На правах рукописи

Анкудинов Владимир Евгеньевич

ТЕПЛОПЕРЕНОС И ФОРМИРОВАНИЕ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ МИКРОСТРУКТУРЫ В МЕТАЛЛИЧЕСКИХ ПОРОШКАХ НА ОСНОВЕ Fe И AI ПРИ СЕЛЕКТИВНОМ ЛАЗЕРНОМ ПЛАВЛЕНИИ

Специальность 01.04.07 — «Физика конденсированного состояния»

Автореферат диссертации на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук Работа выполнена в Федеральном государственном бюджетном образовательном учреждении высшего образования «Удмуртский государственный университет».

Научный руководитель:	Кривилев Михаил Дмитриевич, кандидат физико-математических наук, доцент			
Официальные оппоненты:	Александров Дмитрий Валерьевич, доктор физико-математических наук, ФГАОУ ВПО «Уральский федеральный уни- верситет имени первого Президента России Б.Н.Ельцина», профессор кафедры теоретической и математиче- ской физики			
	Волков Василий Анатольевич, кандидат технических наук, ФГБУН «Физико-технический институт УрО РАН», зав. лабораторией «Физика неравновесных метал- лических систем»			
Ведущая организация:	ФГБУН «Институт теплофизики Уральского отделения Российской Академии Наук»			

Защита состоится «22» сентября 2017 г. в 14 часов 30 минут на заседании диссертационного совета Д 004.025.01 при Физико-техническом институте УрО РАН по адресу: 426000, г. Ижевск, ул. Кирова, 132, тел.: +7 (3412) 43-03-02, факс: +7 (3412) 72-25-29.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке и на сайте Физикотехнического института УрО РАН http://ftiudm.ru (раздел «электронная библиотека»).

Отзывы на автореферат в двух экземплярах, заверенные печатью учреждения, просьба направлять по адресу диссертационного совета, ученому секретарю.

Автореферат разослан «___» 2017 г.

Ученый секретарь диссертационного совета Д 004.025.01, д-р физ.-мат. наук

to

Добышева Людмила Викторовна

Общая характеристика работы

Актуальность темы. Материалы на основе пористых, физически неоднородных сред используются во многих областях современной промышленности. К этому широкому классу материалов относятся металлические порошки, многослойные пленки, металлические и керамические пористые среды, фильтры, мембраны, композиты на основе керамики [1]. Суть процесса селективного лазерного плавления (СЛП) заключается в нагреве порошкового слоя с помощью лазерного излучения высокой мощности выше температуры плавления с формированием сплавленного слоя высокой плотности [2; 3]. Композитные материалы на основе таких сплавленных металлических порошков, обработанных лазером, имеют уникальные эксплуатационные свойства, а полученные детали могут принимать сложные формы, в том числе иметь внутренние полости. На поверхности и в объеме таких материалов возникают сложные структурные состояния, меняются удельная площадь поверхности и плотность порошка, в зависимости от режимов обработки лазером может меняться прочность сцепления оплавленного порошкового слоя с подложкой [4-6]. В качестве материала при изготовлении изделий методами СЛП используются порошки на основе сплавов железа и алюминия [2; 3], а высокодисперсные порошки могут иметь перспективное применение в контексте получения неравновесных материалов [7]. Преимуществом технологии является возможность изменять параметры лазерного излучения в широком диапазоне значений мощности, частоты импульсов, скважности, скоростей движения луча.

Анализ тепловых режимов и подбор оптимальных параметров обработки порошкового слоя на подложке являются актуальной задачей, которую можно эффективно решить с помощью расчета тепловых полей в неоднородных средах. При этом остро стоит проблема определения параметров моделирования, в том числе как функций от режимов обработки [4; 8]. Зависимости теплофизических переменных от температуры могут использоваться в качестве функций состояния для сложных высокоуровневых моделей при моделировании пористых систем в различных процессах, в том числе при обработке лазерным лучом [4; 9]. Рассчитанные данные о динамике теплового состояния, температурных градиентах для отдельных слоев и подложки позволяют контролировать появление микротрещин в объеме образца, его результирующую пористость, качество и устойчивость к механическим напряжениям, структурно-фазовые характеристики [4-6; 10]. В результате воздействия таких неравновесных факторов, как высокие градиенты температур, высокие скорости охлаждения, могут формироваться фазы с повышенными прочностными, электрохимическими характеристиками, отличными от полученных традиционными методами обработки [7; 11]. Несмотря на большое количество исследований СЛП металлических порошков, создание моделей и исследование режимов обработки, а также получаемых структурных состояний материала, особенно при обработке импульсными лазерами, по прежнему является актуальной задачей.

Исследуемые в настоящей работе методы термической обработки отличны от традиционных в том, что среднее время протекания теплофизических процессов в них мало по сравнению с характеристическими временами установления диффузионных тепловых и массовых потоков в объемных заготовках [12]. Технология обработки порошковых материалов при высокоинтенсивном облучении поверхности лазером позволяет создать условия для неравновесности процессов переноса. Расчеты и исследования в данной работе проводятся в контексте современных технологий СЛП с использованием высокодисперсных порошков (Fe, Al-Si, нержавеющей стали), которые обрабатываются импульсным лазером с высокой плотностью мощности излучения.

Целью работы является теоретическое исследование процессов нестационарного теплопереноса и формирования кристаллической микроструктуры при обработке металлических порошков на основе Fe и Al в процессах селективного лазерного плавления в условиях высоких температурных градиентов и скоростей охлаждения.

Для достижения цели поставлены следующие задачи:

- Исследовать теплоперенос в порошковых средах на масштабе нескольких частиц порошка. Вычислить эффективные теплофизические характеристики как функции пористости и морфологии пористой среды для Fe, Al-Si, Ta, нержавеющей стали.
- 2. Оценить характеристические масштабы, обосновать допущения при построении физико-математической модели сплавления и усадки порошка в приближении сплошной среды. Исследовать динамику тепловых полей в порошковой среде под воздействием импульсного лазерного излучения. Оценить температурные градиенты и скорости кристаллизации для систем Fe, нержавеющая сталь, Al-Si.
- В формализме кристаллического фазового поля (КФП) разработать модель для описания структурных фазовых переходов из расплава в стабильное кристаллическое состояние в терминах движущей силы (переохлаждения) и атомной плотности.
- Исследовать кристаллические фазовые превращения «жидкость феррит (ОЦК) – аустенит (ГЦК)», «аустенит – феррит» на атомном уровне методом КФП. Построить структурные диаграммы «расплав – ГЦК – ОЦК» в зависимости от параметров «движущая сила – атомная плотность» для железа.
- 5. Установить взаимосвязь кристаллической микроструктуры, формирующейся при высоких температурных градиентах и переохлаждении, с динамикой тепловых полей, движением границы зоны оплавления под воздействием теплового источника (импульсного лазера) в процессах СЛП.

Научная новизна:

1. Впервые разработана модель осредненного описания эффективных теплофизических характеристик порошков для аддитивных процессов;

сделаны расчеты конкретных физических систем (Fe, нержавеющая сталь, Al-Si, Ta в среде воздуха, аргона, в вакууме), используемых в аддитивных технологиях; построены зависимости эффективных коэффициентов теплопроводности от пористости и дисперсности в масштабе представительного объема для высокодисперсных порошков.

- Впервые рассчитаны динамические тепловые поля для процесса селективного лазерного плавления при обработке импульсным лазером с коротким временем импульса с помощью модели в приближении сплошной среды для высокодисперсного порошка Fe, нержавеющей стали, Al-Si.
- 3. Впервые построены диаграммы кристаллических структурных состояний металла в широком диапазоне переохлаждений (скоростей охлаждения), описывающие фазовые переходы из метастабильного состояния в кристаллическое (или расплав) при быстром охлаждении в зоне оплавления при импульсной лазерной обработке.

Научная и практическая значимость. Полученные в работе результаты уточняют представления о физической природе явлений, происходящих при сплавлении металлических порошков в процессах аддитивных технологий, в частности при обработке импульсным лазером высокой плотности мощности. Сделана попытка объединить теоретическую модель структурных фазовых превращений на микроскопическом уровне с результатами расчетов тепловых полей на макроскопическом уровне в приближении сплошной среды. Результаты применимы в современной высокотехнологичной индустрии и технологии изготовления деталей методом металлической 3D-печати.

Основные положения, выносимые на защиту:

- Амплитудное расширение модели кристаллического фазового поля (КФП) для описания изменения атомной плотности и фазовых переходов в кристаллической структуре в зависимости от движущей силы (переохлаждения).
- 2. Размерные структурные диаграммы и способ их построения для Fe, безразмерные структурные диаграммы для модельных кристаллических систем ОЦК, ГЦК и расплава.
- Метод расчета и зависимости эффективного коэффициента теплопроводности от пористости, дисперсности для частично консолидированных металлических порошков, используемых в аддитивных технологиях: Fe, нержавеющей стали, Al-Si, Ta в атмосфере воздуха, аргона и в вакууме.
- 4. Физико-математическая модель сплавления металлических порошков в приближении сплошной среды с фазовыми переходами (включающая допущения, основные уравнения, краевую задачу) для моделирования процессов СЛП импульсным лазером.
- 5. Температурные градиенты и скорости движения фронта кристаллизации, рассчитанные для характерных значений управляющих парамет-

ров лазерной обработки с помощью модели плавления и усадки порошка для систем Fe, нержавеющей стали, Al-Si.

Достоверность полученных результатов обеспечивается сравнением результатов расчетов с экспериментальными данными, а также с расчетными данными других научных групп. Подходы, используемые в работе, широко применимы, неоднократно обсуждались на конференциях и симпозиумах с ведущими специалистами и не противоречат современным общепринятым. Выводы, сделанные в диссертации, логически следуют из результатов расчетов, их анализа и сравнения с экспериментальными данными и не противоречат современным научным представлениям.

Личный вклад. Диссертация автора является самостоятельной работой, обобщающей результаты, полученные лично автором, а также в соавторстве. Автор диссертации принимал личное участие в постановке граничных условий, программировании численной модели и генерационной модели конгломератов частиц порошка, расчетах, решении и программировании обратной задачи, подборе констант, анализе допущений. Автором совместно с научным руководителем и коллективом проведен качественный анализ и обсуждение допущений для модели обработки порошка в приближении сплошной среды. Модель реализована в COMSOL Multiphysics Гордеевым Г.А., постановка задачи по расчету градиентов, сами расчеты, анализ и аппроксимация решений выполнены автором. Формулировка модели кристаллического фазового поля выполнена совместно с Галенко П.К. Автором выполнено амплитудное разложение уравнений для кристаллических структур, записаны уравнения в двухмодовом виде, записан вид функционалов, а также разработан метод и программы для построения структурных диаграмм, выполнено построение диаграмм. Анализ, обобщение данных по расчетам, выводы по работе сделаны автором. Цели и задачи исследований по диссертационной работе сформулированы совместно с научным руководителем — Кривилевым М. Д. Обсуждение результатов для опубликования в печати проводилось совместно с соавторами.

Работа и научные публикации выполнены при поддержке следующих грантов, проектов и программ: грант РФФИ «Разработка технологии лазерного высокоинтенсивного спекания нанопорошков железа в никелевой оболочке для получения наноструктурных поверхностных слоев систем железо-никель», РФ-ФИ 09-02-12110-офи_м, рук. д.ф.-м.н., проф. Галенко П. К., 2009–2010 гг.; госзадание «Разработка теоретических и феноменологических основ управления синтезом наноструктурных, градиентных, сверхтвердых функциональных покрытий», рук. к.т.н., доц. Харанжевский Е. В. (ныне д.т.н.), 2012–2014 гг.; тематический план научных исследований в рамках государственного задания «Разработка теоретических и феноменологических основ крытий», рук. к.т.н., доц. Харанжевский Е. В. (ныне д.т.н.), 2012–2014 гг.; тематический план научных исследований в рамках государственного задания «Разработка теоретических и феноменологических основ получения новых функциональных нанокомпозиционных материалов, включая наноразмерные кластеры и комплексонаты, с применением методов высокоэнергетических воздействий», проект №2049, рук. д.х.н., проф. Решетников С. М., 2014–2016 гг.; грант РФФИ «Механизмы формирования новых материалов, структурно-фазовых состояний и градиентных структур в процессах аддитивных технологий», РФФИ 14-29-10282 офи_м, рук. д.ф.-м.н., профессор Галенко П. К., 2014–2016 гг. В проектах «Мой Первый Грант» РФФИ 16-38-00839 мол_а, 2015–2017 гг.; №0020468 IX Республиканского конкурса инновационных проектов по программе «УМНИК-15», 2015–2017 гг.; Erasmus Mundus Triple I, Бельгия, Левен, Левенский Католический университет, 2010 г. соискатель являлся руководителем.

Автор выражает **благодарность** К. Элдеру, профессору Окландского Университета (Рочестер, Мичиган, США) за постоянные и полезные дискуссии по теме настоящей работы, д.ф.-м.н. Саламатову Е. И., главному научному сотруднику отдела теоретической физики Физико-технического института УрО РАН за важные обсуждения и обмен литературными источниками по теме настоящей работы, Кропотину Н. В., сотруднику АО НПО «МКМ», за необходимые обсуждения, обмен мнениями и литературными источниками по теме настоящей работы, Харанжевскому Е. В., сотруднику УдГУ, за постоянную поддержку и важные обсуждения процессов, происходящих во время лазерной обработки металлических порошков, Гордееву Г. А., сотруднику УдГУ, коллеге, за помощь в обсуждениях, совместные публикации и плодотворную работу, Галенко П. К., сотруднику УдГУ и университета Йены (Германия), за помощь и консультации во время написания главы, посвященной КФП.

Апробация работы. Основные результаты работы докладывались и обсуждались на следующих российских и зарубежных конференциях: Структурно-фазовые превращения в материалах: теория, компьютерное моделирование, эксперимент (Екатеринбург, УрФУ, 2017); International Conference of Interphase Boundaries IIB (Москва, МИСиС, 2016); The International Seminar in Interdisciplinary Problems in Additive Technologies (Томск, ТПУ, 2016); FEMS Junior Euromat (Швейцария, EPFL, 2016); «Кристаллизация: компьютерные модели, эксперимент, технологии» (Ижевск, УдГУ, 2016); XXIII Всероссийская школа-конференция молодых ученых и студентов (Пермь, ПНИПУ, 2014); International Conference on Advances in Solidification Processes ICASP-3 (Германия, Rolduc Abbey, 2011).

Публикации. Основные результаты по теме диссертации изложены в 27 печатных изданиях, 6 из которых изданы в журналах, рекомендуемых ВАК, включая 3 иностранные статьи в изданиях, входящих в реферативную базу Scopus; 7 – в трудах конференций и прочих изданиях; 14 – в тезисах докладов; в соавторстве получен 1 патент на изобретение РФ (№2514233), зарегистрирована 1 программа для ЭВМ (№2016663611).

Объем и структура работы. Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения и приложений. Полный объем диссертации 157 страниц текста с 56 рисунками и 11 таблицами. Список литературы содержит 196 наименований.

Содержание работы

Во **введении** обсуждается актуальность исследований, проводимых в рамках данной диссертационной работы, цели и задачи, научная новизна, защищаемые положения.

В первой главе дан обзор литературы по основным темам, связанным с исследованием. Обсуждаются процессы селективного лазерного плавления (СЛП), спекания, применяемые подходы к моделированию таких систем и процессов, экспериментальные работы. Рассматриваются существующие схемы и физические допущения известных моделей, обсуждается набор управляющих параметров обработки. Дан обзор моделей и механизмов теплопереноса в пористых средах с комплексной геометрией, вводится классификация пористых тел и обсуждается выбор представительного объема. Показано, что учет фазовых переходов в пористых телах в приближении сплошной среды может быть сделан при помощи известной в литературе модели двухфазной зоны, ее обзор также приведен в работе. Сделан обзор метода КФП для систем с высокими движущими силами, обсуждено текущее состояние развития этого современного метода. На основании анализа литературы показано, что теоретическое исследование процессов теплопереноса и структурообразования при лазерном плавлении металлических порошков является актуальной научной задачей, важной для развития аддитивных технологий. В данной главе также рассматривается многомасштабный подход к моделированию СЛП с помощью трех моделей на разных масштабных уровнях (рис. 1). Данные о зависимости эффективного коэффициента k_{eff} теплопроводности от пористости ε , полученные из модели насыпки частиц, используются при расчетах скоростей V_{крист} кристаллизации и градиентов G температур в модели в приближении сплошной среды. Скорости кристаллизации с помощью кинетической модели нормального роста пересчитываются в движущие силы ΔB_0 (или переохлаждение ω), позволяющие с помощью модели КФП определить кристаллическую микроструктуру, формирующуюся в объеме при затвердевании расплавленного лазером порошка.

Вторая глава посвящена исследованию эффективного теплопереноса в пористых телах. В ходе работы реализована математическая модель теплопереноса в металлических порошковых средах, которая позволяет рассчитывать динамику распространения тепла в металлическом порошке, находящемся в инертной атмосфере либо в вакууме. При этом существует возможность варыировать в модели фракционный состав частиц, их размеры и плотность насыпки, воспроизводя тем самым порошок насыпной плотности, либо состояние частично сплавленной порошковой металлической среды. С помощью данной модели были получены нестационарные тепловые профили в объеме пористой порошковой среды, на основе которых в дальнейшем решалась обратная задача теплопроводности. Были вычислены эффективные коэффициенты теплопроводности для систем с различной пористостью, дисперсностью и составом газа, а именно для карбонильного Fe, стального (03X17H14M2, AISI 316L), Al-



Рис. 1 — Схема построенной физико-математической модели СЛП и передачи параметров между различными масштабными уровнями.

Si (Al-12Si), Та порошка в воздухе, аргоне и в условиях низкого вакуума. На основе этих расчетов предложена аппроксимирующая гладкая функция, учитывающая влияние теплоемкости и теплопроводности атмосферы и позволяющая вычислять эффективный коэффициент теплопроводности k_{eff} частично сплавленного порошка в зависимости от ε . Данная функция $k_{eff}(\varepsilon)$ использована при расчетах в модели в приближении сплошной среды.

Уравнения, используемые в нашей работе, сформулированы на основе общеизвестных теорий и положений [1; 9; 13]. Для построения модели смешанной двухсредной системы «газ (атмосфера) – металл» использованы нестационарные уравнения теплопроводности, которые решались методом конечных элементов в пакете COMSOL Multiphysics. Структурные элементы металлической и газовой фаз генерировались случайным образом «выкладкой» сферических частиц с различным диаметром в матрицу плотной упаковки, учитывающую при этом контакт (пересечение) частиц. Заполнение контролировалось таким образом, чтобы достичь заданной пористости, определяемой как отношение объемов газовой и металлической фаз. При этом величина перекрытия объемов частиц ξ в среднем составляла $0,1 \div 0,2$ от среднего диаметра $\langle d \rangle$, что имитирует качественный тепловой контакт в подплавленном порошке и в целом соответствует лабораторным измерениям [7; 10]. Оценка представительного объема для порошка для данных процессов позволила определить его в интервале $10^2 \div 10^3$ частиц. То есть, при моделировании объемов с бо́льшим количеством частиц особенности морфологии порошка оказывают незначительное влияние на усредненные по всей системе теплофизические величины и тепловые поля. Полученные на масштабах насыпки частиц функции $k_{eff}(\varepsilon)$ далее, в третьей главе, использовались в качестве интегральной эффективной характеристики среды на пространственно-временных масштабах при рассмотрении насыпного слоя порошка толщиной $h_0 = 100 \div 150$ мкм в процессе СЛП. В качестве модельной системы использовались данные [7] для полученного химическим способом высокодисперсного порошка железа со средним диаметром частиц $\langle d \rangle \simeq 3$ мкм пористостью $\varepsilon_0 = 0.62$.



Рис. 2 — а) Расчетные тепловые поля в объеме частиц порошка для нержавеющей стали в аргоне, пористость $\varepsilon = 0.6$, время $t = 2 \cdot 10^{-6}$ с. Цветовым градиентом показан температурный профиль, волнами — изотермы.

 б) Микрофотография частиц стального порошка, показана их высокая сферичность и малый разброс в размерах. Масштаб изображений на рисунках

одинаков. Рассчитанная эффективная теплопроводность порошка $k_{eff} = 5$ Вт/(м·К), теплопроводность нержавеющей стали k = 15 Вт/(м·К).

Для расчета нестационарных тепловых полей, рис. 2a, решалась краевая задача и двухсредное уравнение теплопроводности (1-2):

$$C_p \rho \frac{\partial T}{\partial t} = k \nabla^2 T; \quad T|_{t=0} = T_{ambient}; \quad T|_{z=0} = T_m; \tag{1}$$

 $\vec{q}_m = \vec{q}_g, T_m = T_g$, между средами; $\mathbf{n} \cdot k \nabla T = 0$, на остальных границах, (2)

где C_p , ρ , k задавались различными для металлической и газовой среды. Расчитанные тепловые поля (рис. 2а) для объемов со случайной насыпкой частиц для данной ε использовались для нахождения эффективного коэффициента температуропроводности α_{eff} . Обратная задача теплопроводности решалась в автомодельном приближении. Так как в данной задаче анализируются эффективные характеристики протекания тепла через порошок, проистекающие из геометрических свойств среды, но учитывающие вклад теплопроводности и теплоемкости газа, то теплофизические параметры металлической и газовой фазы принималась постоянными. С помощью α_{eff} были найдены эффективные коэффициенты теплопроводности для порошков [7; 10] железа (размеры частиц $\sim 3 \div 4$ мкм), нержавеющей стали (размеры частиц ~ 45 мкм), Al-Si, Ta в среде воздуха, аргона, в вакууме (рис. 3), выяснена роль дисперсности среды, а также влияние диаметра контактного пятна $d_{\kappa.n.}$, зависящего от ξ , на эффективную теплопроводность частично сплавленной среды.



Рис. 3 — а) Зависимость эффективной теплопроводности k_{eff} от пористости ε для чистого железа в вакууме (\bigcirc), воздухе (\Box). б) Зависимость $k_{eff}(\varepsilon)$ для нержавеющей стали, в вакууме (\bigcirc), воздухе (\Box). Аппроксимирующая функция вида $k_{eff}(\varepsilon) = Ak_{metal} \operatorname{th}(B\varepsilon - C) + Dk_{gas}$, где коэффициенты $A, D \simeq 0.5, B$ и C зависят от материала.



Рис. 4 — Относительная теплопроводность высокодисперсного Fe в воздухе (непрерывная) и вакууме (пунктирная) при различном перекрытии объемов частиц, что соответствует изменению диаметра контактного пятна между частицами для металлического скелета. В качестве единицы масштаба взят

коэффициент теплопроводности при коэффициенте перекрытия (коэффициенте консолидации [14]) $\xi=0,125,$ что для сферической частицы

d=3 мкм соответствует смещению центров друг к другу на $\xi\langle d\rangle$ при $d_{\rm K.n.}=1,7$ мкм и близко к данным реконструкции порошковой среды [7]. Величина $\xi=0,1$ соответствует $d_{\rm K.n.}=1,2$ мкм, $\xi=0,4-d_{\rm K.n.}=2,4$ мкм, т.е. значительно подплавленному состоянию с сильным слипанием частиц.

При расчете эффективных теплопроводности и температуропроводности порошка влиянием газовой фазы на теплофизические характеристики пренебрегать нельзя, особенно для порошка с низкой теплопроводностью, например, для нержавеющей стали. Для порошков на основе Al теплопроводность металлического скелета значительно превышает теплопроводность газовой фазы, поэтому для таких систем влияние газовой фазы на распределение тепловых полей мало. В процессе усадки при достижении порогового значения пористости $\varepsilon \simeq 0,4$ коэффициент эффективной теплопроводности начинает резко увеличиваться. Для высокопористых порошков тепловое сопротивление порошка значительно возрастает при достижении порога протекания среды ($\varepsilon = 0,7$). Аппроксимирующая функция $k_{eff}(\varepsilon)$, построенная для связных металлических порошков в частично сплавленном состоянии, показывает более высокие эффективные коэффициенты теплопроводности, чем предложенные в литературе [9] модели для несвязных насыпок порошка. Это связано с улучшенным тепловым контактом (рис. 4) между спекающимися частицами металла, формированием перешейков и уплотнением порошкового слоя в процессе сплавления.

Третья глава посвящена исследованию сплавления порошков в приближении сплошной среды в присутствии фазовых переходов первого рода «Т–Ж». Процессы СЛП высокодисперсного порошка при помощи импульсного лазера достаточно сложны с точки зрения участвующих в формировании компактного слоя физических эффектов. Моделирование процесса СЛП было формализовано до рассмотрения единичного прохода лазерным лучом по поверхности слоя Ω_P порошка, нанесенного на подложку Ω_S (рис. 5). В зависимости от интенсивности отвода тепла и шага между импульсами, который определяется скоростью движения лазерного луча и частотой лазерного излучения, выбирались геометрические размеры расчетной области Ω . Получены распределения скоростей кристаллизации и температурных градиентов в затвердевшей области обработки лазерным лучом, оценены характерные времена процессов, динамика плавления и кристаллизации в области обработки, размеры подвергнутой температурному воздействию области. Обсуждены возможности для верификации модели, в приложении качественно сопоставлены результаты моделирования и экспериментальные данные, полученные Гордеевым Г.А., Шутовым И.В., Богдановым А.А., Харанжевским Е.В.

В процессе обработки учитываются нестационарный теплоперенос, интенсивный нагрев поверхности под действием лазера, высокоскоростное плавление и кристаллизация материала (с учетом теплоты фазового перехода), движение границы раздела фаз, конвективное охлаждение и охлаждение за счет излучения с поверхности. Сплавление порошка рассмотрено в в приближении сплошной среды, и введено в модель в виде усадки порошка в объеме и на поверхности. Для описания сплавления высокодисперсных порошков, обрабатываемых импульсным лазером, разработана следующая физическая модель:

1) Теплофизические параметры порошка учитываются в виде функции эффективной теплопроводности k_{eff} , зависящей от пористости ε . В приближении сплошной среды учитывается среднее по элементарному объему значение локальной пористости ε порошка. Введена зависимость теплоемкости от температуры.

2) В исследуемых режимах лазерной обработки с характерными временами импульса $\tau \sim 10^{-3}$ с в начальный период нагрева диффузионный теплоперенос превалирует над конвективным. Характерное время импульса мало, и со-



Рис. 5 — а) Схема трехмерной расчетной области, где Ω_P — порошковый слой, Ω_S — подложка. б) Результаты расчета поля усадки и границы расплавленной ванны, мощность P = 50 Вт, $\tau = 45$ мс, $R_{\rm луча} = 200$ мкм, цветом обозначена пористость ε , белая линия в центре спекшейся области — граница расплавленной ванны, макс. температура 2691 К указана точкой.



Рис. 6 — Распределение скоростей кристаллизации при движении фронта затвердевания в зоне оплавления после прекращения лазерного импульса в слое порошка Fe. Показано поле скоростей кристаллизации, соотнесенных с

положением фронта кристаллизации в различные моменты времени. Параметры: P = 100 Вт, $\nu = 50$ Гц, $R_{\rm луча} = 400$ мкм. Стрелками указано направление движения фронта кристаллизации.

поставимо или меньше характерного времени развития конвективных течений. Конвективные течения в расплавленной зоне в процессе обработки импульсным лазером не учитывались.

3) Мощность лазерного излучения полагается одинаковой в течение всего времени лазерного импульса. Значение коэффициента поглощения лазерного излучения k_{abs} , определяющего долю энергии лазерного источника, поступающую в образец, взято по литературным данным.

4) Излучение проникает в порошковый слой на глубину порядка одного слоя порошка, что для высокодисперсного порошка составляет 3-5 мкм. Высокая плотность мощности лазерного луча приводит к быстрому плавлению частиц у поверхности, таким образом, полученная расплавленная ванна эффек-



Рис. 7 — Зависимость скорости фронта кристаллизации $V_{\text{крист.}}$ от относительного времени импульса t/τ (τ — время импульса) при СЛП для высокодисперсного порошка Fe, нержавеющей стали 03X17H14M2, порошка

алюминиевого сплава Al-12Si. Отсчет времени с момента начала кристаллизации зоны оплавления после окончания импульса. Мощность P = 50 Вт, $\tau = 5 \cdot 10^{-3}$ с, nu = 100 Гц, $R_{\rm пуча} = 200$ мкм.

тивно препятствует дальнейшему проникновению излучения вглубь. В нашей модели для СЛП высокодисперсных частиц источник лазерного излучения *F* рассматривался как поверхностный.

5) Достижение температуры кипения металла учитывается с помощью повышения значения эффективного коэффициента теплообмена, когда от простого конвективного охлаждения в газовой среде происходит переход к конвективному охлаждению на поверхности за счет кипения образца [13]. Потеря вещества при кипении не учитывается.

6) При релаксации после лазерного импульса наблюдаются высокие скорости охлаждения оплавленной зоны, поэтому при описании кинетики затвердевания пренебрегается зональной ликвацией компонентов для сплавов.

7) Существуют различные сценарии предварительного прогрева подложки либо дополнительного охлаждения, эффекты от которых наблюдаются при рассмотрении наплавления множественных слоев металла. В нашей модели на нижней границе расчетной области $\partial\Omega_{bot}$ (рис. 5а) вводится условие постоянства температуры.

8) В процессе сплавления существуют области порошка, вступающие в контакт с расплавом, где может происходить фильтрационное протекание жидкого металла через еще не расплавленную пористую металлическую среду. После оценки скорости такого течения по модели Козени-Кармана принято решение им пренебречь. 9) Влияние капиллярных сил и сил поверхностного натяжения, которые могут определять форму затвердевшего трека и быть одной из причин каплеобразования и возникновения конвективного течения внутри расплавленной зоны, учтено введением кинетических коэффициентов A, E_a в уравнении (4) усадки сплавляемой среды.

10) При сканировании лазерным лучом металлический порошок подвергается высокотемпературному воздействию, которое вызывает спекание и затем сплавление частиц порошка друг с другом, а следовательно изменение локальной плотности. Благодаря так называемому жидкофазному или диффузионному сплавлению, сплавление частиц начинается до достижения температуры плавления. Для расчета в металлической среде была экстраполирована модель усадки полимерных порошков [8] и введена в модель в виде уравнения на ε .

Расчет тепловых полей и полей пористости (рис. 5б) производился с помощью расширенной на случай высоких градиентов модели двухфазной зоны [15]; усадка порошка учитывалась с помощью уравнения аррениусовского типа:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial T(H)}{\partial H} \frac{\partial H}{\partial t}, \quad \frac{\partial H}{\partial t} (1 - \varepsilon) = \nabla \left(k_{eff}(\varepsilon) \nabla T \right)$$
(3)

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial t} = -\varepsilon A \exp\left(\frac{E_a}{RT}\right),\tag{4}$$

где t — время, T — температура, H — удельная энтальпия, $k_{eff}(\varepsilon)$ — функция эффективной теплопроводности, зависящая от пористости ε и рассчитанная в главе 2, A — предэкспоненциальный множитель, контролирующий кинетику спекания, E_a — энергия активации вязкого течения, R — универсальная газовая постоянная. Функция зависимости температуры от энтальпии T(H) является ступенчатой и интерполируется полиномом с изломом при температуре $T = T_m$ плавления. Подложка Ω_S состоит из сплавленного материала, поэтому пористость в ней принималась равной нулю. Мощность теплового источника F(x,y,t) распределена по поверхности по нормальному закону; импульсный характер излучения реализуется в виде периодического сигнала прямоугольной формы с помощью функции F_t :

$$F(x,y,t) = k_{abs} \frac{P}{2\pi\sigma\nu\tau_{imp}} F_t \exp\left(\frac{(x_b - x)^2 + (y_b - y)^2}{2\sigma^2}\right),$$
 (5)

где k_{abs} — коэффициент поглощения лазерного излучения, σ — безразмерное среднеквадратичное отклонение, при котором около 80% энергии лазера сконцентрировано в пятне с эффективным диаметром луча $R_{\rm луча} = 200 \div 400$ мкм, (x_b, y_b) — центр луча в текущий момент, P — номинальная мощность луча, ν — частота генерации импульсов, τ_{imp} — продолжительность импульса.

Численная модель была реализована с помощью программного пакета COMSOL Multiphysics version 4.3. Для решения системы приведенных линейных уравнений выбраны прямой решатель MUMPS, использующий распараллеливание расчетного процесса для многопроцессорных вычислительных систем.

Таблица 1 — Скорости кристаллизации, охлаждения, температурный градиент железа, нержавеющей стали 03X17H14M2, Al-12Si сплава по модели СЛП. Расчеты выполнены для $P = 1 \div 100$ Вт, практически значимых для обработки. Начальное значение мощности соответствует расплавлению системы.

Материал	<i>V</i> _{крист.} , м/с	<i>V</i> _{охл.} , К/с	<i>G</i> , К/м	P, Вт
Fe	$0,25 \div 0,35$	$10^{6} \div 10^{7}$	$8 \div 20 \cdot 10^6$	$50 \div 100$
Сталь	$0,2 \div 0,3$	$1\div 1,5\cdot 10^5$	$2 \div 16 \cdot 10^7$	$10 \div 50$
Al-12Si	$0,\!65 \div 0,\!7$	$1 \div 4 \cdot 10^7$	$0,8 \div 1,18 \cdot 10^7$	$30 \div 80$

На рис. 7 при фиксированной мощности излучения P = 100 Вт, $R_{\pi\nu\mu} =$ 200 мкм приведены кривые скорости движения фронта кристаллизации, можно отметить, что скорости кристаллизации для алюминиевого сплава выше, что связано с его высокой теплопроводностью, а также меньшими температурными градиентами. При этом скорости охлаждения, зависящие от площади фронта кристаллизации, то есть от формы расплавленной ванны, могут быть оценены для алюминиевого сплава как максимальные ($V_{\text{охл.}} = 10^7 \div 5 \cdot 10^7$ К/с), а для нержавеющей стали — минимальные (V_{охл.} = 10⁵ К/с). Данные по характерным значениям приведены в табл. 1 и получены при расчете одного импульса для набора мощностей при фиксированной частоте $\nu = 100$ Гц, $R_{\pi\nu 4a} = 200$ мкм. Высокие скорости охлаждения обеспечиваются главным образом за счет отведения тепла в подложку / предыдущие слои, так как отвод тепла в окружающий порошок затруднен из-за его низкой теплопроводности. Режим максимально эффективного теплоотвода в подложку обеспечивается при полном сплавлении и усадке порошка, когда между сплавившимся под действием лазера слоем (расплавом) и подложкой устанавливается полный тепловой контакт. Важным является результат, что максимальные значения скоростей кристаллизации по окончанию импульса для разных порошков имеют один порядок и быстро возрастают ближе к окончанию затвердевания.

В четвертой главе приведено описание модели кристаллического фазового поля (КФП) [16] для определения фаз при лазерной обработке порошков. Произведено амплитудное разложение и аппроксимация модели до использования с кристаллическими структурами: ГЦК, ОЦК, для двухмерной треугольной, полосчатой структуры в одно- и двухмодовом приближении. С использованием данной модели построены размерные и безразмерные диаграммы, отражающие микроструктурное состояние затвердевшей среды в зависимости от переохлаждения и средней плотности металла. Диаграммы двухмерных и трехмерных структур для переходов из неустойчивого состояния построены на основе функционала атомной плотности и метода равных площадей Максвелла [17]. В главе также исследована возможная применимость моделей КФП для систем с высокими скоростями кристаллизации в процессах СЛП.

В общем случае модель КФП позволяет учитывать структурные превращения при глубоком переохлаждении системы из метастабильного состояния



Рис. 8 — Безразмерные диаграммы сосуществования трех (жидкой, ГЦК и ОЦК) фаз с учетом правила отбора фаз для поля параметров «безразмерное переохлаждение ω – средняя атомная плотность \tilde{n} ». Диаграммы получены для функционалов свободной энергии в двухмодовом приближении, параметры $R_1 = 0.05, a = v = 0.1$. Нанесены области сосуществования и однозначного существования фаз. а) Диаграмма построена с условием (15) для $R_1 = 0.05$. б) Параметры $R_0 = -0.1, R_1 = -0.1$, независимы.

(расплава) в стабильное (кристаллическое или жидкое) [17—19]. Модель основана на описании свободной энергии, являющейся функционалом поля $n(\vec{r},t)$ атомной плотности, периодического в твердой фазе и однородного в жидком состоянии, при этом период поля — параметр решетки q_0 . Периодичность поля n учитывает упругие свойства и множественность кристаллографических ориентаций атомного континуума, что описывается уравнением движения для среднего значения консервативного параметра порядка n_0 . В модели фазового поля важное место отводится определению равновесных структур и их взаимному сосуществованию на диаграммах «средняя атомная плотность – температура» или «средняя атомная плотность – движущая сила перехода». Такие диаграммы необходимы для определения структур, к которым должны эволюционировать неустойчивые или метастабильные состояния.

В терминах Ландау-Бразовского при описании фазовых переходов методом КФП термодинамически согласованная система может быть представлена эволюционным уравнением для консервативного сохраняющегося параметра порядка φ :

$$\frac{\partial\varphi}{\partial t} = \nabla^2 \left(\frac{\delta F}{\delta\varphi}\right),\tag{6}$$

где F — свободная энергия Гельмгольца. Плотность f свободной энергии для расплава, позволяющая учитывать фазовые переходы первого и второго рода, запишем следующим образом:

$$f(\phi) = \frac{1-\omega}{2}\varphi^2 + \frac{\alpha\varphi^3}{3} + \frac{\varphi^4}{4}.$$
(7)

Используя в качестве параметра порядка φ локальную среднюю атомную плотность n, отражающую свойства гомогенной/кристаллической фазы, запишем размерный функционал свободной энергии изотермической системы в форме потенциала Ландау-де-Жен [16], для возможности описания более сложных структур введем оператор \mathfrak{D}_i :

$$F(n,T) = \int_{V} \left(\Delta B_0 \frac{n^2}{2} + B_0^x \frac{n}{2} \mathfrak{D}_i n - 2a \frac{n^3}{3} + 15v \frac{n^4}{4} \right) dV, \tag{8}$$

где *а* и *v* — параметры системы, определяющиеся свойствами материала, $n \equiv (\rho - \bar{\rho})/\bar{\rho}$, где ρ — локальная атомная плотность и $\bar{\rho}$ — постоянная атомная плотность жидкости, выбранная в качестве референтной. Функционал учитывает как энергию расплава, так и энергию упругого взаимодействия в кристалле. Далее примем $\bar{\rho}$ как плотность расплава, претерпевающего фазовый переход, в равновесном состоянии. В качестве движущей силы выбран управляющий параметр $\Delta B_0 = B_0^{\ell} - B_0^x$, который определяет разность между объемной упругостью жидкости B_0^{ℓ} и модулем упругости кристалла B_0^x (даны в безразмерных единицах). Переход из метастабильного расплава возможен, если объемная упругость B_0^{ℓ} превосходит упругость B_0^x , так что $\Delta B_0 = B_0^{\ell} - B_0^x > 0$. Если же B_0^ℓ становится меньше модуля упругости B_0^x , т.е. $\Delta B_0 = B_0^\ell - B_0^x < 0$, то возможен переход из нестабильного в стабильное состояние без потенциального барьера. Для определенности рассмотрены только переходы из метастабильной фазы в стабильную (первого рода), т.е. когда $\Delta B_0 > 0$. Дифференциальный оператор \mathfrak{D}_i позволяет определить вклад в общую упругую энергию атомных подрешеток первой и второй координационных сфер. Таким образом, \mathfrak{D}_i может быть записан в одно- и двухмодовом приближении:

$$\mathfrak{D}_1 = (q_0 + \nabla^2)^2, \tag{9}$$

$$\mathfrak{D}_2 = \left[r_0 + (q_0 + \nabla^2)^2 \right] \left[r_1 + (q_1^2 + \nabla^2)^2 \right], \tag{10}$$

где r_0, r_1, q_0, q_1 — параметры решетки, модули координационных векторов. Приведем функционал свободной энергии к безразмерному виду при помощи преобразований:

$$F(n,\Delta B_0), \to \mathfrak{F}(\tilde{n},\omega), \quad \tilde{n} = \sqrt{\frac{15v}{B_0^x}} \left(n - \frac{2a}{45v}\right), \quad \omega = \frac{1}{B_0^x} \left(\frac{4a^2}{45v} - \Delta B_0\right), \tag{11}$$

$$\mathfrak{F} = \int dV \left(\frac{\tilde{n}}{2} [-\omega + \mathfrak{D}_i] \tilde{n} + \frac{\tilde{n}^4}{4} \right). \tag{12}$$

Безразмерные операторы $\mathfrak{D}_1, \mathfrak{D}_2$ будут записаны в следующем виде:

$$\mathfrak{D}_1 = (1 + \nabla^2)^2, \tag{13}$$

$$\mathfrak{D}_2 = [R_0 + (1 + \nabla^2)^2][R_1 + (Q_1^2 + \nabla^2)^2], \tag{14}$$

где ω — безразмерное переохлаждение, а $R_0 = r_0/q_0^4$, $R_1 = r_1/q_0^4$, $Q_1 = q_1/q_0$, могут быть определены на основе экспериментальных данных и результатов молекулярно-динамического моделирования. Существует возможность [20] связать R_0 и R_1 при минимизации \mathfrak{F} при подстановке амплитудного разложения. Проведенные расчеты подтверждают, что для ОЦК и ГЦК кристалла:

$$R_0 = R_1 \cdot (\phi_2/\phi_1)^2 \tag{15}$$

В то же время, при численной минимизации функционала существует возможность сделать R_0 и R_1 независимыми, расчеты с таким допущением приводят к диаграммам, приближенным к поведению реальных систем (Fe) (рис. 8б). Амплитудное разложение, позволяющее представить кристаллическую струк-

туру в виде периодической гладкой функции, описывающей энергию для ОЦК (bcc), ГЦК (fcc) структуры, может быть записано в виде:

$$n_{bcc} = \tilde{n} + 4\phi_1 \left[\cos(qx)\cos(qy) + \cos(qx)\cos(qz) + \cos(qy)\cos(qz) \right] + 2\phi_2 \left[\cos(2qx) + \cos(2qy) + \cos(2qz) \right],$$
(16)

$$n_{fcc} = \tilde{n} + 4\phi_1 \cos\left(qx\right) \cos\left(qy\right) \cos\left(qz\right) + +\phi_2 \left[\cos\left(2qx\right) + \cos\left(2qy\right) + \cos\left(2qz\right)\right],$$
(17)

здесь ϕ_1, ϕ_2 — величины амплитуд КФП вкладов подрешеток, q - равновесное решеточное число (определяется из минимизации \mathfrak{F} по q). Изменение плотности жидкости связано с изменением свободного объема, что топологически не соответствует физическому разряжению или сжатию. Используем понятие средней атомной плотности, отражающее способность жидкости к равномерному объемному упругому сжатию и примем, что:

$$n_{liq} = \tilde{n}.\tag{18}$$

Размер элементарной ячейки для (16-18) $a = 2\pi/q$. Добавление дополнительной амплитуды ϕ_2 в двухмодовом приближении позволяет точнее описывать дальний порядок атомов в решетке. Другими словами, добавление такого слагаемого позволяет ввести два дополнительных коэффициента корреляционной функции (6 и 8 порядка). Используя двухмодовые функционалы для кристаллических структур с оператором (14), полученные подстановкой (16-18) в (12), можно построить диаграмму сосуществования структур (рис. 8). Для построения границ областей сосуществования использовано правило равновесия фаз.

Безразмерное переохлаждение ω позволяет определить возможность системы, сжатой или растяженной по \tilde{n} , эволюционировать, совершить фазовый переход в стабильную структуру. Как видно из рис. 9а, значительное растяжение ($\rho < 7450 \text{ кг/м}^3$) позволяет системе даже при достижении больших переохлаждений в десятки процентов от температуры плавления сохранять жидкое



Рис. 9 — Размерная структурная диаграмма сосуществования трех (жидкой, ГЦК и ОЦК) фаз, построенная при помощи обратного преобразования (11) безразмерной диаграммы (рис. 8б) для констант железа, полученных на основе работы [21]. На рисунке ρ = 7450 кг/м³ соответствует плотности жидкости при равновесном фазовом переходе. б) Увеличенная область в близи равновесного фазового перехода.

состояние при охлаждении метастабильного расплава. Таким образом, при высоком градиенте температур в зоне оплавления при СЛП теоретически возможно в течение значительного времени после падения температуры ниже температуры кристаллизации наблюдать жидкую фазу и продолжающееся перемешивание рис. 96. При повышении плотности расплава в железе расплавленные области могут претерпеть фазовый переход сразу в ГЦК-железо, либо в низкотемпературную ОЦК, создав значительные напряжения в области обработки лазером. Развитая модель КФП не претендует на полное описание неравновесных структур по причине высокой роли кинетических эффектов в процессах кристаллизации. Однако, описывая стремление системы к равновесному состоянию, даже в присутствии значительных движущих сил и сложных условий формирования фаз возможно отследить тенденции в формировании неравновесных структур с использованием разработанного в диссертации метода.

Полученные в третьей главе расчетные данные по модели процесса СЛП высокодисперсного порошка с помощью импульсного лазера позволили найти градиенты температур и скорости движения фронта кристаллизации, что с помощью структурных диаграмм построенных в модели КФП позволило спрогнозировать отбирающиеся в процессе кристаллизации структуры при высоких скоростях охлаждения в зоне обработки.

В заключении приведены основные результаты работы и общие выводы. 1) В процессе лазерного нагрева высокодисперсного порошка происходит подплавление частиц с формирование контактных шеек, которые значительно повышают эффективную теплопроводность гранулированной среды. Рассчитанная эффективная теплопроводность в модели частично консолидированной среды в $10^0 \div 10^1$ раз выше, чем эффективная теплопроводность сухих насыпок в моделях элементарной ячейки и точечного контакта частиц. 2) Эффективная теплопроводность порошкового слоя нелинейно увеличивается с уменьшением пористости в процессе усадки. Газовая фаза в порах оказывает существенное влияние на теплоперенос при СЛП порошков из нержавеющей стали. В железе и сплавах на основе алюминия теплоперенос через газовую фазу пренебрежимо мал в процессах СЛП при пористости, характерной для высокодисперсных порошков.

3) При плавлении порошка и последующей кристаллизации достигаются значительные скорости охлаждения до $V_{\rm охл.} \sim 10^7$ К/с и выше для высокодисперсного железного порошка и порошка Al-12Si благодаря эффективному теплоотводу в подложку. Для нержавеющей стали 03X17H14M2 с низкой теплопроводностью скорость охлаждения составляет до $V_{\rm охл.} \sim 10^5$ К/с. Это способствует увеличению продолжительности существования расправленной ванны после окончания импульса.

4) Скорость кристаллизации для алюминиевых сплавов достигает значений $V_{\text{крист.}} \sim 0.7 \text{ м/c}$, а для железных — $V_{\text{крист.}} \sim 0.3 \div 0.4 \text{ м/c}$, что соответствует сценарию высокоскоростной кристаллизации, когда в сплавах на основе Fe и Al возможен переход к химически безразделительному (безсегрегационному) затвердеванию с формированием метастабильных структурных состояний. При этом высокий положительный градиент является фактором, который приводит к морфологической стабилизации фронта кристаллизации, таким образом затвердевание происходит с плоским невозмущенным фронтом.

5) Развитая в работе модель кристаллического фазового поля (КФП) позволяет описывать фазовые переходы в высоконеравновесных физических системах, в том числе предсказывать отбор кристаллической структуры при кристаллизации в процессах СЛП под воздействием импульсного лазера. Несмотря на высокие скорости охлаждения и скорости кристаллизации, переохлаждения, достигаемые на фронте кристаллизации, не превышают единиц градусов. В таких условиях режим кристаллизации по расчетам КФП показывает сосуществование кристалла с расплавом, что в условиях эксперимента может приводить к сохранению метастабильной жидкости ниже температуры плавления.

6) Повышение плотности метастабильного расплава приводит к отбору более плотной кристаллической ОЦК структуры, соответствующей низкотемпературной ОЦК фазе железа, что подтверждается расчетом структурных диаграмм, построенных в координатах «переохлаждение – плотность» по модели КФП с использованием структурного фактора.

7) Предложен теоретический подход для расчета отбираемой структуры на фронте при высокоскоростной кристаллизации в зависимости от режимов обработки импульсным лазером и эффективных теплофизических свойств порошка. Взаимосвязь моделей локального теплопереноса, теплопереноса в приближении сплошной среды и модели КФП реализована при помощи функций эффективной теплопроводности, рассчитанных в модели случайной насыпки порошка, и скоростей кристаллизации, полученных в модели СЛП в приближении сплошной среды.

Публикации автора по теме диссертации

В изданиях, рекомендованных ВАК:

- 1. Функционал атомной плотности и диаграмма структур в модели кристаллического фазового поля / В. Е. Анкудинов [и др.] // Журнал экспериментальной и теоретической физики. — 2016. — Т. 149, № 2. — С. 343—356.
- 2. Многомасштабное теоретическое описание структурообразования в ультрадисперсных системах / М. Д. Кривилёв [и др.] // Материаловедение. 2012. № 1. С. 2—16.
- Управление лазерным спеканием металлических порошковых смесей / М. Д. Кривилёв [и др.] // Управление Большими Системами. — 2010. — № 31. — С. 299—322.
- Ankudinov V., Gordeev G. A., Krivilyov M. D. Numerical simulation of heat transfer and melting of Fe-based powders in SLM processing // IOP Conference Series: Materials Science and Engineering. – 2017. – Vol. 192. – P. 012026.
- Ankudinov V., Galenko P. K. The diagram of phase-field crystal structures: an influence of model parameters in a two-mode approximation // IOP Conference Series: Materials Science and Engineering. – 2017. – Vol. 192. – P. 012019.
- Optimization of processing parameters in laser sintering of metallic powders / G. A. Gordeev [et al.] // IOP Conference Series: Materials Science and Engineering. - 2012. - No. 27. - P. 1-8.

В сборниках трудов конференций и прочих изданиях:

- Получение градиентных материалов селективным лазерным плавлением: эксперимент, моделирование, технология / М. Д. Кривилев [и др.] // Материалы III Международной Конференции «Аддитивные технологии: настоящее и будущее», 23 марта 2017 г., Москва, ФГУП Всероссийский научноисследовательский институт авиационных материалов. — 2017. — С. 1—14.
- Компьютерное моделирование селективного лазерного плавления порошка карбонильного железа / Г. А. Гордеев [и др.] // Материалы II Международной Конференции «Аддитивные технологии: настоящее и будущее», 16 марта 2016 г., Москва, ФГУП Всероссийский научно-исследовательский институт авиационных материалов. — 2016. — С. 1—15.
- 9. Метод трехмасштабного моделирования селективного лазерного сплавления композитных металлических порошков при импульсной обработке / М. Д. Кривилев [и др.] // Материалы II Международной Конференции «Аддитивные технологии: настоящее и будущее», 16 марта 2016 г., Москва, ФГУП Всероссийский научно-исследовательский институт авиационных материалов. — 2016. — С. 1—15.

- 10. Гордеев Г. А., Кривилев М. Д., Анкудинов В. Е. Численное моделирование лазерной обработки металлических порошковых материалов методом конечных элементов // Вестник Удмуртского университета. Физика. Химия. 2014. № 3. С. 15–22.
- 11. Анкудинов В. Е., Кривилев М. Д. Теоретический анализ зависимости теплофизических характеристик от пористости // Вестник Удмуртского университета. Физика. Химия. – 2012. – № 4. – С. 3–8.
- Нестационарный теплоперенос при фазовых переходах в пористых материалах / М. Д. Кривилёв [и др.] // Вестник Удмуртского университета: Серия Физика и Химия. – 2010. – № 1. – С. 43–55.
- 13. Моделирование нестационарного теплопереноса при высокоинтенсивном лазерном спекании порошковых материалов / В. Е. Анкудинов [и др.] // Труды конференции «Трёхмерная визуализация научной, технической и социальной реальности», Т.1, Ижевск, УдГУ. – 2010. – С. 69–72.

Список литературы

- 1. Лыков А. В. Явления переноса в капиллярно-пористых телах. М.: Гос. издательство техническо-теоретической литературы, 1954. С. 570.
- 2. Шишковский И. В. Основы аддитивных технологий высокого разрешения. СПб.: Питер, 2016. С. 400.
- 3. Гибсон Я., Розен Д., Стакер Б. Технологии аддитивного производства: трехмерная печать, быстрое прототипирование и прямое цифровое производство. М.: Техносфера, 2016. С. 656.
- Laser powder bed fusion additive manufacturing of metals; physics, computational, and materials challenges / W. E. King [et al.] // Applied Physics Reviews. - 2015. - Vol. 2, no. 4. - P. 041304.
- 5. Review of selective laser melting: Materials and applications / C. Y. Yap [et al.] // Applied Physics Reviews. 2015. Vol. 2, no. 4. P. 041101.
- Kumar S. Selective laser sintering: A qualitative and objective approach // JOM. - 2003. - Vol. 55, no. 10. - P. 43-47.
- Харанжевский Е. В. Высокоскоростное лазерное спекание металлических высокодисперсных порошков и композиционных материалов с металлической матрицей: дис. ... д-ра техн. наук: 01.04.07. — Ижевск: Удмуртский государственный университет, 2016. — С. 379.
- Three-dimensional transient finite element analysis of the selective laser sintering process / L. Dong [et al.] // Journal of materials processing technology. – 2009. – No. 209. – P. 700–706.
- 9. Kaviany M. Principles of Heat Transfer in Porous Media. Springer New York, 1995. P. 726.

- Thijs L. Microstructure and texture of metal parts produced by Selective Laser Melting. – KU Leuven - Faculty of Engineering Science, 2014. – P. 254.
- 11. Херлах Д., Галенко П., Холланд-Мориц Д. Метастабильные материалы из переохлажденных расплавов. М.-Иж.: «Регулярная и хаотическая динамика», Ижевский ИКИ, 2010. — С. 496.
- 12. Kurz W., Fisher D. Fundamentals of Solidification. Tr.Tec., 1998. P. 376.
- 13. *Bird B. R., Warren E. S., Lightfoot N. E.* Transport Phenomena. John Wiley & sons, 2007. P. 905.
- 14. *Hadley G. R.* Thermal Conductivity of Packed Metal Powders // Int. J. Heat Mass Transfer. 1989. Vol. 29. P. 909–920.
- 15. *Борисов В. Т.* Теория двухфазной зоны металлического слитка. М.: Металлургия, 1987. С. 224.
- 16. *Provatas N., Elder K.* Phase-Field Methods in Materials Science and Engineering. Wiley-VCH, 2010. P. 312.
- 17. *Elder K. R.*, *Grant M.* Modeling elastic and plastic deformations in nonequilibrium processing using phase field crystals // Physical Review E. 2004. Vol. 70, no. 5. P. 051605.
- 18. Modeling Elasticity in Crystal Growth / K. R. Elder [et al.] // Phys. Rev. Lett. 2002. Vol. 88, no. 24. P. 245701.
- 19. Phase-field crystal modeling and classical density functional theory of freezing / K. R. Elder [et al.] // Phys.Rev.B. - 2007. - Vol. 75. - P. 064107.
- 20. *Asadi E., Zaeem M.* A modified two-mode phase-field crystal model applied to face-centered cubic and body-centered cubic orderings // Computational Materials Science. 2015. Vol. 105. P. 110–113.
- 21. *Wu K.-A., Karma A.* Phase-field crystal modeling of equilibrium bcc-liquid interfaces // Phys. Rev. B. 2007. Vol. 76, issue 18. P. 184107.