

ИССЛЕДОВАНИЕ ФИЗИЧЕСКИХ ОСНОВ ТЕХНОЛОГИИ 3D-ПЕЧАТИ. МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ*

С.Ю. Коростелев, Е.Е. Слядников, И.Ю. Турчановский

Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, г. Томск, Россия

Методом молекулярной динамики исследован неравновесный фазовый переход плавления наносистем, инициированный объемным тепловым источником. Показано, что при критическом уровне плотности мощности теплового источника процесс фазового перехода плавления осуществляется в неравновесных условиях значительного локального перегрева и может сопровождаться образованием локально неустойчивого состояния микрокристалла и сложной динамикой: зарождением фронтов фазового превращения как на поверхности, так и в глубине объема микрокристалла. Проведено изучение кристаллизации полученных при моделировании плавления наносистем, охлаждение которых осуществлялось имитацией касания холодной поверхности. Проведенное исследование дает понимание физических процессов, протекающих в наносистемах при плавлении и кристаллизации, что позволяет сформулировать требования к параметрам теплового источника в зависимости от толщины наращиваемого слоя образца при 3D-печати.

Ключевые слова: метод молекулярной динамики, объемный тепловой источник, фазовый переход плавления и кристаллизации, параметр порядка, кинетическая температура.

Введение

Для получения металлических изделий сложной формы, гетерогенного композитного строения и сложного фазового состава широко применяют аддитивные технологии (или технологии 3D-печати) [1, 2]. Наряду с развитием аддитивных технологий, использующих полимерные компоненты, развиваются электронно-пучковые технологии синтеза металлических систем: наплавки проволокой [3], сплавления порошков [4], плавления систем «пленка/подложка» [5, 6]. Одной из проблем аддитивных технологий является структурная неоднородность межслоевых областей, которая связана с тем, что изначально формируемая металлическая система состоит из малоразмерных объектов (наночастица, нанопроволока, нанослой). Поэтому для исследования физических основ аддитивной технологии формирования изделий актуально изучение процессов неравновесного плавления наночастиц при воздействии мощного теплового источника и последующей их кристаллизации.

Для описания неравновесного плавления в работе [7] использован метод фазового поля и сформулированы кинетические уравнения, описывающие плавление, а конечная ширина межфазной границы органично включена в рассмотрение. В [8] представлены математические результаты, которые значительно повышают вычислительную эффективность метода фазового поля для моделирования перехода первого рода в металле. Относительно недавно разработана теоретическая модель, описывающая динамику плавления и течения расплава в чистом металлическом порошке, нагреваемом движущимся лазерным лучом [9]. В работе [10] обсуждаются теоретические модели и результаты прямого лазерного наноструктурирования поверхности твердых тел. С учетом кинетики фазовых превращений на основе уравнения Колмогорова проведено моделирование процессов плавления кремния при воздействии на его поверхность наносекундного лазерного излучения [11]. Для понимания процесса неравновесного плавления предложены различные механические и термодинамические теории [12], которые не могут объяснить все экспериментально наблюдаемые особенности быстрого плавления наносекундными импульсами энергии: большой перегрев выше температуры плавления, постоянство температуры плавления, высокую скорость плавления.

В перечисленных работах неявно предполагается, что плавление происходит в условиях, близких к равновесным, и начинается со свободной поверхности образца. Это имеет место при малой скорости нагрева и поверхностном характере теплового источника, когда температура медленно и успевает выравниваться. Структура системы также успевает релаксировать в равновесное состояние по механизму классического гомогенного плавления. В этом случае фазо-

* Исследования выполнены в рамках государственного задания ИФПМ СО РАН, тема номер FWRW-2021-0002.

Уважаемые читатели!

Доступ к полнотекстовой версии журнала
«Известия высших учебных заведений. Физика»
осуществляется на платформе
Научной электронной библиотеки eLIBRARY.RU
на платной основе:

<https://elibrary.ru/contents.asp?titleid=7725>