К до температуры кипения 3573 К для кремния.

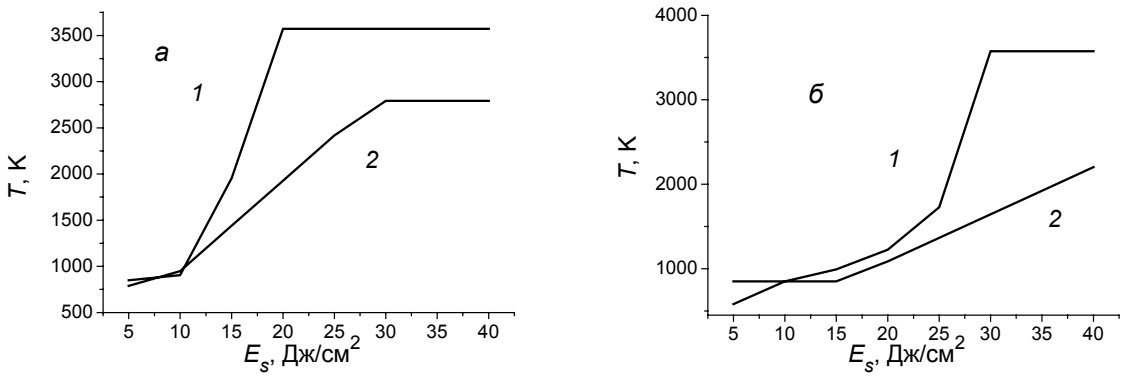

Рис. 2. Зависимость максимальной температуры прогрева поверхности кремния (кр. *1*) и алюминия (кр. *2*), облученных электронным пучком, от плотности энергии пучка с учетом плавления и испарения материала: *а* – t_0 = 50 мкс; *б* – t_0 = 150 мкс. Сплав Al–Si эвтектического состава

Для чистых кремния и алюминия время существования расплава Δt алюминия примерно в 2–4 раза больше, чем кремния для всех плотностей энергии пучка электронов независимо от длительности импульса воздействия (рис. 3), тогда как для эвтектического сплава величина Δt для кремния и алюминия примерно одинакова (рис. 4).

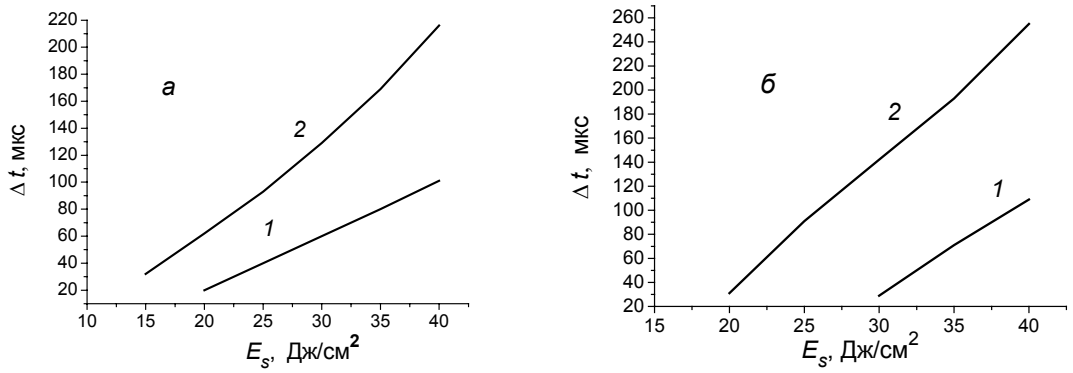

Рис. 3. Зависимость времени существования расплава на поверхности кремния (кр. *1*) и алюминия (кр. *2*) от плотности энергии пучка электронов: *а* – t_0 = 50 мкс; *б* – t_0 = 150 мкс

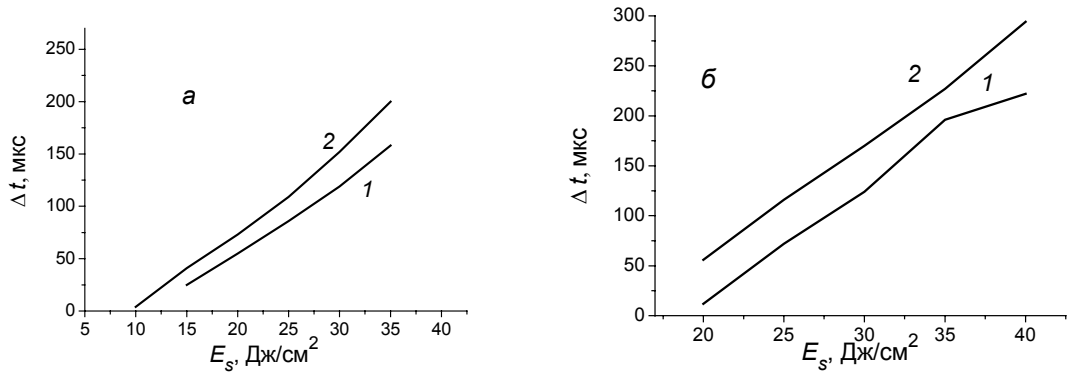

Рис. 4. Зависимость времени существования расплава кремния (кр. *1*) и алюминия (кр. *2*) на поверхности эвтектического сплава от плотности энергии пучка электронов: *а* – t_0 = 50 мкс; *б* – t_0 = 150 мкс

Толщина расплавленного слоя у чистого алюминия примерно в 2 раза больше, чем у чистого кремния (рис. 5). Расплав появляется для t_0 = 50 мкс при 20 Дж/см^2 для кремния и при 15 Дж/см^2 для алюминия. Для t_0 = 150 мкс расплав появляется при 20 Дж/см^2 для алюминия и при 30 Дж/см^2 для кремния. Эвтектический сплав начинает плавиться при меньшей плотности энергии. Для t_0 = = 50 Дж/см^2 расплав появляется при 10 Дж/см^2 для алюминия и при 15 Дж/см^2 для кремния. Для t_0 = 150 Дж/см^2 расплав появляется при 20 Дж/см^2 для алюминия и кремния (рис. 6). Так как при

этом разность температур прогрева поверхности алюминия и кремния может достигать более 1000 К, это может приводить к тому, что алюминий вблизи кремния в силумине при короткой длительности импульса (t_0 = 50 мкс) может сильно нагреваться и, вследствие этого, закипать. При длительности же импульса t_0 = 150 мкс и алюминий, и кремний только плавятся при плотностях энергии пучка от 15 до 25 Дж/см^2. Следовательно, оптимальными параметрами пучка электронов при обработке силумина в режиме совместного плавления алюминия и кремния являются следующие: длительность импульса 150 мкс; плотность энергии пучка 15–25 Дж/см^2.

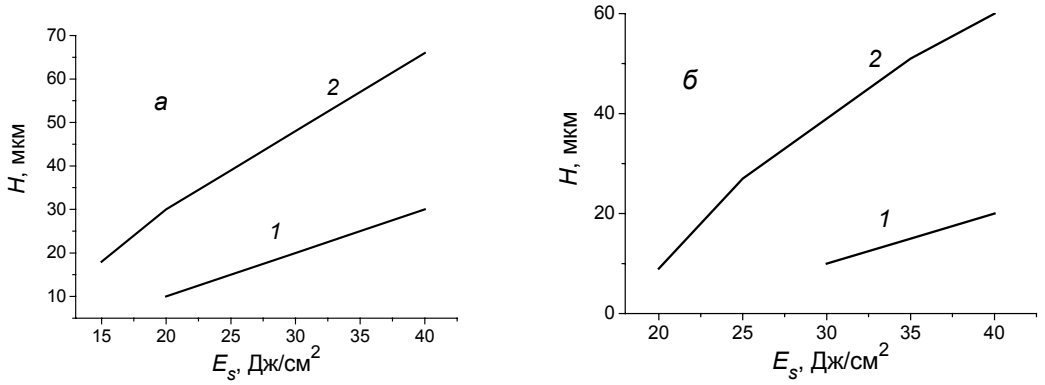

Рис. 5. Зависимость толщины расплавленного слоя поверхности кремния (кр. *1*) и алюминия (кр. *2*) от плотности энергии пучка электронов: *а* – t_0 = 50 мкс; *б* – t_0 = 150 мкс

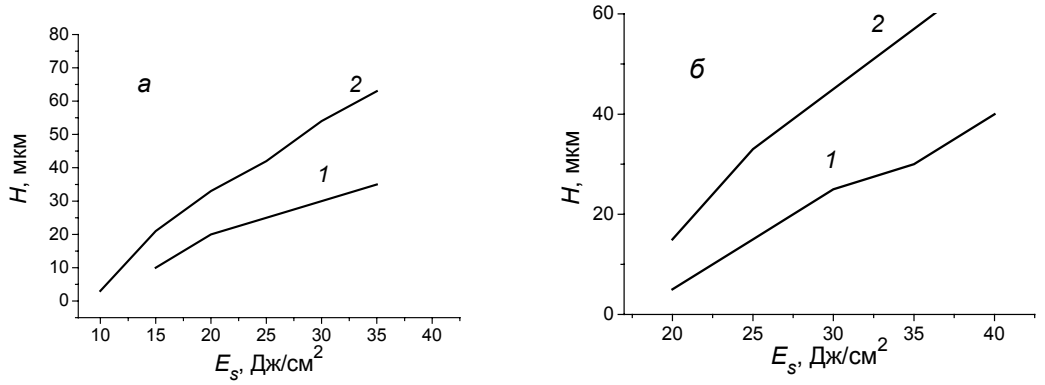

Рис. 6. Зависимость толщины расплавленного слоя поверхности эвтектического сплава для кремния (кр. *1*) и алюминия (кр. *2*) от плотности энергии пучка электронов: *а* – t_0 = 50 мкс; *б* – t_0 = 150 мкс

Результаты эксперимента и их обсуждение

Результаты расчетов, представленные на рис. 6, указывают на формирование многослойной структуры при электронно-пучковом плавлении силумина, а именно: толщина слоя плавления алюминия в 1.5–2.0 раза больше толщины слоя плавления кремния. Действительно, выполненные электронно-микроскопические исследования структуры зоны расплава выявили формирование поверхностного слоя, в котором плавится и алюминий, и кремний, и переходного слоя, в котором плавится только алюминий (рис. 7, *а*).

Выполненные расчеты показывают, что скорость охлаждения расплава изменяется в интервале (2.7–10.9)·10^8 К/с для длительности импульса пучка электронов 50 мкс и (0.9–3.7)·10^8 К/с для длительности импульса пучка электронов 150 мкс. Следовательно, можно ожидать формирование в поверхностном слое силумина наноразмерной субструктуры. Действительно, выполненные методами дифракционной электронной микроскопии исследования выявили в поверхностном слое силумина, обработанного интенсивным электронным пучком (20 Дж/см^2, 150 мкс, 1 имп., 0.3 с$^{-1}$), двухфазную структуру ячеистой кристаллизации, размеры частиц кремния в которой изменяются в пределах 40–70 нм (рис. 7, *б*).

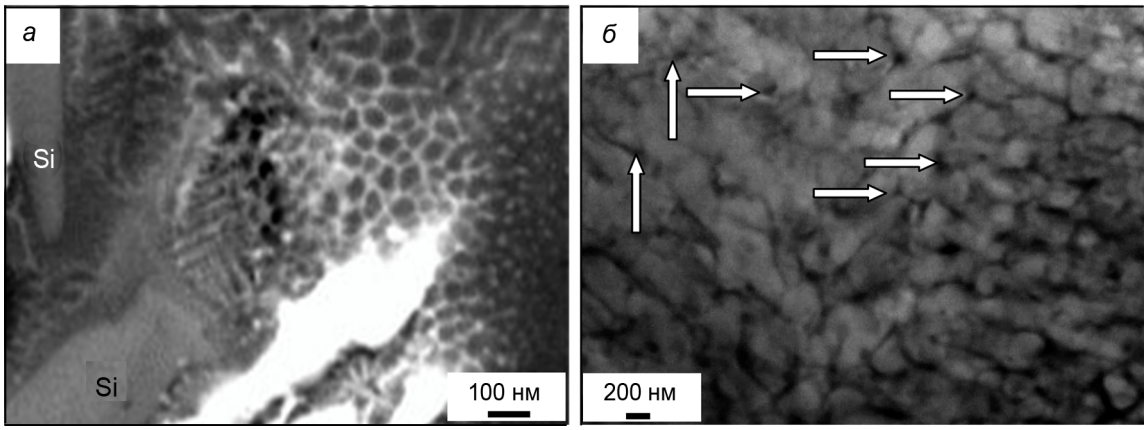

Рис. 7. Структура поверхностного слоя силумина эвтектического состава, обработанного интенсивным электронным пучком (20 Дж/см^2, 150 мкс, 1 имп., 0.3 с$^{-1}$); стрелками на (*б*) указаны частицы кремния

Заключение

В рамках одномерной модели решена задача о нахождении температурного поля, формирующегося при облучении кремния, алюминия и силумина эвтектического состава интенсивным импульсным электронным пучком. Выполнены экспериментальные исследования фазового состава и дефектной субструктуры поверхностного слоя силумина, облученного электронным пучком в широком диапазоне параметров пучка электронов. Проведен сравнительный анализ и выявлено хорошее качественное и количественное согласие результатов тепловых расчетов и структурно-фазовых исследований, выполненных на силумине, облученном электронным пучком. По результатам тепловых расчетов определены диапазоны параметров обработки силумина эвтектического состава интенсивным электронным пучком, позволяющие модифицировать структуру поверхностного слоя в условиях твердофазного и жидкофазного превращений.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Rotshtein V., Ivanov Yu., and Markov A. // Materials Surface Processing by Directed Energy Techniques / ed. by Y. Pauleau. – Paris: Elsevier, 2006. – P. 205–240.
2. Белов А.Б., Быценко О.А., Крайников А.В. и др. Сильноточные импульсные электронные пучки для авиационного двигателестроения / под общ. ред. А.С. Новикова, В.А. Шулова, В.И. Энгелько. – М.: Дипак, 2012. – 292 с.
3. Коваль Н.Н., Иванов Ю.Ф. // Изв. вузов. Физика. – 2008. – Т. 51. – № 5. – С. 60–70.
4. Строганов Г.Б., Ротенберг В.А., Гершман Г.Б. Сплавы алюминия с кремнием. – М.: Металлургия, 1977.
5. Бабичев А.П., Бабушкина Н.А., Братковский А.М. и др. Физические величины: справочник. – М.: Энергоатомиздат, 1991. – 1232 с.
6. Физическая энциклопедия. Т.5 / гл. редактор А.М. Прохоров. – М.: Большая Российская энциклопедия, 1998. – 687 с.
7. Вол А.Е. Строение и свойства двойных металлических систем. Т. 1. – М.: ГИФМЛ, 1959. – 755 с.

*Институт сильноточной электроники СО РАН, г. Томск, Россия
**Национальный исследовательский Томский государственный университет, г. Томск, Россия
***Томский государственный архитектурно-строительный университет, г. Томск, Россия
****Национальный исследовательский Томский политехнический университет, г. Томск, Россия
E-mail: yufi55@mail.ru

Поступила в редакцию 16.01.15.

Иванов Юрий Федорович, д.ф.-м.н., доцент, ведущ. науч. сотр. ИСЭ СО РАН, ведущ. науч. сотр. НИ ТГУ;
Петрикова Елизавета Алексеевна, мл. науч. сотр. ИСЭ СО РАН, мл. науч. сотр. НИ ТГУ;
Иванова Ольга Викторовна, к.ф.-м.н., доцент;
Иконникова Ирина Александровна, к.ф.-м.н., доцент;
Ткаченко Алина Владимировна, магистрантка.