Князева, А.Г. Термомеханическая связанная модель синтеза покрытия на подложке / А.Г. Князева // Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Механика. – 2024. – № 1. – С. 58–74. DOI: 10.15593/perm.mech/2024.1.06

Perm Polytech Style: Knyazeva A.G. Thermomechanical Coupled Model of Coating Synthesis on a Substrate. *PNRPU Mechanics Bulletin*, 2024, no. 1, pp. 58-74. DOI: 10.15593/perm.mech/2024.1.06

пермский политех

ВЕСТНИК ПНИПУ. МЕХАНИКА
№ 1, 2024
PNRPU MECHANICS BULLETIN
https://ered.pstu.ru/index.php/mechanics/index



Научная статья

DOI: 10.15593/perm.mech/2024.1.06
УДК 536.46

ТЕРМОМЕХАНИЧЕСКАЯ СВЯЗАННАЯ МОДЕЛЬ СИНТЕЗА ПОКРЫТИЯ НА ПОДЛОЖКЕ

А.Г. Князева

Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск, Российская Федерация

О СТАТЬЕ

Получена: 03 сентября 2023 г.
Одобрена: 06 декабря 2023 г.
Принята к публикации:
12 марта 2024 г.

Ключевые слова:

синтез покрытия на подложке, химическая реакция, подвижный источник тела, плоское напряженное состояние, связанная модель, безразмерные комплексы, численное решение, параметрическое исследование, квазистационарный режим.

АННОТАЦИЯ

Среди современных комбинированных лазерных и электронно-лучевых технологий особое место занимают те, в которых формирование состава происходит непосредственно в процессе создания изделия или синтеза покрытия. В настоящей работе построена связанная модель синтеза покрытия на подложке. При построении модели осуществлен последовательный переход от трехмерной модели процесса синтеза покрытия на подложке к одномерной, которая полезна для качественного анализа. Одномерная модель учитывает основные физические особенности, протекающие при синтезе композита на подложке, а также связанный характер теплопереноса и деформирования одновременно с учетом различия теплофизических и механических свойств разных материалов. При построении промежуточного аналитического решения принято, что система «подложка – покрытие» находится в плоском напряженном состоянии. В результате получены явные выражения для компонент тензоров напряжений и деформаций, связанных с изменением температуры и состава. С помощью полученного аналитического решения термокинетическая часть задачи модифицирована и приведена к более удобному виду. Далее использован опыт, накопленный в области макрокинетики, позволяющий подойти к моделированию процессов создания новых материалов (например, интерметаллидных или металломатричных композитов) в современных технологиях с точки зрения управления процессами фазообразования в зоне реакции подвижным внешним воздействием. При переходе к безразмерным переменным выявлены комплексы и параметры, представляющие собой отношения характерных масштабов разных процессов. Параметрическое исследование модели позволило установить интересные качественные эффекты. Продемонстрировано, что квазистационарный режим сопровождается физико-химическими процессами в области, которую покинул лазерный луч, благодаря накопившемуся в материалах теплу. Показано, что учет связанного характера разных процессов существенно влияет на динамику синтеза и параметры квазистационарного режима.

© ПНИПУ

© **Князева Анна Георгиевна** – д. ф.-м. н., проф., гл. н. с., e-mail: anna-knyazeva@mail.ru.

Anna G. Knyazeva – Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor, e-mail: anna-knyazeva@mail.ru.

Эта статья доступна в соответствии с условиями лицензии Creative Commons Attribution-NonCommercial 4.0 International License (CC BY-NC 4.0)
This work is licensed under a Creative Commons Attribution-NonCommercial 4.0 International License (CC BY-NC 4.0)

THERMOMECHANICAL COUPLED MODEL OF COATING SYNTHESIS ON A SUBSTRATE

A.G. Knyazeva

Institute of Strength Physics and Materials Science SB RAS, Tomsk, Russian Federation

ARTICLE INFO

Received: 03 September 2023
Approved: 06 December 2023
Accepted for publication:
12 March 2024

Keywords:

coating synthesis on substrate, chemical reaction, moving heat source, plane stress state, coupled model, dimensionless complexes, numerical solution, parametric analysis, quasi-stationary regime.

ABSTRACT

Among modern combined laser and electron-beam technologies, special attention is paid to those in which composition formation takes place directly in the process of product creation or coating synthesis. In the present work, a coupled model of coating synthesis on a substrate is constructed. When building the model, a sequential transition was carried out from a three-dimensional model of the coating synthesis process on the substrate to a one-dimensional model, which is useful for qualitative analysis. The one-dimensional model takes into account the main physical features of the physical and chemical processes during the synthesis, as well as the coupled nature of the heat transfer and deformation at the same time taking into account the differences in thermophysical and mechanical properties of different materials. When constructing the intermediate analytical solution, it is assumed that the system "substrate-coating" is in a plane stress state. As a result, explicit expressions for the components of stress and strain tensors connected with changes in temperature and composition are obtained. With the help of the obtained analytical solution, the thermokinetic part of the problem is modified and reduced to a more convenient form. Further, the experience accumulated in the field of macrokinetics is used, which allows us to model the processes of creating new materials (e.g., intermetallic or metal matrix composites) in modern technologies from the point of view of controlling the processes of phase formation in the reaction zone by a moving external source. The transition to dimensionless variables revealed complexes and parameters representing relations of characteristic scales of different processes. The parametric study of the model allowed us to establish interesting qualitative effects. It is demonstrated that the quasi-stationary regime is accompanied by physical and chemical processes in the region, which the laser beam had left, due to the heat accumulated in the materials. It is shown that the coupled nature of different processes significantly affects the dynamics of synthesis and the parameters of the quasi-stationary regime.

© PNRPU

Введение

Среди современных комбинированных лазерных и электронно-лучевых технологий [1–6] особое место занимают те, в которых формирование состава происходит непосредственно в процессе создания изделия или синтеза покрытия [7–10]. «Предсказание» изменения состава на основе равновесной термодинамики или по расчетам поля температуры не учитывает особенностей технологий и взаимовлияния процессов разной физической природы, даже если при этом используются современные методы [11–15], требующие много информации о свойствах (точность определения которых невелика) и содержащие множество параметров с нечетко определенным смыслом. Исследование взаимосвязи «процесс – структура – свойства» на основе моделей разного уровня детальности [16–19] и остаточных напряжений [20–22] в большинстве работ основано на последовательном подходе к моделированию процессов разной природы: при моделировании формирования структуры и напряжений используются данные, полученные при решении теплофизических задач, – поля температуры, типичные термические циклы и др. Влияние изменяющихся в динамике структуры и состава на свойства, температуру и сопутствующие напряжения анализируется редко. В работах типа [23; 24] формирование структуры при аддитивном производстве связывается с термогидродинамическими процессами в ванне расплава. Независимо рассчитанную динамику поля температуры в [25; 26] используют для прогнозирования эволюции зеренной структуры. Авторы [27] в трехмерной термомеханической модели учитывают вклад мартенситного превращения в полный тензор деформаций, а также зависимость свойств материала от температуры и истории изменения фазового состояния. Остаточные напряжения для однопроходной и многопроходной наплавки авторы [28] рассчитывали на основе решения задачи теплопроводности и геометрической модели наплавленного объекта. Термодинамически обоснованная взаимообусловленность процессов разной физической природы в подобных исследованиях не анализируется.

К моделированию процессов создания новых материалов (например, интерметаллидных или металломатричных композитов) в лазерных и электронно-лучевых технологиях можно подойти с точки зрения управления процессами фазообразования в зоне реакции подвижным внешним воздействием. Для этого потребуется опыт, накопленный в области теории горения и взрыва [29] и в области моделирования химико-технологических процессов [30]. Модели лазерной термохимии [31; 32] также полезны для анализа качественных эффектов. В литературе имеются работы, применимые к анализу управления физико-химическими процессами лазерным

воздействием и основанные на классических подходах. Например, в [33] найдены стационарные решения одномерной модели распространения фронта экзотермической реакции при дополнительном нагреве лазерным источником тепла. Авторы указывают, что несамостоятельные устойчивые режимы распространения фронта возможны не только при больших, но и при малых скоростях движения лазера. В статье [34] анализируется возможность управления реакциями в проточном реакторе за счет селективного действия лазерного излучения. Инициирование реакций самораспространяющегося высокотемпературного синтеза (СВС) в бинарных порошковых смесях импульсом лазерного излучения обсуждается в [35], где предлагается единый механизм, включающий формирование очага реакции. Газолазерная резка, которая сопровождается экзотермической реакцией окисления, анализируется в [36] подобно диффузионным режимам горения. Модель управления реакциями СВС подвижным лазерным источником в приближении суммарной твердофазной реакции предложена в [37]. Пожалуй, это – одна из первых работ, где речь идет о моделировании создания изделий в комбинированной технологии селективного лазерного спекания, совмещенной с СВС. В связанных моделях [38–40] классические подходы позволяют отказаться от учета деталей [41], роль которых оказывается незначительной для выявления качественных эффектов, и выявить безразмерные комплексы и критерии, которые могут быть полезными для обработки эксперимента и оптимизации технологий.

Цель настоящей работы состоит в построении одномерной связанной модели синтеза покрытия на подложке, параметрическое исследование которой позволит выявить наиболее интересные качественные эффекты.

1. Физическая постановка задачи

Предполагается, что реакционный слой, свободно расположенный на подложке (рис. 1, *a*), находится в условиях плоского напряженного состояния

$$\sigma_{zz} = 0\,. \tag{1}$$

В этом случае

$$\sigma_{zz} = \sigma_{xy} = \sigma_{xz} = \sigma_{yz} = 0 \tag{2}$$

$$\begin{vmatrix} \varepsilon_{xx} & \varepsilon_{xy} & 0 \\ \varepsilon_{yx} & \varepsilon_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_{zz} \end{vmatrix} \tag{3}$$

По поверхности реагента по некоторой заданной траектории бежит лазерный луч. Особенностям описания формы источников тепла, связанных с лазером, посвящены специальные исследования [42–44]. Поскольку в общем случае лазерное излучение поглощается не только на поверхности, но и в объеме порошка, а поглощение лазерного излучения можно описать законом, по форме совпадающим с законом Ламберта – Бугера [45], то плотность объемного источника тепла в выбранной системе координат представим в виде

$$W_{ext} = (1-f_L)\sigma_L \frac{W_0}{kS_L} \times$$
$$\times \exp\left[-\frac{\left(x - x_0 - V_{L,x}t\right)^2}{R_x^{\,2}} - \frac{\left(y - y_0 - V_{L,y}t\right)^2}{R_y^{\,2}} - \sigma_L\left(h_S + h_R - z\right) \right],$$

где W_0 – мощность лазерного излучения, S_L – эффективная площадь пятна нагрева, определяемая формой луча лазера с главными радиусами кривизны R_x, R_y; $V_{L,x}$, $V_{L,y}$ – компоненты вектора скорости луча лазера (в реальной ситуации луч сканирует относительно заданного положения, а движется манипулятор или подложка с расположенным на ней реагентом); x_0, y_0 – начальное положение источника на поверхности реагента; σ_L – показатель поглощения в законе Ламберта – Бугера; f_L – коэффициент отражения лазерного излучения. При высоких частотах сканирования лазерный источник можно заменить эффективным источником тепла, форма которого зависит от вида развертки луча лазера [46].

2. Основные уравнения

Для того чтобы учесть в модели управляемого синтеза покрытия свойства подложки или окружающих слоев и одновременно характер напряженно-деформированного состояния, будем исходить из трехмерных уравнений теплопроводности и уравнений движения, справедливые как для покрытия, так и для подложки, и свойства которых различны. Уравнение теплопроводности

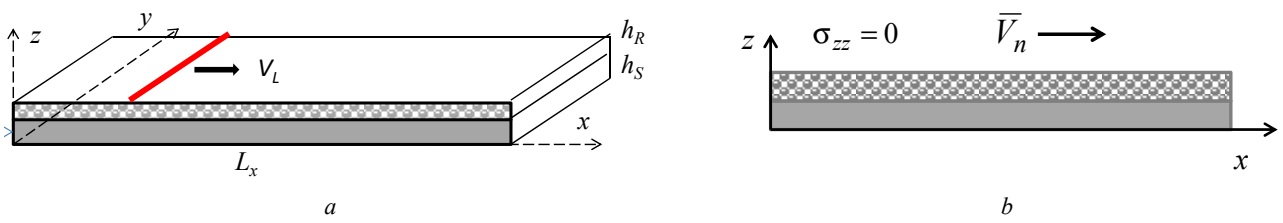


Рис. 1. Пояснение к постановке задачи: *a* – трехмерный объект; *b* – переход к одномерной модели

Fig. 1. Explanation of the problem formulation: *a* – three-dimensional object; *b* – transition to one-dimensional model

$$c_\varepsilon \rho \frac{dT}{dt} = \lambda_T \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right) + W_{ch} + W_{ext} - 3K\alpha_T T \frac{d\varepsilon_{kk}}{dt} \quad (4)$$

включает источник химического тепловыделения W_{ch} (первое слагаемое после скобок справа) и источник тепла вследствие внешнего нагрева W_{ext} (следующее слагаемое справа), так как в общем случае поглощение энергии лазера или электронного луча происходит в объеме материала. Последнее слагаемое справа в (4) отражает связанный характер процессов переноса тепла и деформирования.

В (4) приняты следующие обозначения: T – температура; x, y, z – пространственные координаты, t – время; ρ – плотность; c_ε – теплоемкость при постоянной деформации; λ_T – эффективный коэффициент теплопроводности; K – изотермический модуль всестороннего сжатия; α_T – линейный коэффициент теплового расширения. Свойства каждого слоя считаем некоторыми средними (эффективными) и не зависящими от температуры. Другие обозначения: $\varepsilon_{kk} = \varepsilon_{11} + \varepsilon_{22} + \varepsilon_{33}$ – первый инвариант тензора деформаций с компонентами ε_{ij}; $d.../dt = \partial.../\partial t + V_x\, \partial.../\partial x + V_y\, \partial.../\partial y + V_z\, \partial.../\partial z$; V_x, V_y, V_z – компоненты вектора скорости, связанные с компонентами тензора деформаций соотношениями

$$\frac{d\varepsilon_{xx}}{dt} = \frac{\partial V_x}{\partial x};\ \frac{d\varepsilon_{yy}}{dt} = \frac{\partial V_y}{\partial y};\ \frac{d\varepsilon_{xy}}{dt} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial V_x}{\partial y} + \frac{\partial V_y}{\partial x} \right) \text{ и т.д.} \quad (5)$$

Чтобы охарактеризовать напряженно-деформированное состояние подложки с синтезируемым покрытием, в общем случае нам требуются уравнения движения

$$\begin{gathered} \frac{\partial \sigma_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{xy}}{\partial y} + \frac{\partial \sigma_{xz}}{\partial z} = \rho \frac{dV_x}{dt}; \\ \frac{\partial \sigma_{yx}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{yy}}{\partial y} + \frac{\partial \sigma_{yz}}{\partial z} = \rho \frac{dV_y}{dt}; \\ \frac{\partial \sigma_{zx}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{zy}}{\partial y} + \frac{\partial \sigma_{zz}}{\partial z} = \rho \frac{dV_z}{dt} \end{gathered} \quad (6)$$

и определяющие соотношения, в качестве которых используем обобщенные соотношения Дюамеля – Неймана

$$\frac{d\sigma_{ij}}{dt} = 2\mu \frac{d\varepsilon_{ij}}{dt} + \delta_{ij} \left[\lambda \frac{d\varepsilon_{kk}}{dt} - K \frac{dw}{dt} \right], \quad (7)$$

где w – в общем случае функция концентраций и температуры:

$$w = 3\left[\alpha_T \left(T - T_0 \right) + \sum_{k=1}^{n} \alpha_k \left(\eta_k - \eta_{k0} \right) \right], \quad (8)$$

η_k – массовые концентрации компонентов, α_k – коэффициенты концентрационного расширения; индекс «0» относится к недеформированному состоянию; n – число компонентов смеси в покрытии (элементов и соединений); δ_{ij} – символ Кронекера

$$\begin{cases} \delta_{ij} = 1, \text{ если i = j;} \\ \delta_{ij} = 0, \text{если i} \neq \text{j.} \end{cases}$$

Второе слагаемое в (8) зависит от формулировки и способа решения кинетической задачи.

Уравнение неразрывности представим в виде

$$\frac{d\rho}{dt} + \rho \left(\frac{\partial V_x}{\partial x} + \frac{\partial V_y}{\partial y} + \frac{\partial V_z}{\partial z} \right) = 0. \quad (9)$$

Уравнения (4), (6) и (9) справедливы для сред с любыми реологическими свойствами. Однако в случае вязких сред в уравнении теплопроводности появится еще одно слагаемое, связанное с диссипацией энергии.

В приближении малых деформаций соотношения (7) эквивалентны соотношениям

$$\sigma_{ij} = 2\mu\varepsilon_{ij} + \delta_{ij} \left[\lambda \varepsilon_{kk} - Kw \right] \quad (10)$$

или

$$\sigma_{ij} = \frac{E}{(1+\nu)} \varepsilon_{ij} + \delta_{ij} \left[\frac{E\nu}{(1-2\nu)(1+\nu)} \varepsilon_{kk} - \frac{E}{3(1-2\nu)} w \right],$$

где $i, j = x, y, z$; λ, μ – коэффициенты Ламе, $K = \lambda + \frac{2}{3}\mu$ – модуль всестороннего сжатия, связанные с техническими характеристиками (модулем упругости E и коэффициентом Пуассона ν) соотношениями

$$K = \frac{E}{3(1-2\nu)},\ \lambda = \frac{E\nu}{(1+\nu)(1-2\nu)},\ \mu = \frac{E}{2(1+\nu)}. \quad (11)$$

Если в подложке химических реакций нет, то в ней

$$w_S = 3\alpha_{T,S} \left(T - T_0 \right).$$

В покрытии в общем случае имеем

$$w_R = 3\left[\alpha_{T,R} \left(T - T_0 \right) + \sum_k \alpha_k \left(\eta_k - \eta_{k0} \right) \right].$$

Здесь и далее индекс «S» относится к подложке (Substrate), индекс «R» относится к покрытию (Reagent).

Для физико-химических процессов, протекающих преимущественно в твердой фазе, плавление порошка и изменение пористости (если речь идет о синтезе материала в слое порошка) явно можно не учитывать. Однако в некоторых случаях их учет может быть важен [47–49].

Граничные условия на торцах $x = 0; x = L_x$; $y = 0; y = L_y$ и на нижней поверхности подложки связаны с потерями тепла излучением и/или конвекцией. Например, для $x = 0$ имеем

$$\lambda_T \frac{\partial T}{\partial x} = \alpha_L \left(T - T_e\right) + \sigma_0 \varepsilon_L \left(T^4 - T_w^{\,4}\right), \qquad (12)$$

где T_e – температура окружающей среды; T_w – температура стенок вакуумной камеры (если процесс осуществляется в камере); α_L – коэффициент теплоотдачи; ε_L – степень черноты поверхности; σ_0 – постоянная Стефана – Больцмана.

Заметим, что при условии $T_e = T_W$ соотношение (12) можно представить в виде

$$\lambda_T \frac{\partial T}{\partial x} = \alpha_L \left(T - T_e\right) + \\ + \sigma_0 \varepsilon_L \left(T^2 - T_e^2\right)\left(T^2 + T_e^2\right) = \alpha_{L,eff} \left(T - T_e\right),$$

где

$$\alpha_{L,eff} = \alpha_L + \sigma_0 \varepsilon_L \left(T + T_e\right)\left(T^2 + T_e^2\right).$$

Это довольно часто используется при моделировании с помощью коммерческих пакетов.

Между покрытием и подложкой контакт считаем идеальным.

Так как внешний источник тепла присутствует в объеме, на поверхности покрытия условие будет аналогичным (12).

В начальный момент времени, $t = 0$, имеем:

$$T = T_0; \eta_k = \eta_{k0}; \sigma_{ij} = 0; \varepsilon_{ij} = 0.$$

Если принять, что подложка, на которой расположен тонкий слой порошка, также является тонкой, то в простейшем приближении можем принять, что все величины, которые будем использовать при теоретическом описании процесса синтеза, от координаты *z* не зависят. Однако материалы оказывают влияние друг на друга, что можно учесть с помощью осреднения.

3. Переход к двумерной модели

Проинтегрируем уравнения (4), (6) и (10) по координате *z* (по толщинам подложки h_S и покрытия h_R). Полагаем, что внешней механической нагрузки нет. Так как слои суммарно тонкие, то, как указано выше, для системы в целом имеем плоское напряженное состояние. В результате интегрирования получим

$$\left(c_\varepsilon \rho\right)_{eff} \frac{dT}{dt} = \lambda_{T,eff} \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2}\right) + \\ + \frac{h_R W_{ch} + H}{h_S + h_R} + \frac{W_{ext,eff}}{h_S + h_R} - 3\left(K\alpha_T\right)_{eff} T \frac{d\varepsilon_{kk}}{dt}; \qquad (13)$$

$$\frac{\partial \sigma_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{xy}}{\partial y} = \rho_{eff} \frac{dV_x}{dt};$$

$$\frac{\partial \sigma_{yx}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{yy}}{\partial y} = \rho_{eff} \frac{dV_y}{dt} \qquad (14)$$

и

$$\sigma_{xx} = 2\mu_{eff} \varepsilon_{xx} + \left[\lambda_{eff} \varepsilon_{kk} - \left\langle Kw \right\rangle\right], \\ \sigma_{yy} = 2\mu_{eff} \varepsilon_{yy} + \left[\lambda_{eff} \varepsilon_{kk} - \left\langle Kw \right\rangle\right], \qquad (15) \\ 0 = 2\mu_{eff} \varepsilon_{zz} + \left[\lambda_{eff} \varepsilon_{kk} - \left\langle Kw \right\rangle\right], \\ \sigma_{xy} = 2\mu_{eff} \varepsilon_{xy},$$

где для эффективных свойств введены обозначения

$$\rho_{eff} = \frac{\rho_S h_S + \rho_R h_R}{h_S + h_R}, \ \left(c_\varepsilon \rho\right)_{eff} = \frac{\left(c_\varepsilon \rho\right)_S h_S + \left(c_\varepsilon \rho\right)_R h_R}{h_S + h_R};$$

$$\lambda_{T,eff} = \frac{\lambda_{T,S} h_S + \lambda_{T,R} h_R}{h_S + h_R};$$

$$\left(K\alpha_T\right)_{eff} = \frac{K_S \alpha_{T,S} h_S + K_R \alpha_{T,R} h_R}{h_S + h_R}; \qquad (16)$$

$$\lambda_{eff} = \frac{\lambda_S h_S + \lambda_R h_R}{h_S + h_R} \quad \mu_{eff} = \frac{\mu_S h_S + \mu_R h_R}{h_S + h_R};$$

$$\left\langle Kw \right\rangle = \frac{\left(K_S h_S w_S + K_R h_R w_R\right)}{h_S + h_R}.$$

После интегрирования в уравнении теплопроводности появилось слагаемое

$$H = \alpha_{eff} \left(T - T_0\right) + \sigma_0 \varepsilon_{eff} \left(T^4 - T_w^{\,4}\right),$$

где α_{eff} – эффективный коэффициент теплоотдачи в законе Ньютона (характеризует суммарные потери тепла с поверхностей подложки и покрытия); ε_{eff} – характеризует суммарные свойства поверхностей, участвующих в лучистом теплообмене.

Внешний источник тепла принимает вид

$$W_{ext,eff} = \int_{h_S}^{h_S + h_R} W_{ext} dz = \\ = \left(1 - f_L\right) \frac{W_0'}{kS_L} \exp\left[-\frac{\left(x - x_0 - V_{L,x} t\right)^2}{R_x^{\,2}} - \frac{\left(y - y_0 - V_{L,y} t\right)^2}{R_y^{\,2}}\right],$$

где

$$W_0' = W_0 \left(1 - \exp\left(-\sigma_L h_R\right)\right).$$

Если деформации малы, а силами инерции можно пренебречь, полные производные в (13) заменятся на частные, а вместо уравнений движения останутся уравнения равновесия (которые выполняются для средних напряжений). Уравнения примут вид

$$\left(c_\varepsilon \rho\right)_{eff} \frac{\partial T}{\partial t} = \lambda_{T,eff} \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2}\right) + \\ + \frac{h_R W_{ch} + H}{h_S + h_R} + \frac{W_{ext,eff}}{h_S + h_R} - 3\left(K\alpha_T\right)_{eff} T \frac{\partial \varepsilon_{kk}}{\partial t}; \qquad (17)$$

$$\frac{\partial \sigma_{xx}}{\partial x}+\frac{\partial \sigma_{xy}}{\partial y}=0;$$

$$\frac{\partial \sigma_{yx}}{\partial x}+\frac{\partial \sigma_{yy}}{\partial y}=0. \qquad (18)$$

Дополнительным соотношением будет

$$\frac{\partial^2 \sigma_{xy}}{\partial x \partial y}=2\mu_{eff}\frac{\partial^2 \varepsilon_{xy}}{\partial x \partial y}= \\ =2\mu_{eff}\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x \partial y}\left(\frac{\partial u_x}{\partial y}+\frac{\partial u_y}{\partial x}\right)=\mu_{eff}\left(\frac{\partial^2 \varepsilon_{xx}}{\partial y^2}+\frac{\partial^2 \varepsilon_{yy}}{\partial x^2}\right), \qquad (19)$$

где u_x, u_y – компоненты вектора перемещений.

В результате полученную двумерную задачу можно решать численно методом, описанным, например, в [39; 40]. Основное отличие от [39] состоит в появлении эффективных свойств, зависящих от свойств материалов покрытия и подложки.

Однако для качественного исследования роли подложки задачу можно еще упростить.

4. Простейший вариант модели

Полагаем, что лазерный или электронный луч развернут в линию. В этом случае $V_{L,y}=0$; $V_{L,x}=V_L$, $R_x=R_0$, от координаты *y* все величины зависеть не будут (см. рис. 1, *b*), и уравнение теплопроводности примет вид

$$(c_\varepsilon \rho)_{eff}\frac{\partial T}{\partial t}=\lambda_{T,eff}\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}+\frac{h_R W_{ch}+H}{h_S+h_R}+ \\ +W_{ext,eff}-3(K\alpha_T)_{eff}T\frac{\partial \varepsilon_{kk}}{\partial t},$$

где

$$W_{ext,eff}(x,t)=q_{eff}\exp\left[-\frac{(x+x_0-V_L t)^2}{{R_0}^2}\right],$$

$$q_{eff}=(1-f_L)\frac{W_0{}'}{k' S_L (h_S+h_R)}.$$

В этом случае имеем нормально-полосовой источник тепла.

Учитывая (15), перепишем уравнения равновесия в деформациях

$$\frac{2\mu_{eff}}{\lambda_{eff}+2\mu_{eff}}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\left[2(\lambda_{eff}+\mu_{eff})\varepsilon_{xx}-\langle Kw\rangle\right]=0:$$

$$\mu_{eff}\frac{\partial^2 \varepsilon_{yy}}{\partial x^2}=0,$$

Из них следует

$$\varepsilon_{xx}=\frac{\langle Kw\rangle}{2(\lambda_{eff}+\mu_{eff})}+Ax+B \qquad (20)$$

и

$$\varepsilon_{yy}=Cx+D. \qquad (21)$$

Далее находим оставшиеся величины:

$$\varepsilon_{zz}=-(1-\gamma_1)(\varepsilon_{yy}+\varepsilon_{xx})+\frac{\langle Kw\rangle}{(\lambda_{eff}+2\mu_{eff})};$$

$$\sigma_{xx}=2\gamma_1(\lambda_{eff}+\mu_{eff})(Ax+B)+\gamma_1\lambda_{eff}(Cx+D); \qquad (22)$$

$$\sigma_{yy}=2\gamma_1(\lambda_{eff}+\mu_{eff})(Cx+D)+ \\ +\gamma_1\lambda_{eff}(Ax+B)-\frac{\mu_{eff}}{\lambda_{eff}+\mu_{eff}}\langle Kw\rangle,$$

где $\gamma_1=\dfrac{2\mu_{eff}}{(\lambda_{eff}+2\mu_{eff})}$.

В этом случае

$$\sigma_{xy}=2\mu_{eff}\varepsilon_{xy}=0.$$

Условия для нахождения постоянных интегрирования *A*, *B*, *C*, *D* записываем в интегральном виде

$$\int_0^{L_x}\sigma_{xx}dx=0;\ \int_0^{L_x}\sigma_{yy}dx=0;\ \int_0^{L_x}\sigma_{xx}xdx=0.$$

Это дает четыре уравнения

$$\int_0^{L_x}\left[2\gamma_1(\lambda_{eff}+\mu_{eff})(Ax+B)+\gamma_1\lambda_{eff}(Cx+D)\right]dx=0,$$

$$\int_0^{L_x}\left[2\gamma_1(\lambda_{eff}+\mu_{eff})(Cx+D)+\gamma_1\lambda_{eff}(Ax+B)-\frac{\mu_{eff}}{\lambda_{eff}+\mu_{eff}}\langle Kw\rangle\right]dx=0,$$

$$\int_0^{L_x}\left[2\gamma_1(\lambda_{eff}+\mu_{eff})(Ax+B)+\gamma_1\lambda_{eff}(Cx+D)\right]xdx=0,$$

$$\int_0^{L_x}\left[2\gamma_1(\lambda_{eff}+\mu_{eff})(Cx+D)+\gamma_1\lambda_{eff}(Ax+B)-\frac{\mu_{eff}}{\lambda_{eff}+\mu_{eff}}\langle Kw\rangle\right]xdx=0$$

или

$$\left(A+B\frac{2}{L_x}\right)+\frac{\lambda_{eff}}{2(\lambda_{eff}+\mu_{eff})}\left(C+D\frac{2}{L_x}\right)=0,$$

$$\left(C+D\frac{2}{L_x}\right)+\frac{\lambda_{eff}}{2(\lambda_{eff}+\mu_{eff})}\left(A+B\frac{2}{L_x}\right)- \\ -\frac{\lambda_{eff}+2\mu_{eff}}{(\lambda_{eff}+\mu_{eff})^2}\frac{1}{2}\frac{1}{{L_x}^2}\int_0^{L_x}\langle Kw\rangle dx=0,$$

$$\left(A+B\frac{3}{2}\frac{1}{L_x}\right)+\frac{\lambda_{eff}}{2(\lambda_{eff}+\mu_{eff})}\left(C+D\frac{3}{2}\frac{1}{L_x}\right)=0,$$

$$\left(C+D\frac{3}{2}\frac{1}{L_x}\right)+\frac{\lambda_{eff}}{2(\lambda_{eff}+\mu_{eff})}\left(A+B\frac{3}{2}\frac{1}{L_x}\right)- \\ -\frac{\lambda_{eff}+2\mu_{eff}}{(\lambda_{eff}+\mu_{eff})^2}\frac{1}{4}\frac{3}{L_x^3}\int_0^{L_x}\langle Kw\rangle xdx=0.$$

Вводим обозначения

$$M = \frac{\lambda_{eff} + 2\mu_{eff}}{\left(\lambda_{eff} + \mu_{eff}\right)^2} \frac{1}{2} \frac{1}{L_x{}^2} \int_0^{L_x} \langle Kw \rangle dx ;$$

$$N = \frac{\lambda_{eff} + 2\mu_{eff}}{\left(\lambda_{eff} + \mu_{eff}\right)^2} \frac{1}{4} \frac{3}{L_x^3} \int_0^{L_x} \langle Kw \rangle x dx ;$$

$$\beta = \frac{\lambda_{eff}}{2\left(\lambda_{eff} + \mu_{eff}\right)} .$$

Тогда система линейных уравнений внешне будет выглядеть очень просто:

$$\left(A + B\frac{2}{L_x} \right) + \beta \left(C + D\frac{2}{L_x} \right) = 0 ;$$

$$\beta \left(A + B\frac{2}{L_x} \right) + \left(C + D\frac{2}{L_x} \right) = M ;$$

$$\left(A + B\frac{3}{2}\frac{1}{L_x} \right) + \beta \left(C + D\frac{3}{2}\frac{1}{L_x} \right) = 0 ;$$

$$\beta \left(A + B\frac{3}{2}\frac{1}{L_x} \right) + \left(C + D\frac{3}{2}\frac{1}{L_x} \right) = N .$$

Решение этой системы уравнений находится без труда:

$$A = \frac{\beta}{\beta^2 - 1}\left(4N - 3M\right);\ B = \frac{2\beta L_x}{\beta^2 - 1}\left(M - N\right); \quad (23)$$

$$C = \frac{1}{\beta^2 - 1}\left(3M - 4N\right);\ D = \frac{2L_x}{\beta^2 - 1}\left(N - M\right).$$

Если размер пластины в направлении оси $0X$ велик, то $M \to 0, N \to 0$. В этом случае система уравнения для постоянных интегрирования имеет только тривиальное решение. Тогда

$$\varepsilon_{xx} = \frac{\langle Kw \rangle}{2\left(\lambda_{eff} + \mu_{eff}\right)};\ \varepsilon_{zz} = \varepsilon_{xx} ; \quad (24)$$

$$\varepsilon_{yy} = 0 ;\ \sigma_{xx} = 0 ;$$

$$\sigma_{yy} = -\frac{\mu_{eff}}{\lambda_{eff} + \mu_{eff}} \langle Kw \rangle ; \quad (25)$$

$$\left(c_\varepsilon \rho\right)_{eff} \frac{\partial T}{\partial t} = \lambda_{T,eff} \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{h_R W_{ch} + H}{h_S + h_R} + W_{ext,eff} - \frac{3\left(K\alpha_T\right)_{eff}}{\left(\lambda_{eff} + \mu_{eff}\right)} T \frac{\partial \langle Kw \rangle}{\partial t}. \quad (26)$$

Для пластины конечных размеров в направлении $0X$ имеем

$$\varepsilon_{kk} = \frac{\langle Kw \rangle}{\left(\lambda_{eff} + \mu_{eff}\right)} + \gamma_1 \left[\left(A + C\right)x + B + D \right] \quad (27)$$

и

$$\left(c_\varepsilon \rho\right)_{eff} \frac{\partial T}{\partial t} = \lambda_{T,eff} \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{h_R W_{ch} + H}{h_S + h_R} + W_{ext,eff} - 3\left(K\alpha_T\right)_{eff} T \frac{\partial}{\partial t}\left[\frac{\langle Kw \rangle}{\left(\lambda_{eff} + \mu_{eff}\right)} + \gamma_1 \left[\left(A + C\right)x + B + D \right] \right]. \quad (28)$$

Таким образом, в этом простейшем случае задачи теплопроводности и равновесия формально разделяются, что удобно при численной реализации модели независимо от сложности кинетической подзадачи. В двумерном случае такое явное разделение возможно при численном решении задачи, как и в [39], на каждом шаге по времени, поскольку для задачи о равновесии время является параметром. В случае детали конечных размеров после подстановки A, B, C, D в (28), это уравнение будет содержать дополнительные слагаемые, в том числе интегральные, роль которых в инициировании реакции будет, по-видимому, аналогична [50; 51].

В качестве примера рассмотрим простую ситуацию, когда весь комплекс химических реакций можно описать суммарной схемой

$$\text{reagent} \rightarrow \text{product} .$$

Тогда к уравнению теплопроводности (26) добавляем единственное уравнение кинетики:

$$\frac{d\eta}{dt} = k_0 \left(1 - \eta\right) \exp\left(-\frac{E_a}{RT} \right) = \Phi\left(T, \eta\right), \quad (29)$$

где η – степень превращения, E_a – энергия активации химической реакции; k_0 – предэкспоненциальный множитель.

Химический источник в покрытии есть

$$W_{ch} = Q_{ch} \Phi\left(T, \eta\right),$$

где Q_{ch} – тепловой эффект суммарной химической реакции.

Тогда в покрытии

$$w_R = 3\left[\alpha_{T,R}\left(T - T_0\right) + \alpha_C \left(\eta - \eta_0\right) \right], \quad (30)$$

т.е. химическим объемным деформациям соответствует $w_{ch} = 3\alpha_C \left(\eta - \eta_0\right)$. Параметр α_C (он может быть как положительным, так и отрицательным) отражает факт, идет ли реакция с расширением объема или с его уменьшением.

5. Задача в безразмерных переменных

Безразмерные переменные следует выбирать, исходя из физического смысла задачи. При этом в модели появляются комплексы и физических величин, которые представляют собой отношения масштабов разных явлений. Особый интерес это представляет для задач, в которых совместно изучаются явления разной физической

природы. Переход к безразмерным переменным позволяет (1) уменьшить число параметров, влияние которых необходимо изучить; (2) сделать результаты наиболее общими; (3) определить критерии, управляющие процессом, которые впоследствии можно будет использовать для обработки эксперимента; (4) осуществить подробное параметрическое исследование; (5) разработать подходящий вычислительный алгоритм; (6) «сгладить» неточности в определении физических параметров и «скрыть» в критериях те из них, которые неизвестны. Как правило, оказывается, что такие скрытые параметры не являются определяющими. Многих из таких возможностей для связанных моделей не предоставляют коммерческие пакеты, пользователи которых должны свято верить в непогрешимость используемых в них данных и корректность подгоночных параметров или корректирующих множителей, которые неизбежны в любой модели.

Перейдем в (26), (29) к безразмерным переменным.

$$\theta = \frac{T - T_*}{T_* - T_0},\ \tau = \frac{t}{t_*},\ \xi = \frac{x}{x_*}, \tag{31}$$

где

$$x_* = \sqrt{\lambda_R t_* / (c_R \rho_R)}$$

– характерный тепловой масштаб для верхнего слоя;

$$T_* = T_0 + \frac{Q_{ch}}{(c_\varepsilon \rho)_R} \tag{32}$$

– адиабатическая температура и

$$t_* = \frac{(c_\varepsilon \rho)_R R T_*^2}{E_a Q_{ch} k_0} \exp\left(\frac{E_a}{R T_*}\right) \tag{33}$$

– период адиабатической индукции или время завершения реакции в адиабатических условиях.

Такие масштабы времени и температуры подходят, если реакция – суммарно экзотермическая. В других случаях (которые в настоящей работе не анализируем) более подходящими масштабами могут быть другие масштабы:

$$T_* = T_0 + \frac{q_{eff} t_*}{(c_\varepsilon \rho)_R}$$

– температура, до которой можно нагреть поверхность (слой толщины $h_S + h_R$) за время t_*;

$$t_* = \frac{1}{k_0} \exp\left(\frac{E_a}{R T_*}\right)$$

– характерное время химической реакции при температуре T_*.

Используя (32), (33), придем к следующим уравнениям

$$\left[K_C \varepsilon + (1-\varepsilon)\right] \frac{\partial \theta}{\partial \tau} = \left[K_{\lambda,T} \varepsilon + (1-\varepsilon)\right] \frac{\partial^2 \theta}{\partial \xi^2} + \\ + (1-\varepsilon) \Phi(\theta, \eta) + \bar{H}(\theta) + \\ + \bar{W}_{ext} - \omega(\sigma + \theta) \frac{\partial}{\partial \tau} \left\{ (\theta + 1) + \frac{(1-\varepsilon) g}{K_\alpha \varepsilon + (1-\varepsilon)} (\eta - \eta_0) \right\}; \tag{34}$$

$$\frac{d\eta}{d\tau} = \gamma (1-\eta) \exp\left(\frac{\theta}{(\sigma + \theta)\beta}\right) = \Phi(\theta, \eta), \tag{35}$$

где

$$\bar{W}_{ext} = S \exp\left(-\frac{\left(\xi + \xi_0 - \bar{V}\tau\right)^2}{\delta}\right);$$

$$\bar{H}(\theta) = -Nu(\theta + 1) - B\left[(\theta + \sigma)^4 - (\theta_W + \sigma)^4\right];$$

$$\omega = \omega_0 \frac{\left[K_\alpha \varepsilon + (1-\varepsilon)\right]^2}{\left[\gamma_R \left(K_\lambda \varepsilon + (1-\varepsilon)\right) + (1-\gamma_R)\left(K_\mu \varepsilon + (1-\varepsilon)\right)\right]}$$

– эффективный коэффициент связанности.

Раскрывая фигурные скобки в (34) и собирая подобные слагаемые, получим

$$\left[K_C \varepsilon + (1-\varepsilon) + \omega(\sigma + \theta)\right] \frac{\partial \theta}{\partial \tau} = \left[K_{\lambda,T} \varepsilon + (1-\varepsilon)\right] \frac{\partial^2 \theta}{\partial \xi^2} + \\ + (1-\varepsilon) \left[1 - \omega(\sigma + \theta) \frac{g}{K_\alpha \varepsilon + (1-\varepsilon)}\right] \Phi(\theta, \eta) + \bar{H}(\theta) + \bar{W}_{ext}. \tag{36}$$

То есть, как и в [52], можем говорить об эффективной теплоемкости

$$\bar{C}_{eff} = K_C \varepsilon + (1-\varepsilon) + \omega(\sigma + \theta)$$

и об эффективном тепловом эффекте суммарной химической реакции

$$\bar{Q}_{ch,eff} = (1-\varepsilon) \left[1 - \omega(\sigma + \theta) \frac{g}{K_\alpha \varepsilon + (1-\varepsilon)}\right].$$

Граничными и начальными условиями в (35), (36) будут

$$\xi = 0: \frac{\partial \theta}{\partial \xi} = 0;\ \xi = L >> 1: \frac{\partial \theta}{\partial \xi} = 0; \tag{37}$$

$$\tau = 0: \theta = -1;\quad \eta = 0. \tag{38}$$

Напряжения и деформации (24), (25), отличные в данном приближении от нуля, в безразмерных переменных имеют вид:

$$S_{yy} = -(1-\gamma_R)\left(K_\mu \varepsilon + (1-\varepsilon)\right) U;\ e_{xx} = \frac{1}{2} U, \tag{39}$$

где

$$U=\frac{\left\{\left[K_\alpha\varepsilon+(1-\varepsilon)\right](\theta+1)+g(\eta-\eta_0)\right\}}{\gamma_R\left(K_\lambda\varepsilon+(1-\varepsilon)\right)+(1-\gamma_R)\left(K_\mu\varepsilon+(1-\varepsilon)\right)}.$$

Если подложки нет, имеем:

$$\left[1+\omega_0(\sigma+\theta)\right]\frac{\partial\theta}{\partial\tau}=$$

$$=\frac{\partial^2\theta}{\partial\xi^2}+\left[1-\omega_0(\sigma+\theta)g\right]\Phi(\theta,\eta)+\bar{H}(\theta)+\bar{W}_{ext};$$

$$S_{yy}=-(1-\gamma_R)\cdot\left((\theta+1)+g(\eta-\eta_0)\right);$$

$$e_{xx}=\frac{1}{2}\left((\theta+1)+g(\eta-\eta_0)\right).$$

В несвязанной задаче $\bar{C}_{eff}\equiv 1$, $\bar{Q}_{ch,eff}=1$ и

$$\frac{\partial\theta}{\partial\tau}=\frac{\partial^2\theta}{\partial\xi^2}+\Phi(\theta,\eta)+\bar{H}(\theta)+\bar{W}_{ext} \qquad (40)$$

Модель содержит достаточно много параметров. Часть из них типична для теории горения:

$$\beta=\frac{T_*R}{E_a}=\frac{\sigma}{\theta_0};\ \gamma=\frac{(c_\varepsilon\rho)_R RT_*^2}{E_a Q_{ch}}=\theta_0^{-1};\ \theta_0=\frac{T_*-T_0}{RT_*^2}E_a.$$

Из этой группы параметров независимы только два. Область изменения параметров β, γ невелика. Малые значения β, γ<<1 типичны для процессов горения и взрыва (0,01–0,03). Для управляемых процессов β, γ $0,03<\beta,\ \gamma<0,2$.

Параметры

$$K_\alpha=\frac{K_S\alpha_{T,S}}{K_R\alpha_{T,R}};\ K_C=\frac{(c_\varepsilon\rho)_S}{(c_\varepsilon\rho)_R};$$

$$K_{\lambda,T}=\frac{\lambda_{T,S}}{\lambda_{T,R}};\ K_\lambda=\frac{\lambda_S}{\lambda_R}\ \text{и}\ K_\mu=\frac{\mu_S}{\mu_R}$$

характеризуют соотношение теплофизических и механических свойств подложки и покрытия. В 3D-технологиях верхний слой – это смесь порошков разного сорта. В некоторых технологиях синтеза покрытий – это предварительно осажденный пористый слой. В любом случае свойства пористого слоя зависят от пористости, которая в процессе спекания и фазообразования изменяется. Вопрос о характере изменения свойств в процессе спекания остается дискуссионным. Но так как безразмерные комплексы включают отношения свойств, то в первом приближении можем ограничиться следующими рассуждениями.

Если предварительно нанесенное покрытие – пористое, то $K_{\lambda,T}>1$. Такое же соотношение скорее типично и для термомеханических свойств. Однако более корректной является оценка эффективных свойств и их отношений по продуктам реакции, формирующимся в покрытии при температуре, характерной для изучаемого процесса. Тогда найдем, что величины этих параметров могут быть как больше, так и меньше единицы.

Параметр K_α можем выразить через отношение КТР и другие параметры:

$$K_\alpha=\frac{K_S\alpha_{T,S}}{K_R\alpha_{T,R}}=K_{\alpha,T}\frac{K_\lambda\gamma_R+\frac{2}{3}K_\mu(1-\gamma_R)}{\gamma_R+\frac{2}{3}(1-\gamma_R)},$$

где $K_{\alpha,T}=\dfrac{\alpha_{T,S}}{\alpha_{T,R}}$.

Связанность процессов разной физической природы описывается параметрами

$$\omega_0=\frac{\left(3K_R\alpha_{T,R}\right)^2}{\lambda_R+\mu_R}\frac{(T_*-T_0)}{(c_\varepsilon\rho)_R}\ \text{и}\ g=\frac{\alpha_C}{\alpha_{T,R}(T_*-T_0)}.$$

В теории термоупругости коэффициент связанности ω_0, как правило, оценивают при начальной температуре. Тогда ω_0 <<1. При температуре T_* эта величина возрастает. Параметр g характеризует отношение химической деформации к термической. Он может быть как положительным (реакция идет с увеличением объема), так и отрицательным (реакция идет с уменьшением объема). Эффективный коэффициент связанности ω зависит от соотношения свойств подложки и покрытия, что проиллюстрировано на рис. 2. Связанность может как значительно возрастать (кривые *1* и *2*), так и ослабляться (кривая *3*). Однако если механические свойства подложки и покрытия одинаковы, то этот коэффициент не изменяется, и наличие подложки проявляется только в изменении эффективного теплового эффекта реакции.

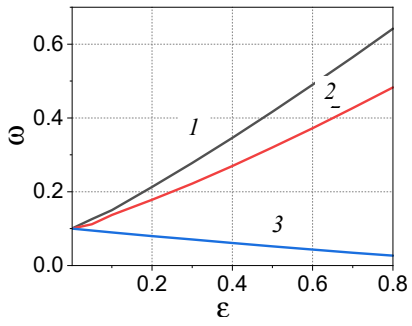


Рис. 2. Изменение эффективного коэффициента связанности с относительной толщиной подложки для разных сочетаний свойств: *1* – $K_C=K_{\lambda,T}=K_\mu=K_\lambda=K_{\alpha,T}=2$; *2* – $K_C=K_{\lambda,T}=0,75$; $K_\mu=K_\lambda=1,5$; $K_{\alpha,T}=2$; *3* – $K_C=K_{\lambda,T}=0,75$; $K_\mu=K_\lambda=K_{\alpha,T}=0,5$

Fig. 2. Variation of effective coupling coefficient with relative substrate thickness for different combinations of properties: *1* – $K_C=K_{\lambda,T}=K_\mu=K_\lambda=K_{\alpha,T}=2$; *2* – $K_C=K_{\lambda,T}=0.75$; $K_\mu=K_\lambda=1,5$; $K_{\alpha,T}=2$; *3* – $K_C=K_{\lambda,T}=0.75$; $K_\mu=K_\lambda=K_{\alpha,T}=0,5$

Управлять процессом синтеза можно с помощью параметров

$$S=\frac{q_{eff}t_*}{(c_\varepsilon\rho)_R(T_*-T_0)};\ \bar{V}=\frac{V_L t_*}{x_*};\ \delta=\frac{R_0^{\,2}(c_\varepsilon\rho)_R}{\lambda_{T,R}t_*},$$

$$\varepsilon=\frac{h_S}{h_S+h_R}<1.$$

Режим синтеза зависит и от потерь тепла, которые связаны с параметрами

$$B=\frac{(T_*-T_0)^3 t_*\sigma\varepsilon_{eff}}{(h_S+h_R)(c_\varepsilon\rho)_R};\ Nu=\frac{\alpha_{eff}t_*}{(h_S+h_R)(c_\varepsilon\rho)_R}\ \text{и}$$

$$\theta_W=\frac{T_W-T_*}{T_*-T_0}<0.$$

Если $T_W=T_0$, то $\theta_W=-1$. Все последние параметры зависят от определения масштаба t_*, который, в свою очередь, зависит от оценки предэкспоненциального фактора k_0 – самой неопределенной величины в макрокинетических моделях. Предэкспонент зависит от тех факторов, контролировать которые практически невозможно. Однако если характерное время реакции считать экспериментально определяемым параметром, а энергию активации реакции и тепловой эффект – оцениваемыми на основе термодинамики или иных независимых теорий, то k_0 становится уже известным.

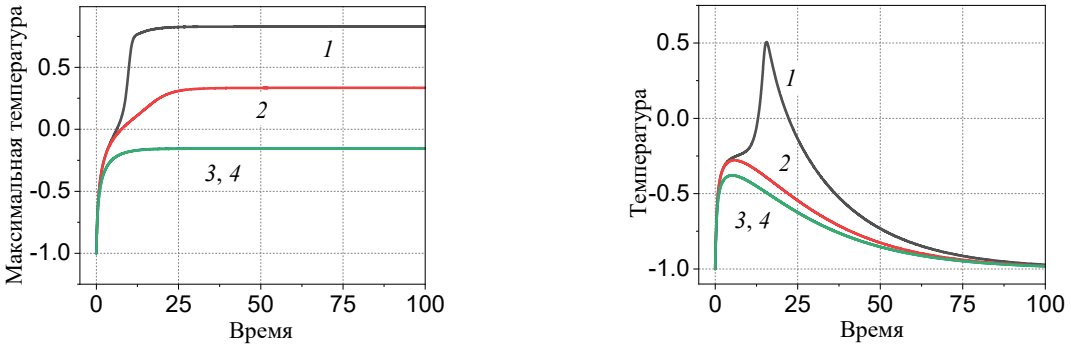
Коэффициент

$$\gamma_R=\frac{\lambda_R}{(\lambda_R+\mu_R)}=2\nu_R$$

можно смело зафиксировать. Для большинства металлов и сплавов он будет варьироваться в пределах от 0,5 до 0,75. В технологи, совмещающей СВС и лазерное спекание [53], часто используют смеси вида Ti-Ni, Al-Ti, Al-Ni или более сложные составы. Для этих металлов имеем $\gamma_R=0.56\div0.69$. В этот же диапазон попадают Cu и Fe. Для определенности примем $\gamma_R=0,6$.

6. Результаты численного исследования

В случае образца большого размера, $L>>1$, в процессе обработки поверхности подвижным источником тепла, развернутым в линию, при любом наборе параметров устанавливается квазистационарный режим, о чем свидетельствует поведение максимальной температуры (рис. 3, *a*, кривая *1*). Если задача – несвязанная ($\omega_0=0$), а подложка отсутствует ($\varepsilon=0$), то при $\sigma=1,1$; $\theta_0=7,5$ (что дает $\gamma\approx0,13$ и $\beta\approx0,147$); $S=1,7$; $\bar{V}=0,8$; $\delta=0,1$; $Nu=0,05$ и $B=10^{-3}$ квазистационарный режим характеризуется максимальной температурой $\theta_{\max}\approx0,84$ и узкой зоной реакции (где происходит тепловыделение вследствие превращения реагентов в продукты реакции) (рис. 4, *a*). Реакция инициируется практически сразу. Это видно по поведению кривой температуры *1* в точке $\xi=0$ (рис. 3, *b*), на которой имеется перегиб, соответствующий ускорению реакций и типичный для задач теории горения. Подложка с относительной толщиной $\varepsilon=0,5$ приводит к существенному уменьшению максимальной температуры; кривая температуры на поверхности уже не имеет перегиба (кривые *2* на рис. 3, *a*, *b*). Как и в первом случае, в квазистационарном режиме имеет место практически полное превращение, но режим характеризуется более широко зоной реакции и областью в начале образца, где имеется неполное превращение. Учитывая связанный характер тепловых и механических процессов (ω=0,3), приходим к еще и большему снижению температуры. При данном наборе параметров степень превращения невелика, не превышает 0,132 (на рисунках не показано), с чем и связано отсутствие влияния характера реакции на поведение температуры: кривые для $g=-0,3$ и $g=0$ практически совпадают.



a *b*

Рис. 3. Максимальная температура (*a*) и температура поверхности (*b*) для разных вариантов модели: *1* – несвязанная задача; подложки нет; *2* – несвязанная задача; $\varepsilon=0,5$; *3*, *4* – связанная задача. Синтез на подложке; *3* – $g=-0,3$; *4* – $g=0$

Fig. 3. Maximum temperature (*a*) and surface temperature (*b*) for different variants of the model: *1* – noncoupled model; no substrate; *2* – noncoupled model; $\varepsilon=0,5$; *3*, *4* – coupled problem. Synthesis on a substrate; *3* – $g=-0,3$; *4* – $g=0$

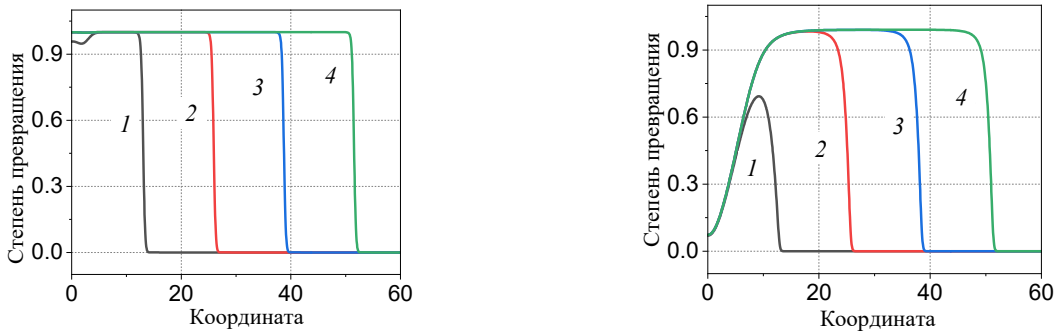


Рис. 4. Пример распространения реакции по образцу в несвязанной модели без подложки (*a*) и с подложкой (*b*). Моменты времени: $\tau =$ *1* – 25; *2* – 50; *3* – 75; *4* – 100

Fig. 4. Example of reaction propagation along specimen in noncoupled model without substrate (*a*) and with substrate (*b*) time moments: $\tau =$ *1* – 25; *2* – 50; *3* – 75; *4* – 100

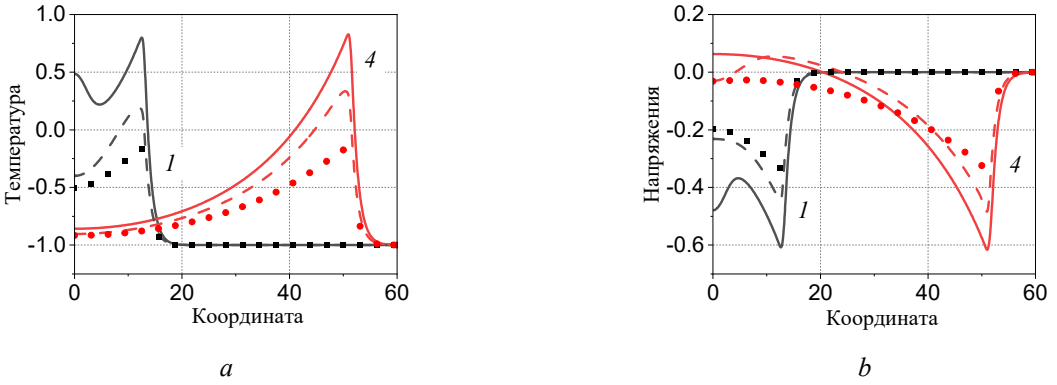


Рис. 5. Распределение температуры (*a*) и напряжений (*b*). Моменты времени те же, что и на рис. 4 для кривых *1* и *4*. Сплошные кривые – несвязанная задача. Подложки нет. Пунктирные линии – несвязанная задача. Синтез на подложке. Символы – связанная задача. Синтез на подожке

Fig. 5. Distribution of temperature (a) and stresses (*b*) time moments are the same as in Fig. 4 for curves *1* and *4*. Solid lines show the noncoupled problem. No substrate. Dotted lines show the noncoupled problem. Synthesis on a substrate. Symbols show the coupled problem. Synthesis on a substrate

В представленном примере принято, что свойства подложки и покрытия одинаковы. В этом случае $\omega = \omega_0$.

Значительные различия имеют место и в напряжениях и деформациях, сопутствующих синтезу. Это показано на примере кривых распределения S_{yy}, соответствующих распределениям температуры для двух моментов времени (рис. 5). Форма кривых напряжений в значительной степени повторяет температурные кривые. На сплошных кривых *1* имеется минимум (максимум), связанный с постепенным допревращением реагентов в продукты в начальной части образца. Подложка приводит к тому, что допревращение происходит значительно медленнее вследствие остывания. Зона прогрева, в отличие от зоны реакции, оказывается достаточно широкой. Даже в квазистационарном режиме наблюдаются изменения всех величин вдали от ушедшего источника тепла и зоны реакции.

Разные стадии процесса обработки подвижным распределенным источником энергии иллюстрируют рис. 6. Каждый набор параметров (соответствующий разным сочетаниям свойств, разным толщинам подложки и разным параметрам источника) можно охарактеризовать максимальной температурой $\theta_{\max}$, достижимой степенью превращения $\eta_{\max}$, максимальными значениями напряжений $S_{\max}$ и деформаций $e_{\max}$, а также временем установления квазистационарного режима (когда искомые величины перестают изменяться с заданной точностью). Так, для $\varepsilon = 0,7$; $g = -0,3$; $\omega_0 = 0,07$ (другие параметры не изменились) $\theta_{\max} \approx 0,007$ (близка к нулю); $\eta_{\max} \approx 0,45$ $|S_{\max}| \approx 0,39$, $e_{\max} \approx 0,48$. С уменьшением толщины подложки все эти величины растут. Например, для $\varepsilon = 0,5$ и $\varepsilon = 0,3$ имеем $\eta_{\max} \approx 0,86$ и $\eta_{\max} \approx 0,99$. Различие между истинным тепловыделением в реакции и эффективным может быть весьма существенным (рис. 6, *e*).

Для практических приложений могут представлять интерес зависимости вида

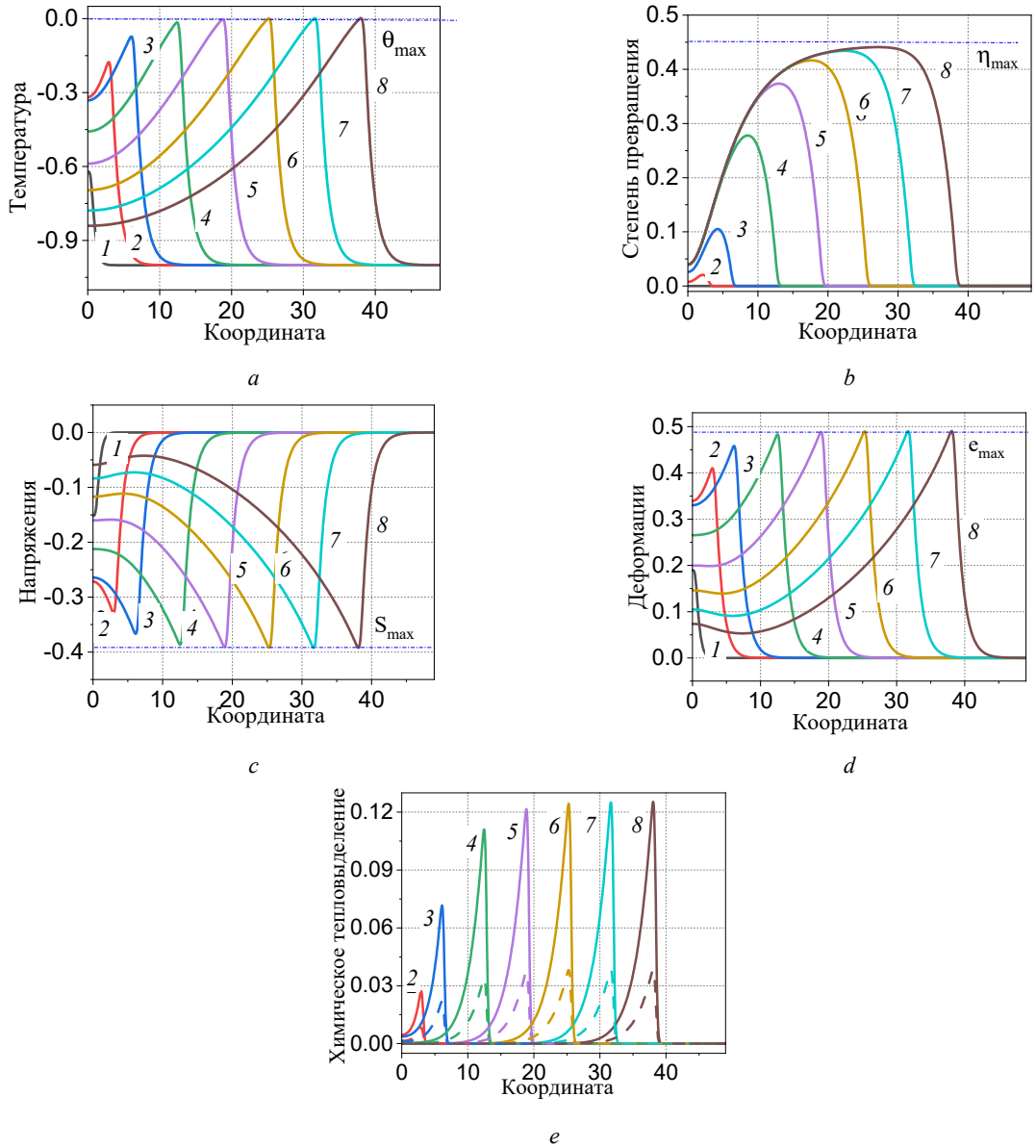
$$X = X\left(\varepsilon, \sigma, \theta_0, g, \omega_0, K_C, K_{\lambda,T}, K_\mu, K_\lambda, K_{\alpha,T}, S, \overline{V}, \delta, Nu, B\right),$$

где

$$X = \theta_{\max}, \eta_{\max}, S_{\max}, e_{\max}.$$

Часть параметров может оказаться несущественной. Но это требует детального параметрического исследования.

Примеры представлены на рис. 7. Уменьшение максимальной температуры, очевидно, связано с затратами тепла на нагрев подложки. Однако, если ее теплопроводность и теплоемкость ниже, чем у покрытия, то эти изменения практически не сказываются на полноте превращения (кривые *3* на рис. 7, *a*, *b*). С высокой теплоемкостью подложки связаны значительные потери тепла дополнительно к потерям тепла конвекцией и излучением. Для разных сочетаний механических свойств покрытия и подложки потери тепла в подложку сказываются различным образом (кривые *1* и *2*). Даже в случае низких теплофизических свойств подложки связанность процессов разной природы может быть причиной значительного снижения температуры. Напряжения и деформации в целом изменяются неоднозначно (рис. 7, *c*, *d*). Локальные экстремумы в $S_{\max}(\varepsilon)$ и $e_{\max}(\varepsilon)$ связаны с преобладанием тех или иных процессов – теплопроводности или реакции, которая для данного примера идет с уменьшением объема.



a *b* *c* *d* *e*

Рис 6. Распределения температуры (*a*), степени превращения (*b*), напряжений (*c*), деформаций (*d*) и химического тепловыделения (*e*) в моменты времени $\tau =$ *1* – 0,5; *2* – 4,0; *3* – 8,0; *4* – 16,0; *5* – 24,0; *6* – 32,0; *7* – 40,0; *8* – 48,0. Сплошные линии на рисунке (*e*) соответствуют истинному химическому тепловыделению, пунктирные – эффективному

Fig 7. Distributions of temperature (*a*), conversion degree (*b*), stresses (*c*), strains (*d*) and chemical heat release (*e*) at the moments of time $\tau =$ *1* – 0,5; *2* – 4,0; *3* – 8,0; *4* – 16,0; *5* – 24,0; *6* – 32,0; *7* – 40,0; *8* – 48,0. The solid lines in Fig. (*e*) correspond to the true chemical heat release, the dashed lines to the effective heat release

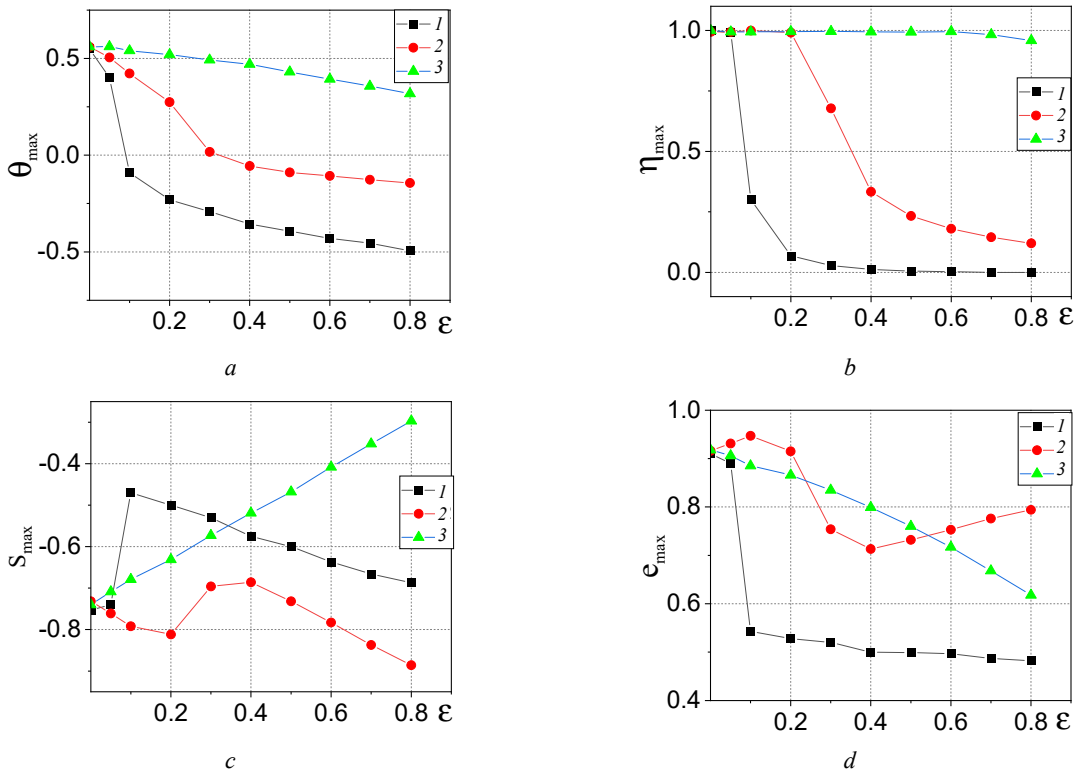


Рис. 7. Характеристики процесса для $\omega_0 = 0{,}1$ и $g = -0{,}3$ в зависимости от относительной толщины подложки: *1* – $K_C = K_{\lambda,T} = K_\mu = K_\lambda = K_{\alpha,T} = 2$; *2* – $K_C = K_{\lambda,T} = 0{,}75$; $K_\mu = K_\lambda = 1{,}5$; $K_{\alpha,T} = 2$; *3* – $K_C = K_{\lambda,T} = 0{,}75$; $K_\mu = K_\lambda = K_{\alpha,T} = 0{,}5$. Остальные параметры представлены в тексте

Fig. 7. Process characteristics for $\omega_0 = 0.1$ и $g = -0.3$ as a function of relative substrate thickness: *1* – $K_C = K_{\lambda,T} = K_\mu = K_\lambda = K_{\alpha,T} = 2$; *2* – $K_C = K_{\lambda,T} = 0.75$; $K_\mu = K_\lambda = 1{,}5$; $K_{\alpha,T} = 2$; *3* – $K_C = K_{\lambda,T} = 0.75$; $K_\mu = K_\lambda = K_{\alpha,T} = 0{,}5$. Other parameters are presented in the text

Заключение

Таким образом, в работе последовательно описан переход от трехмерной модели процесса синтеза покрытия на подложке к одномерной модели, которая учитывает основные физические особенности протекающих при этом физико-химических процессов и полезна для анализа качественных эффектов. Подобный переход может быть осуществлен и для иных ситуаций, например, для условий синтеза слоевых композитов [54], синтеза покрытий на поверхности объектов иной формы [55]. Впервые в подобной модели учитывается связанный характер теплопереноса и деформирования одновременно с учетом различия теплофизических и механических свойств разных материалов – покрытия и подложки. Осуществлен переход к модели в безразмерных переменных, что позволяет «скрыть» параметры, численные значения которых оценить сложно. При этом в модели появляется эффективный коэффициент связанности, величина которого существенно превышает значения, известные из теории термоупругости. Показано, что в одномерном приближении, соответствующем однопроходной наплавке, управляемой подвижным нормально-полосовым источником тепла, процесс выходит на квазистационарный режим. Однако физико-химические процессы в прогретой области продолжаются после прохождения лазерного луча благодаря накопившемуся в материалах теплу. Однозначного вывода о величинах напряжений и деформаций в квазистационарном режиме сделать не удается из-за противоположного влияния разных физических факторов. Продемонстрировано, что учет связанного характера разных процессов существенно влияет на динамику синтеза и параметры квазистационарного режима.

Библиографический список

1. Belka, M. Additive manufacturing and related technologies e The source of chemically active materials in separation science / M. Belka, T. Baczek // Trends in Analytical Chemistry. – 2021. – Vol. 142. – P. 116322. DOI: 10.1016/j.trac.2021.116322

2. Additive manufacturing hybrid processes for composites systems / A.T. Marques, S. Esteves, J.P.T. Pereira, L.M. Oliveira. – Eds. Springer Nature Switzerland. – 2020 – 329 p. DOI: 10.1007/978-3-030-44522-5

3. Bandyopadhyay, A. Additive manufacturing of multi-material structures / A. Bandyopadhyay, B. Heer // Materials Science & Engineering R. – 2018. – Vol. 129. – P. 1–16. DOI: 10.1016/j.mser.2018.04.001

4. Laser powder bed fusion: a state-of-the-art review of the technology, materials, properties & defects, and numerical modeling / S. Chowdhury, N. Yadaiah, Ch. Prakash, S. Ramakrishna, S. Dixit, L.R. Gupta, D. Buddhi // Journal of materials research and technology. – 2022. – Vol. 20. – P. 2109–2172. DOI: 10.1016/j.jmrt.2022.07.121

5. Ladani, L. Review of powder bed fusion additive manufacturing for metals / L. Ladani, M. Sadeghilaridjani // Metals. – 2021. – Vol. 11. – P. 1391. DOI: 10.3390/met11091391

6. Научные подходы к микро-, мезо- и макроструктурному дизайну объемных металлических и полиметаллических материалов с использованием метода электронно-лучевого аддитивного производства / Е.А. Колубаев, В.Е. Рубцов, А.В. Чумаевский, Е.Г. Астафурова // Физ. мезомех. – 2022. – Т. 25, № 4. – С. 5–18

7. In-situ reactive synthesis and characterization of a high entropy alloy coating by laser metal deposition / M. Dada, P. Popoola, N. Mathe, S. Pityana, S. Adeosun // International Journal of Lightweight Materials and Manufacture. – 2022. – No. 5. – P. 11–19. DOI: 10.1016/j.ijlmm.2021.09.002

8. Selective laser melting to manufacture “In Situ” metal matrix composites: a review / S. Dadbakhsh, R. Mertens, L. Hao, J. Van Humbeeck, J.-P. Kruth // Adv. Eng. Mater. – 2019. – Vol. 21. – P. 1801244. DOI: 10.1002/adem.201801244

9. Formation of metal matrix composite reinforced with Nano sized Al_2O_3+Ni–Al intermetallics during coating of Al substrate via combustion synthesis / E.B. Motlagh, H. Nasiri, J.V. Khaki, M.H. Sabzevar // Surface & Coatings Technology. – 2011. – Vol. 205. – P. 5515–5520. DOI: 10.1016/j.surfcoat.2011.06.026

10. Refined microstructure and ultrahigh mechanical strength of (TiN + TiB)/Ti composites in situ synthesized via laser powder bed fusion / B. Li, Ch. Han, P. Viveganantha n, D.R. Kripalani, Yu. Tian, P.J. Da Silva Bartolo, K. Zhou // Additive Manufacturing Letters. – 2022. – Vol. 3. – P. 100082. DOI: 10.1016/j.addlet.2022.100082

11. Hybrid modeling approach for melt-pool prediction in laser powder bed fusion additive manufacturing / T. Moges, Zh. Yang, K. Jones, Sh. Feng, P. Witherell, Ya. Lu // J. Comput. Inf. Sci. Eng. – 2021. – Vol. 21, no. 5. – P. 050902 (13 pages). DOI: 10.1115/1.4050044

12. Hybrid modeling of melt pool geometry in additive manufacturing using neural networks / K. Jones, Z. Yang, H. Yeung, P. Witherell, Y. Lu // Proceedings of the ASME 2021 International Design Engineering Technical Conferences & Computers and Information in Engineering Conference, Vitual, MD, US. – 2011.

13. A review of predictive nonlinear theories for multiscale modeling of heterogeneous materials / K. Matouš, M.G.D. Geers, V.G. Kouznetsova, A. Gillman // Journal of Computational Physics. 2017. – Vol. 330. – P. 192–220. DOI: 10.1016/j.jcp.2016.10.070

14. Yang, M. Phase-field modeling of grain evolutions in additive manufacturing from nucleation, growth, to coarsening / M. Yang, Lu Wang, W. Yan // npj Computational Materials. – 2021. – Vol. 56, no. 7 DOI: 10.1038/s41524-021-00524-6

15. Yang, M. Phase-field modeling of grain evolution in additive manufacturing with addition of reinforcing particles / M. Yang, Lu Wang, W. Yan // Additive Manufacturing. – 2021. – Vol. 47. – P. 102286. DOI: 10.1016/j.addma.2021.102286

16. Simulation of laser additive manufacturing: heat transfer, microstructure evolutions and mechanical properties. Coatings / Zh. Zhang, Yi. Wang, P. Ge, T. Wu // 2022. – Vol. 12. – P. 1277. DOI: 10.3390/coatings12091277

17. Simulations of microstructure coupling with moving molten pool by selective laser melting using a cellular automaton / Xi. Ao, Hu. Xia, Ji. Liu, Qi. He // Materials & Design. – 2020. – Vol. 185. – P. 108230. DOI: 10.1016/j.matdes.2019.108230

18. Process-structure-properties-performance modeling for selective laser melting / T. Pinoma, I. Yashchuk, M. Lindroos, T. Andersson, N. Provatas, A. Laukkanen // Metals 2019. – Vol. 9. – P. 1138. DOI: 10.3390/met9111138

19. Modeling process-structure-property relationships in metal additive manufacturing: a review on physics-driven versus data-driven approaches / N. Kouraytem, Xu. Li, W. Tan, B. Kappes, A.D. Spear // J. Phys. Mater. – 2021. – Vol. 4. – P. 032002. DOI: 10.1088/2515-7639/abca7b

20. Waqar, S. Evolution of residual stress behavior in selective laser melting (SLM) of 316L stainless steel through preheating and in-situ re-scanning techniques / S. Waqar, K. Guo, J. Sun // Optics & Laser Technology. – 2022. – Vol. 149. – P. 107806. DOI: 10.1016/j.optlastec.2021.107806

21. Thermo-mechanical modeling of thermal stress during multi-cycle intense pulsed light sintering of thick conductive wires on 3D printed dark substrate / X. La, M. Lei, Qu. Mu, K. Ren // Results in Physics. – 2023. – Vol. 44. – P. 106192. DOI: 10.1016/j.rinp.2022.106192

22. Modeling temperature and residual stress fields in selective laser melting / Y. Li, K. Zhou, P. Tan, S.B. Tor, Ch.K. Chua, K.F. Leong // International Journal of Mechanical Sciences. – 2018. – Vol. 136. – P. 24–35. DOI: 10.1016/j.ijmecsci.2017.12.001

23. Sun, Z. Multiphase mesoscopic simulation of multiple and functionally gradient materials laser powder bed fusion additive manufacturing processes / Z. Sun, Yu.-H. Chueh, L. Li // Additive Manufacturing. – 2020. – Vol. 35. – P. 101448. DOI: 10.1016/j.addma.2020.101448

24. Numerical modeling of melt-pool behavior in selective laser melting with random powder distribution and experimental validation / Y.C. Wu, C.H. San, C.H. Chang, H.J. Lin, R. Marwan, S. Baba [et al.] // J. Mater. Process. Technol. – 2018. – Vol. 254. – P. 72–78. DOI: 10.1016/j.jmatprotec.2017.11.032

25. Krivilyov, M.D. Phase-field model of interface migration and powder consolidation in additive manufacturing of metals / M.D. Krivilyov, S.Dj. Mesarovic, D.P. Sekulic // J. Mater. Sci. – 2017. – Vol. 52, no. 8. – P. 4155–4163. DOI: 10.1007/s10853-016-0311-z

26. Zinoviev, A.O. Three-dimensional modeling of the microstructure evolution during metal additive manufacturing / A.O. Zinoviev, A. Zinoviev, V. Ploshikhin // Comput. Mater. Sci. – 2018. – Vol. 141. – P. 207–220. DOI: 10.1016/j.commatsci.2017.09.018

27. The effects of solid-state phase transformation upon stress evolution in laser metal powder deposition / J.X. Fang, S.Y. Dong, Y.J. Wang, B.S. Xu, Z.H. Zhang, D. Xia, P. He // Materials and Design. – 2015. – Vol. 87. – P. 807–814. DOI: 10.1016/j.matdes.2015.08.061

28. Numerical simulations of temperature and stress field of Fe-Mn-Si-Cr-Ni shape memory alloy coating synthesized by laser cladding / Qi Zhang, P. Xu, G. Zha, Z. Ouyang, D. He // Optik – International Journal for Light and Electron Optics. – 2012. – Vol. 242. – P. 167079. DOI: 10.1016/j.ijleo.2021.167079

29. Рогачев, А.С. Горение для синтеза материалов / А.С. Рогачев, А.С. Мукасьян. – М.: Физматлит, 2012. – 400 с.

30. Романков, П.Г. Массообменные процессы в химической технологии (системы с твердой фазой) / П.Г. Романков, Н.Б. Рашковская, В.Ф. Фролов. – Л.: Химия, 1975. – 336 с.

31. Карлов, Н.В. Лазерная термохимия. Основы и применения / Н.В. Карлов, Н.А. Кириченко, Б.С. Лукьянчук. – М.: Изд-во ЦентрКом, 1995 – 368 с.

32. Карлов, Н.В. Макроскопическая кинетика термохимических процессов при лазерном нагреве: состояние и

перспективы / Н.В. Карлов, Н.А. Кириченко, Б.С. Лукьянчук // Успехи химии. – 1993. – Т. 62. – С. 223–248.

33. Иванов, О.П. О различных режимах несамостоятельного распространения фронта экзотермической реакции в конденсированной среде / О.П. Иванов, А.Л. Черняков // Квантовая электроника. – 1986. – Т. 13, № 11. – С. 2286–2293.

34. Бухарбаева, А.С. Об устойчивости стационарных режимов гомогенного горения при селективном воздействии лазерного излучения / А.С. Бухарбаева, П.Г. Ицкова, А.Т. Лукьянов // Физ.гор. и взр. – 1987. – № 3. – С. 26–31.

35. Инициирование реакций СВС импульсным излучением лазера / И.И. Короткевич, Г.В. Хильченко, Г.П. Полунина, Л.М. Видавский // Физ.гор. и взр. – 1980. – № 5. – С. 61–67.

36. Быстрова, Т.В. Элементы теории горения в газолазерной резке металлов (ГЛР) / Т.В. Быстрова, В.Б. Либрович, В.И. Лисицын // Физ. гор. и взр. – 1973. – № 5. – С. 725–732.

37. Modelling of the thermal processes that occur during laser sintering of reacting powder compositions / S.E. Zakiev, L.P. Kholpanov, I.V. Shishkovsky, I.P. Parkin, M.V. Kuznetsov, V.G. Morozov // Appl. Phys. A. – 2006. – Vol. 84. – P. 123–129. DOI: 10.1007/s00339-006-3586-0

38. Kryukova, O.N. The coupled model for surface modification of titanium nickelide / O.N. Kryukova, A.G. Knyazeva // Lobachevskii Journal of Mathematics. – 2023. – Vol. 44, no. 6. – P. 2317–2325. DOI: 10.1134/S1995080223060483

39. Knyazeva, A.G. A Coupled model of controlled synthesis, of a composite on a substrate / A.G. Knyazeva, O.N. Kryukova // Lobachevskii Journal of Mathematics. – 2022. – Vol. 43, no. 7. – P. 1878–1893. DOI: 10.1134/S1995080222100183

40. Evstigneev, N.K. Interrelations between heat and mechanical processes during solid phase chemical conversion under loading / N.K. Evstigneev, A.G. Knyazeva // Procedia Computer Science. – 2010. – Vol. 1, iss. 1. – P. 2613–2622. DOI: 10.1016/j.procs.2010.04.295

41. Nandhakumar, R. A process parameters review on selective laser melting-based additive manufacturing of single and multi-material: Microstructure, physical properties, tribological, and surface roughness / R. Nandhakumar, K. Venkatesan // Materials Today Communications. – 2023. – Vol. 35. – P. 105538. DOI: 10.1016/j.mtcomm.2023.105538

42. Investigation of heat source modeling for selective laser melting / H. Wessels, T. Bode, C. Weißenfels, P. Wriggers, T.I. Zohdi // Computational Mechanics. – 2019. – Vol. 63. – P. 949–970. DOI: 10.1007/s00466-018-1631-4

43. Heat source modeling in selective laser melting / E. Mirkoohi, D.E. Seivers, H. Garmestani, S.Y. Liang // Materials. – 2019. – Vol. 12. – P. 2052. – 18 p. DOI: 10.3390/ma12132052

44. On the importance of heat source model determination for numerical modeling of selective laser melting of IN625 / B. Li, J. Du, Yu. Sun, S. Zhang, Q. Zhang // Optics & Laser Technology. – 2023.– Vol. 158, part A. – P. 108806. DOI: 10.1016/j.optlastec.2022.108806

45. Cooka, P.S. Simulation of melt pool behaviour during additive manufacturing: Underlying physics and progress / P.S. Cooka, A.B. Murphy // Additive Manufacturing. – 2020. – Vol. 31. – P. 100909. DOI: 10.1016/j.addma.2019.100909

46. Лазерная и электронно-лучевая обработка материалов: справочник / Н.Н. Рыкалин, А.А. Углов, И.В. Зуев, А.Н. Кокора. – М.: Машиностроение, 1985. – 495 с.

47. Electron beam assisted deposition of Ni-Al coating synthesis on the steel substrate controlled by electron beam heating / A.A. Bakinovskiy, A.G. Knyazeva, M.G. Krinitcyn, O.N. Kryukova, I.L. Pobol, V.V. Fedorov, Ja. Rajczyk // Journal of Self-Propagating High-Temperature Synthesis. – 2019 – Vol. 28, no. 4. – P. 245–255. DOI: 10.3103/S1061386219040034

48. Knyazeva, A. Modeling Ti-Al-C-composite synthesis on a substrate under control of electron beam / A. Knyazeva, O. Kryukova // J. Cryst. Growth. – 2020. – Vol. 531. – P. 125349. DOI: 10.1016/j.jcrysgro.2019.125349

49. Knyazeva, A.G. he synthesis of composites with reinforcing particles on a thin substrate / A.G. Knyazeva, O.N. Kryukova // Mater. Phys.Mech. – 2021. – Vol. 47. – P. 254–265.

50. Князева, А.Г. Влияние условий закрепления образца на скорость его нагрева / А.Г. Князева // Физ. гор. и взр. – 2000. – Т. 36, № 5. – С. 35–44.

51. Knyazeva, A.G. The effect of chemically induced stresses and deformations on the ignition of solid propellants / A.G. Knyazeva, V.E. Zarko // Int J of Energetic Materials Chem Prop. – 2001. – Vol. 4. – P.762–773.

52. Knyazeva, A.G. A coupled model of composite synthesis in combustion regime / A.G. Knyazeva, N.V. Bukrina // Combustion Theory and Modelling. – 2022. – Vol. 26, iss. 1. – P. 152–178. DOI: 10.1080/13647830.2021.1996634

53. Shishkovsky, I.V. 11 – Laser-controlled intermetallics synthesis during surface cladding– in Woodhead Publishing Series in Electronic and Optical Materials, Laser Surface Engineering (J. Lawrence, D.G. Waugh – Eds) / I.V. Shishkovsky // Woodhead Publishing. – 2015. – P. 237–286. DOI: 10.1016/B978-1-78242-074-3.00011-8

54. Knyazeva, A. Modes of adhesive bonding layer formation during roll motion in the process of laminated object creation / A. Knyazeva, N. Travitzky // High Temperature Material Processes: An International Quarterly of High-Technology Plasma Processes. – 2023. – Vol. 27, no 1. – P. 67–96. DOI: 10.1615/HighTempMatProc.2022044916

55. Демидов, В.Н. Расчет термических режимов электронно-лучевой обработки поверхностей деталей, имеющих форму фигур вращения / В.Н.Демидов, А.Г. Князева // Физическая мезомеханика. – 2004. – Vol. 7. – Спецвып., ч. 1. – С. 54–57.

References

1. Belka M., Baczek T. Additive manufacturing and related technologies e The source of chemically active materials in separation science, Trends in Analytical Chemistry,2021, V. 142, 116322 https://doi.org/10.1016/j.trac.2021.116322

2. Additive Manufacturing Hybrid Processes for Composites Systems / Marques A.T., Esteves S., Pereira J.P.T., Oliveira L.M. – Eds., Springer Nature Switzerland, 2020 – 329 p. https://doi.org/10.1007/978-3-030-44522-5

3. Bandyopadhyay A., Heer B. Additive manufacturing of multi-material structures, Materials Science & Engineering R., 2018, V. 129, pp.1–16 https://doi.org/10.1016/j.mser.2018.04.001

4. Chowdhury S., Yadaiah N., Prakash Ch., Ramakrishna S., Dixit S., Gupta L.R., Buddhi D. Laser powder bed fusion: a state-of-the-art review of the technology, materials, properties & defects, and numerical modeling, Journal of materials research and technology, 2022, V. 20, pp. 2109 – 2172 https://doi.org/10.1016/j.jmrt.2022.07.121

5. Ladani L. and Sadeghilaridjani M. Review of Powder Bed Fusion Additive Manufacturing for Metals, Metals, 2021,V. 11, Paper 1391. https://doi.org/10.3390/met11091391

6. Kolubaev, E.A., Rubtsov, V.E., Chumaevsky, A.V. *et al.* Micro-, Meso- and Macrostructural Design of Bulk Metallic and Polymetallic Materials by Wire-Feed Electron-Beam Additive Manufacturing, Phys Mesomech, 2022, V. 25, pp. 479–491. https://doi.org/10.1134/S1029959922060017

7. Dada M., Popoola P., Mathe N., Pityana S., Adeosun S. In-situ reactive synthesis and characterization of a high entropy alloy coating by laser metal deposition, International Journal of Lightweight Materials and Manufacture, 2022, No 5, pp. 11-19. https://doi.org/10.1016/j.ijlmm.2021.09.002

8. Dadbakhsh S., Mertens R., Hao L., Van Humbeeck J., and Kruth J.-P. Selective Laser Melting to Manufacture “In Situ” Metal Matrix Composites: A Review, Adv. Eng. Mater, 2019, V. 21, Paper 1801244. https://doi.org/10.1002/adem.201801244.

9. Motlagh E. B., Nasiri H., Khaki J. V., Sabzevar M.H. Formation of metal matrix composite reinforced with Nano sized Al2O3+Ni–Al intermetallics during coating of Al substrate via combustion synthesis, Surface & Coatings Technology, 2011, V. 205, pp. 5515–5520. doi: 10.1016/j.surfcoat.2011.06.026

10. Li B., Han Ch., Vivegananthan P., Kripalani D.R., Tian Yu., Da Silva Bartolo P. J., Zhou K. Refined microstructure and ultrahigh mechanical strength of (TiN + TiB)/Ti composites in situ synthesized via laser powder bed fusion, Additive Manufacturing Letters, 2022, V. 3, Paper 100082. https://doi.org/10.1016/j.addlet.2022.100082

11. Moges T., Yang Zh., Jones K., Feng Sh., Witherell P., Lu Ya. Hybrid Modeling Approach for Melt-Pool Prediction in Laser Powder Bed Fusion Additive Manufacturing, J. Comput. Inf. Sci. Eng, 2021, V. 21, No 5, Paper 050902 (13 pages) https://doi.org/10.1115/1.4050044

12. Jones K. , Yang Z. , Yeung H. , Witherell P. and Lu Y. Hybrid modeling of melt pool geometry in additive manufacturing using neural networks, Proceedings of the ASME, 2021 International Design Engineering Technical Conferences & Computers and Information in Engineering Conference, Vitual, MD, US, https://tsapps.nist.gov/publication/get_pdf.cfm?pub_id=932570

13. Matouš K., Geers M.G.D., Kouznetsova V.G., Gillman A. A review of predictive nonlinear theories for multiscale modeling of heterogeneous materials, Journal of Computational Physics, 2017, V. 330, pp. 192–220. http://dx.doi.org/10.1016/j.jcp.2016.10.070

14. Yang M., Wang Lu and Yan W. Phase-field modeling of grain evolutions in additive manufacturing from nucleation, growth, to coarsening, npj Computational Materials, 2021, V. 56, No 7, https://doi.org/10.1038/s41524-021-00524-6

15. Yang M., Wang Lu, Yan W. Phase-field modeling of grain evolution in additive manufacturing with addition of reinforcing particles,Additive Manufacturing, 2021, V. 47, Paper 102286. https://doi.org/10.1016/j.addma.2021.102286

16. Zhang Zh., Wang Yi., Ge P. and Wu T. Simulation of Laser Additive Manufacturing: Heat Transfer, Microstructure Evolutions and Mechanical Properties. Coatings, 2022, V. 12, Paper 1277. https://doi.org/10.3390/coatings12091277

17. Ao Xi., Xia Hu., Liu Ji., He Qi. Simulations of microstructure coupling with moving molten pool by selective laser melting using a cellular automaton, Materials & Design, 2020, V. 185, Paper 108230. https://doi.org/10.1016/j.matdes.2019.108230

18. Pinoma T., Yashchuk I., Lindroos M., Andersson T., Provatas N. and Laukkanen A. Process-Structure-Properties-Performance Modeling for Selective Laser Melting, Metals 2019, V. 9, Paper. 1138. doi:10.3390/met9111138

19. Kouraytem N., Li Xu., Tan W., Kappes B., Spear A. D. Modeling process-structure-property relationships in metal additive manufacturing: a review on physics-driven versus data-driven approaches,J. Phys. Mater, 2021, V. 4, Paper 032002. https://doi.org/10.1088/2515-7639/abca7b

20. Waqar S., Guo K., Sun J. Evolution of residual stress behavior in selective laser melting (SLM) of 316L stainless steel through preheating and in-situ re-scanning techniques, Optics & Laser Technology, 2022, V. 149, Paper 107806 https://doi.org/10.1016/j.optlastec.2021.107806

21. La X., Lei M., Mu Qu., Ren K. Thermo-mechanical modeling of thermal stress during multi-cycle intense pulsed light sintering of thick conductive wires on 3D printed dark substrate, Results in Physics, 2023, V. 44, Paper 106192. https://doi.org/10.1016/j.rinp.2022.106192

22. Li Y., Zhou K., Tan P., Tor S.B., Chua Ch. K., Leong K. F. Modeling temperature and residual stress fields in selective laser melting, International Journal of Mechanical Sciences, 2018,V. 136, Pp. 24–35 https://doi.org/10.1016/j.ijmecsci.2017.12.001

23. Sun Z., Chueh Yu.-H., Li L. Multiphase mesoscopic simulation of multiple and functionally gradient materials laser powder bed fusion additive manufacturing processes, Additive Manufacturing, 2020, V. 35, Paper 101448. https://doi.org/10.1016/j.addma.2020.101448

24. Wu Y.C., San C.H., Chang C.H., Lin H.J., Marwan R., Baba S., et al., Numerical modeling of melt-pool behavior in selective laser melting with random powder distribution and experimental validation, J. Mater. Process. Technol, 2018, V. 254, pp. 72–78. https://doi.org/10.1016/j.jmatprotec.2017.11.032

25. Krivilyov M.D., Mesarovic S.Dj., Sekulic D.P. Phase-field model of interface migration and powder consolidation in additive manufacturing of metals, J. Mater. Sci., 2017, Vol. 52, No. 8, pp. 4155-4163. https://doi.org/10.1007/s10853-016-0311-z

26. Zinoviev A.O., Zinoviev A., Ploshikhin V. Three-dimensional modeling of the microstructure evolution during metal additive manufacturing, Comput. Mater. Sci., 2018, V. 141, Pp. 207–220. https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2017.09.018

27. Fang J.X., Dong S.Y., Wang Y.J., Xu B.S., Zhang Z.H., Xia D., He P. The effects of solid-state phase transformation upon stress evolution in laser metal powder deposition, Materials and Design, 2015, V. 87, pp. 807–814. http://dx.doi.org/10.1016/j.matdes.2015.08.061

28. Zhang Qi, Xu P., Zha G., Ouyang Z., He D. Numerical simulations of temperature and stress field of Fe-Mn-Si-Cr-Ni shape memory alloy coating synthesized by laser cladding, Optik – International Journal for Light and Electron Optics, 2012, V. 242, Paper 167079 https://doi.org/10.1016/j.ijleo.2021.167079

29. Rogachev A.S., Mukasyan A.S. Gorenie dlya synteza materialov [Combustion for materials synthesis], M.: Fizmatlit. – 2012. – 400 p.

30. Romankov P.G., Rashkovskaya N.B., Frolov V.F. Massoobmennye process v khimicheskoi technologii (sistemy s tverdoi fazoi) [Mass transfer processes in chemical technology (systems with solid phase)], L.: Khimiya, 1975. – 336 p.

31. Karlov N.V., Kirichenko N.A., Lukiyanchuk B.S. Lasernaya termochimiya. Osnovy I primenenie [Laser thermochemistry. Basics and Applications] CentrCom, 1995. – 368 p. https://www.rfbr.ru/rffi/ru/books/o_63168;

32. Karlov N.V., Kirichenko N.A., Lukiyanchuk B.S. Makroskopicheskaya kinetika termokhimicheskih processov pri lasernom nagreve: sostoyanie I perspektivy [Macroscopic kinetics of thermochemical processes during laser heating: status and prospects], Uspekhi khimii, 1993, V. 62. pp. 223-248.

33. Ivanov O.P., Chernyakov A.L. O razlichnikh rezhimakh nesamostoyatelnogo rasprostraneniya fronta eksotermicheskoi reakcii v kondensirovannoi srede [On various modes of non-self-

propagation of the front of an exothermic reaction in a condensed medium], Kvantovaya electronica, 1986, V.13, № 11, pp.2286-2293.

34. Bukharbaeva, A.S., Itskova, P.G. & Luk'yanov, A.T. Stability of steady conditions of homogeneous combustion with selective laser treatment. Combust Explos Shock Waves, 1988, V. 24, pp. 285–290. https://doi.org/10.1007/BF00750606

35. Korotkevich, I.I., Khil'chenko, G.V., Polunina, G.P. *et al.* Initiation of self-propagating high-temperature synthesis reactions by pulsed laser radiation, Combust Explos Shock Waves, 1981, V. 17, pp. 535–540. https://doi.org/10.1007/BF00798141

36. Bystrova, T.V., Librovich, V.B. & Lisitsyn, V.I. Elements of combustion theory for the gas-laser cutting of metals. Combust Explos Shock Waves, 1973, V. **9**, pp. 635–641. https://doi.org/10.1007/BF00742893

37. Zakiev S.E., Kholpanov L.P., Shishkovsky I.V., Parkin I.P., Kuznetsov M.V., Morozov V.G. Modelling of the thermal processes that occur during laser sintering of reacting powder compositions, Appl. Phys. A., 2006, V.84, pp.123–129. DOI: 10.1007/s00339-006-3586-0

38. Kryukova O. N. and Knyazeva A. G. The coupled model for surface modification of titanium nickelide, Lobachevskii Journal of Mathematics, 2023, V. 44, No. 6, pp. 2317–2325 DOI: 10.1134/S1995080223060483

39. Knyazeva A. G. and Kryukova O. N. A Coupled model of controlled synthesis, of a composite on a substrate, Lobachevskii Journal of Mathematics, 2022., V. 43., No. 7., pp. 1878–1893. DOI: 10.1134/S1995080222100183 ;

40. Evstigneev N.K., Knyazeva A.G. Interrelations between heat and mechanical processes during solid phase chemical conversion under loading, Procedia Computer Science., 2010., V. 1., Iss. 1., pp. 2613–2622. https://doi.org/10.1016/j.procs.2010.04.295

41. Nandhakumar R., Venkatesan K. A process parameters review on selective laser melting-based additive manufacturing of single and multi-material: Microstructure, physical properties, tribological, and surface roughness, Materials Today Communications, 2023.,V. 35, Paper 105538. https://doi.org/10.1016/j.mtcomm.2023.105538

42. Wessels H., Bode T., Weißenfels C., Wriggers P., Zohdi T. I. Investigation of heat source modeling for selective laser melting, Computational mechanics, 2019, V. 63, pp. 949–970. https://doi.org/10.1007/s00466-018-1631-4

43. Mirkoohi E., Seivers D.E., Garmestani H. and Liang S.Y. Heat Source Modeling in Selective Laser Melting, Materials, 2019, V. 12, Paper. 2052. https://doi.org/10.3390/ma12132052

44. Li B., Du J., Sun Yu., Zhang S., Zhang Q. On the importance of heat source model determination for numerical modeling of selective laser melting of IN625, Optics & Laser Technology, 2023,V. 158, Part A., Paper 108806. https://doi.org/10.1016/j.optlastec.2022.108806

45. Cooka P.S., Murphy A.B. Simulation of melt pool behaviour during additive manufacturing: Underlying physics and progress, Additive Manufacturing, 2020, V. 31, Paper 100909. https://doi.org/10.1016/j.addma.2019.100909

46. Rykalon N.N., Uglov A.A., Zuev I.V., Kokora A.N. Lasernaya I elektronno-lechevaya orabotka materilov. Spravochnik [Laser and electron beam processing of materials. Directory], M.: Mashinostroenie, 1985, 495 p.

47. Bakinovskiy A.A., Knyazeva A.G., Krinitcyn M.G., Kryukova O.N., Pobol I.L., Fedorov V.V., Rajczyk Ja. Electron Beam Assisted Deposition of Ni-Al coating synthesis on the steel substrate controlled by electron beam heating, Journal of Self-Propagating High-Temperature Synthesis, 2019, V. 28, No. 4, Pp. 245–255. https://doi.org/10.3103/S1061386219040034

48. Knyazeva A. and Kryukova O. Modeling Ti-Al-C-composite synthesis on a substrate under control of electron beam, J. Cryst. Growth., 2020., V. 531., Paper 125349. https://doi.org/10.1016/j.jcrysgro.2019.125349

49. Knyazeva A. G. and Kryukova O. N. The synthesis of composites with reinforcing particles on a thin substrate, Mater. Phys. Mech., 2021, V. 47, pp. 254–265. DOI: 10.18149/MPM.4722021_8

50. Knyazeva, A.G. Effect of fixing conditions on the heating rate of a specimen, Combust Explos Shock Waves**,** 2000, V. 36, Pp. 582–590. https://doi.org/10.1007/BF02699521

51. Knyazeva A.G., Zarko V.E. The effect of chemically induced stresses and deformations on the ignition of solid propellants, Int J of Energetic Materials Chem Prop.,2001., V. 4, pp.762-773.

52. Knyazeva A.G., Bukrina N.V. A coupled model of composite synthesis in combustion regime, Combustion Theory and Modelling, 2022, V. 26, Issue 1, pp. 152-178. https://doi.org/10.1080/13647830.2021.1996634

53. Shishkovsky I.V. 11 – Laser-controlled intermetallics synthesis during surface cladding– in Woodhead Publishing Series in Electronic and Optical Materials, Laser Surface Engineering (J. Lawrence, D.G. Waugh – Eds) / Woodhead Publishing, 2015, pp. 237-286. https://doi.org/10.1016/B978-1-78242-074-3.00011-8

54. Knyazeva A., Travitzky N. Modes of adhesive bonding layer formation during roll motion in the process of laminated object creation, High Temperature Material Processes: An International Quarterly of High-Technology Plasma Processes, 2023, V. 27, No 1, P.67-96. DOI: DOI: 10.1615/HighTempMatProc.2022044916.

55. Demidov V.N., Knyazeva A.G. Calculation of thermal modes of surface electron-beam treatment for parts with the shape of rotation figures (in Russian), Fizicheskaya mesomekhanika, 2004. V.7, Special issue, Part 1, pp. 54-57.

Финансирование. Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда No 22-11-00100 (https://rscf.ru/project/22-11-00100/).

Конфликт интересов. Автор заявляет об отсутствии конфликта интересов.

Вклад автора 100 %.

Financing. The study was supported by a grant from the Russian Science Foundation No. 22-11-00100 (https://rscf.ru/project/22-11-00100/).

Conflict of interest. The author declare no conflict of interest.

The contribution of the author is 100 %.