

УДК 538.9

ФИЗИЧЕСКИЕ ПРОЦЕССЫ В ПОВЕРХНОСТНОМ СЛОЕ КОНДЕНСИРОВАННОГО МАТЕРИАЛА ПРИ ВОЗДЕЙСТВИИ НАНОСЕКУНДНЫХ ЛАЗЕРНЫХ ИМПУЛЬСОВ

О. В. АНДРУХОВА, И. С. САФРОНОВ, А. И. УШАКОВ

Университет науки и технологий МИСИС

Москва, Россия

Одним из быстро развивающихся методов получения материалов с заданными свойствами поверхности является обработка короткоимпульсным лазерным излучением. Ряд экспериментальных исследований, посвященных изменению механических свойств поверхности твердых материалов под воздействием лазерного излучения, подтверждает возможность повышения прочностных свойств, а также одновременного повышения микротвердости и пластических характеристик при определенных режимах обработки [1–4].

Для понимания механизма увеличения прочности поверхности металлических сплавов при лазерном воздействии необходим анализ изменения дефектной структуры материала. Компьютерное моделирование позволяет изучить физические процессы, протекающие в исследуемых образцах, как на молекулярном, так и континуальном уровнях. Метод молекулярной динамики (ММД) дает возможность проанализировать эволюцию структуры и картины распределения атомов вблизи дефектов, на поверхности и в объеме материала. В рассматриваемой задаче существенным оказывается понимание того, как распространяется фронт ударной волны, формирующейся за счет возникающего градиента температур [5, 6]. Поэтому актуальным оказывается решение задачи теплопроводности с учетом распределения микро- и нанопор в моделируемом объеме.

Получены закономерности нагрева материала вблизи системы наноразмерных пор с учетом её геометрии. Моделировалось распределение температуры в приповерхностных слоях титанового образца, идеального или с предварительно заданной конфигурацией идеальных нанопор. Рассматриваемые дефекты обладают сферической формой, в них отсутствуют центры напряжений, нет теплообмена за счет переизлучения. Выявление особенностей формирования изотерм осуществлялось путем сравнения результатов в идеальном и дефектном кристалле.

На начальном этапе моделирования рассматривалась квазитрехмерная континуальная модель. В установившемся режиме лазерной обработки вещества свободная граница задавалась в виде вогнутой эллиптической дуги. Известно [2, 3, 5], что значительное изменение механических свойств после селективной лазерной обработки наблюдается в тонких приповерхностных слоях, поэтому размеры пор геометрии были выбраны так, чтобы они располагались в слое толщиной не более 1 мкм, а при нагревании наблюдался максимальный градиент температур между верхней и нижней порой.

Согласно результатам моделирования, была установлена взаимосвязь между формирующимся скалярным полем температур в образце и конфигурацией системы пор, построены изотермы в идеальном и бездефектном кристалле. Наличие пор существенно влияет на распространение температурного фронта. Область приповерхностного слоя над порами прогревается быстрее и имеет более высокую температуру, чем аналогичная область в бездефектном кристалле. При этом слои материала, располагающиеся геометрически ниже уровня пор, в бездефектном кристалле имеют более высокую температуру. Следовательно, можно ожидать пластического движения нагретого материала к поре. Кроме того, из-за температурного градиента выше и ниже поры может произойти деформация и заполнение более нагретым веществом. Учитывая предложенную модель (отсутствие газов в порах), возможно полное заживление поры, за счет чего все пространство заполняется легкодвижимыми компонентами металлического сплава.

Полученные распределения температур и построенные изотермы необходимы для задания начальных условий при моделировании процесса селективной лазерной обработки поверхности титана в рамках атомистической модели с использованием ММД. Такой подход дает возможность проанализировать процесс термоактивируемого «залечивания» пор и микротрещин с учетом геометрии системы пор в приповерхностном слое, а также описать механизм лазерного залечивания микропор в поверхностном слое металла.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Safronov, I. S.** Targeted alternation in properties of solid amorphous-nanocrystalline material in exposing to nanosecond laser radiation / I. S. Safronov, A. I. Ushakov // *Defect and Diffusion Forum.* – 2021. – Vol. 410. – P. 469–474.
2. **Safronov, I. S.** Influence of environment at laser processing on microhardness of amorphous-nanocrystalline metal alloy / I. S. Safronov, I. V. Ushakov, V. I. Minaev // *Materials Science Forum.* – 2022. – 1052. – P. 50–55.
3. Study of the effect of coherent radiation on the properties of aramid fibers and fabrics / O. V. Andrukhova [et al.] // *Fundamental'nye Problemy Sovremennogo Materialovedenia.* – 2022. – Т. 19, № 1. – P. 125–131.
4. Влияние когерентного излучения на прочность арамидных волокон и тканей / С. В. Овечкин [и др.] // *Ползуновский вестн.* – 2021. – № 2. – С. 233–238.
5. Physical Mechanism of Selective Healing of Nanopores in Condensed Matter under the Influence of Laser Irradiation and Plasma / Z. Wang [et al.] // *Nanomaterials.* – 2024. – № 14 (2). – P. 139–153.
6. Физика воздействия высокотемпературного импульсного нагрева на дефекты в поверхностном слое металлического сплава / И. В. Ушаков [и др.] // *Металлург.* – 2023. – № 7. – С. 74–79.