

УДК 519.6:532.517+621.7

В. Н. Попов, О. Б. Ковалёв, Е. М. Смирнова, Ю. С. Цивинская

Институт теоретической и прикладной механики
им. С. А. Христиановича СО РАН
ул. Институтская, 4/1, Новосибирск, 630090, Россия

E-mail: popov@itam.nsc.ru

ЧИСЛЕННАЯ ОЦЕНКА ВЛИЯНИЯ ПОВЕРХНОСТНО-АКТИВНОГО ВЕЩЕСТВА НА МАССОПЕРЕНОС ПРИ ПЛАВЛЕНИИ ПОВЕРХНОСТИ МЕТАЛЛА ЛАЗЕРНЫМ ИМПУЛЬСОМ *

Предложена математическая модель процесса легирования поверхности металла с помощью импульсного лазерного излучения, в которой учитывается зависимость поверхностного натяжения от наличия поверхностно-активного вещества в расплаве. Проведено численное моделирование, по результатам которого оценивалось влияние количества поверхностно-активной примеси на характер формирующихся течений и распределение легирующего вещества в металле.

Ключевые слова: легирование металла, импульсное лазерное излучение, конвективный теплоперенос, численное моделирование.

Введение

При модификации поверхностей деталей, улучшении их эксплуатационных свойств, таких как твердость, термо-, износостойкость и т. п., широкое применение находит лазерное излучение. Процессы, происходящие в поверхностном слое металла, при воздействии лазерного импульса исследуются уже продолжительное время [1–7]. Известно, что одним из главных факторов, определяющих качество легирования, является термокапиллярная конвекция, которая способствует распределению модифицирующих добавок, предварительно нанесенных на поверхность материала в виде покрытия или слоя порошка и проникающих в ходе подплавления в расплав. Наряду с этим в последние годы появились работы, описывающие влияние присутствующих в растворах поверхностно-активных веществ на

температурный градиент поверхностного натяжения [7–11], который определяет структуру течений. Таким образом, можно предполагать, что наличие в расплаве примеси поверхностно-активного вещества существенно изменяет характер конвекции в образующейся жидкой лунке.

В настоящей работе с использованием численного моделирования исследуется распределение легирующего материала, проникающего в металлическую подложку с ее поверхности при импульсном лазерном воздействии. Рассматривается нестационарный процесс, который охватывает разогрев металла, его плавление, тепло- и массоперенос в расплаве и затвердевание после окончания импульса. В качестве объекта исследований используются сплавы железа с углеродом и различным содержанием серы, являющейся поверхностно-активным веществом. Анализируется характер формирующей

* Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект № 10-01-00575а) в рамках проекта № 4 фундаментальных исследований, выполняемых СО РАН совместно с организациями УрО РАН.

щихся течений и распределение легирующего вещества в зависимости от количества поверхностно-активного вещества в металле.

Математическая модель

Рассматривается физическая задача воздействия луча лазера радиусом r_0 перпендикулярно к поверхности металлической подложки, температура которой ниже температуры кристаллизации (рис. 1). Импульс имеет продолжительность t_H , а плотность его интенсивности описывается распределением Гаусса. Поверхность подложки покрыта слоем легирующего материала. Под воздействием лазерной энергии происходит разогрев металла и его плавление. В образовавшейся и увеличивающейся со временем жидкой лунке развивается капиллярная и термогравитационная конвекция. Легирующий материал, взаимодействуя расплавом, за счет формирующихся течений проникает с его поверхности в глубину проплавленной лунки. Для расплава используются условия прилипания на твердом фронте кристаллизации. Предполагается, что при исследуемых режимах нагрева небольшие величины конвективных скоростей обуславливают плоскую форму свободной поверхности жидкости [12]. После завершения импульса за счет теплообмена с окружающей средой и отвода тепла в неразогретый материал подложки расплав остывает и затвердевает. Границы r_g , z_g рассматриваемой области выбраны таким образом, чтобы их положение не оказывало влияния на исследуемые процессы. Уравнение теплопроводности в системе с фазовыми переходами сводится к тепловому уравнению модели двухфазной зоны, в которой выделение или поглощение скрытой теплоты фазового перехода учитывается посредством эффективной теплоемкости [13]. Фазовый переход происходит в некотором температурном интервале ΔT вблизи температуры затвердевания материала подложки T_s (температура здесь и далее по шкале Кельвина). Считается, что теплофизические характеристики твердой и жидкой сред одинаковые.

Запишем математическую формулировку рассматриваемой задачи в безразмерных величинах. Распределение температурного поля в твердом и жидком материалах под-

ложки описывается уравнением в цилиндрической системе координат:

$$c_{ef} \left(\frac{\partial \theta}{\partial t} + u \frac{\partial \theta}{\partial r} + w \frac{\partial \theta}{\partial z} \right) = \frac{1}{Pr} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r \frac{\partial \theta}{\partial r} + \frac{\partial^2 \theta}{\partial z^2} \right),$$

$$0 \leq r \leq r_g, \quad -z_g \leq z \leq 0, \quad (1)$$

Здесь θ – температура; $Pr = \nu / a$ – число Прандтля (где ν – кинематическая вязкость, a – температуропроводность); u , w – компоненты вектора скорости в расплавленном металле в радиальном (r) и вертикальном (z) направлениях соответственно (в твердом металле $u \equiv 0$, $w \equiv 0$). Безразмерные параметры определяются с помощью характерного размера r_0 , скорости $v_0 = \nu / r_0$, времени $t_0 = r_0 / v_0$ и $T_s - \theta = T / T_s$, $r = r / r_0$, $z = z / r_0$, $t = t / t_0$, $u = u / v_0$, $w = w / v_0$. Эффективная теплоемкость, учитывающая скрытую теплоту фазового перехода, описывается соотношением

$$c_{ef} = 1 + \delta(\theta) \kappa / (T_s c_p),$$

где $\delta(\theta) = 1$ при $\theta \in [1 - \Delta\theta / 2, 1 + \Delta\theta / 2]$ и $\delta(\theta) = 0$, если $\theta \notin [1 - \Delta\theta / 2, 1 + \Delta\theta / 2]$, $\Delta\theta$ – температурный интервал, на котором «размазывается» фазовая граница; c_p – удельная теплоемкость.

Граничные условия для уравнения (1) следующие.

На оси симметрии

$$\frac{\partial \theta}{\partial r} = 0, \quad r = 0, \quad -z_g \leq z \leq 0. \quad (2)$$

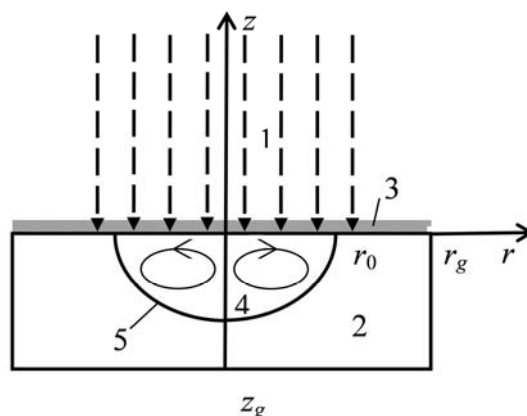


Рис. 1. Схема воздействия лазерного импульса на подложку: 1 – луч лазера; 2, 3 – соответственно металлическая подложка и легирующий материал на ее поверхности; 4 – расплав; 5 – граница проплавленной зоны; r_0 – радиус лазерного луча; z_g и r_g – глубина и радиус рассматриваемой области в подложке

На внешней боковой границе расчетной области

$$\frac{\partial \theta}{\partial r} = 0, \quad r = r_g, \quad -z_g \leq z \leq 0. \quad (3)$$

На верхней границе ($z = 0$). При нагреве от источника $t \leq t_H$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \theta}{\partial z} &= q(r), \quad 0 \leq r \leq 1; \\ \frac{\partial \theta}{\partial z} &= \alpha(\theta_c - \theta), \quad 1 < r \leq r_g. \end{aligned} \quad (4a)$$

После завершения импульса ($t > t_H$)

$$\frac{\partial \theta}{\partial z} = \alpha(\theta_c - \theta), \quad 0 \leq r \leq r_g. \quad (4б)$$

На нижней границе расчетной области

$$\frac{\partial \theta}{\partial z} = 0, \quad 0 \leq r \leq r_g, \quad z = -z_g. \quad (5)$$

Здесь

$\alpha = \alpha_0 r_0 / \lambda$, $q(r) = q_0 \exp\{-2r^2\} r_0 / \lambda T_s$,
 $\alpha_0 = \varepsilon \sigma_0 (T^2 + T_c^2) (T + T_c)$, $q(r)$ – плотность мощности теплового источника (в безразмерном виде);

σ_0 – постоянная Стефана – Больцмана;

ε , λ – степень черноты и теплопроводность материала подложки;

T_c – температура окружающей среды ($\theta_c = T_c / T_s$).

При плавлении металла в области $\theta > 1$ с границей «расплав – твердая фаза» $f(r, z, t)$ течение в жидкости описывается уравнениями Навье – Стокса в приближении Буссинеска:

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial r} + w \frac{\partial w}{\partial z} &= \\ &= -\frac{\partial p}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r \frac{\partial u}{\partial r} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} - \frac{u}{r^2}, \\ \frac{\partial w}{\partial t} + u \frac{\partial w}{\partial r} + w \frac{\partial w}{\partial z} &= \\ &= -\frac{\partial p}{\partial z} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r \frac{\partial w}{\partial r} + \frac{\partial w}{\partial z^2} + Gr(\theta - 1), \\ \frac{1}{r} \frac{\partial ru}{\partial r} + \frac{\partial w}{\partial z} &= 0. \end{aligned} \quad (6)$$

Здесь

p – давление ($p_0 = \rho v_0^2$);

$Gr = \beta_p g r_0^3 T_s / \nu^2$ – число Грасгофа;

g – ускорение свободного падения;

β_p – коэффициент объемного теплового расширения;

ρ – плотность расплава.

Граничные условия для уравнений (6) следующие.

На поверхности «расплав – твердая фаза» $f(r, z, t)$

$$u = 0, \quad w = 0. \quad (7)$$

На оси симметрии $r = 0$, $-z_f \leq z \leq 0$

($z_f(t)$ – координата границы фазового перехода при $r = 0$)

$$u = 0, \quad \frac{\partial w}{\partial r} = 0. \quad (8)$$

На поверхности жидкости $z = 0$, $0 \leq r < r_f$

$$\frac{\partial u}{\partial z} = \frac{Mn}{Pr} \frac{\partial \theta}{\partial r}, \quad w = 0, \quad (9)$$

где

$r_f = r_f(t)$ – радиус свободной поверхности лунки расплавленного металла;

$Mn = \frac{(\partial \sigma / \partial T) T_s r_0}{\rho \nu a}$ – число Марангони;

σ – поверхностное натяжение.

Согласно физическим свойствам большинства металлов, в расплавленном состоянии изменение поверхностного натяжения от концентрации примеси при численном моделировании обычно не учитывается [11]. Однако в ряде случаев при наличии в расплаве поверхностно-активных веществ существует зависимость параметра $\partial \sigma / \partial T$ от изменения величины примеси, которая следует из эмпирической формулы для поверхностного натяжения [10]:

$$\begin{aligned} \sigma &= \sigma_0 - k_\sigma (T - T_s) - TR \Gamma_s \times \\ &\times \ln \left\{ 1 + S_i \exp \left[-\Delta H^0 / (RT) \right] C \right\}, \end{aligned}$$

где σ_0 – поверхностное натяжение в чистом металле в точке плавления; $k_\sigma = -\partial \sigma_0 / \partial T$ – для чистого металла; R – универсальная газовая постоянная; C – концентрация примеси на поверхности расплава; S_i – константа, соответствующая энтропии сегрегации; ΔH^0 – стандартная теплота адсорбции; Γ_s – избыток примеси в поверхностном слое на единицу площади. Тогда

$$\begin{aligned} \frac{\partial \sigma}{\partial T} &= -k_\sigma - R \Gamma_s \times \\ &\times \ln \left(1 + KC \right) - \frac{KC}{1 + KC} \frac{\Gamma_s \Delta H^0}{T}, \end{aligned} \quad (10)$$

$$K = S_i \exp\left[-\Delta H^0 / (RT)\right].$$

Из (10) следует, что при $\Delta H^0 < 0$ выражение $\partial\sigma / \partial T$ может принимать значения не только меньше, но и больше 0 в зависимости от соотношения величин T и C .

Распределение концентрации C легирующего вещества, которое вовлекается течением расплава с его свободной поверхности, описывается уравнением конвективной диффузии:

$$\begin{aligned} \frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial r} + w \frac{\partial C}{\partial z} = \\ = \frac{1}{Sc} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r \frac{\partial C}{\partial r} + \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} \right), \end{aligned} \quad (11)$$

где $Sc = \nu / D$ – число Шмидта; D – коэффициент диффузии; $C = C / C_0$, C_0 – количество легирующего вещества на поверхности подложки.

Граничные условия для (11) следующие.

На поверхности «расплав – твердая фаза» $f(r, z, t)$

$$\frac{1}{Sc} \frac{\partial C}{\partial \mathbf{n}} = 0. \quad (12)$$

На оси симметрии $r = 0$, $-z_f \leq z \leq 0$

$$\frac{1}{Sc} \frac{\partial C}{\partial r} = 0. \quad (13)$$

На зеркале расплавленного металла $z = 0$, $0 \leq r < r_f$

$$\frac{1}{Sc} \frac{\partial C}{\partial z} = Bi_D (1 - C), \quad (14)$$

где Bi_D – отражает скорость проникновения легирующего вещества в расплав. Отметим, что результатом решения диффузионной задачи может быть только качественная картина, так как нами не рассматривается механизм взаимодействия с расплавом частиц легирующего вещества, расположенного на его поверхности.

Начальные условия для уравнения теплопереноса (1):

$$\theta = \theta_0. \quad (15)$$

Предполагается, что в только что расплавленном металле

$$u = 0, \quad w = 0, \quad C = 0. \quad (16)$$

Алгоритм решения задачи

При реализации модели (1)–(16), которая включает в себя уравнения Навье – Стокса и конвективного тепло- и массопереноса,

применялся конечно-разностный алгоритм. Для аппроксимации уравнений в расчетной области использовалась пространственная сетка вида $r_i = \Delta x \cdot i$, $i = 0, \dots, I$, $z_k = \Delta z \cdot k$, $k = 0, \dots, K$, $\Delta r = r_g / I$, $\Delta z = z_g / K$, которая разбивает расчетную область на $I \times K$ ячеек. Вдоль временной переменной используется равномерная сетка с шагом τ . Разностные уравнения строились посредством аппроксимации балансных соотношений, получаемых интегрированием уравнений (1), (6), (11) с использованием соответствующих граничных условий. При аппроксимации (6) в области расплавленного материала, по аналогии с методами типа MAC и SIMPLE [14; 15], составляющие скоростей u , w определялись в серединах боковых граней ячеек, а давление p рассчитывалось в центрах ячеек. Распределение температуры и концентрации растворенного вещества в расчетной области описывается их значениями в узлах сетки.

Порядок проведения расчетов следующий. Первоначально рассчитывается разогрев подложки под влиянием энергии лазерного луча. После появления жидкой лунки на каждом временном шаге вычисляется температурное поле и определяется граница фазового перехода. Подстановка рассчитанных значений температуры в уравнения количества движения делает возможным определение составляющих поля скоростей. Далее с использованием метода искусственной сжимаемости [16] вычисляется давление. Проводится несколько итераций по согласованию распределения давления и скоростей. Условием прекращения расчетов является выполнение неравенства

$$\max |\nabla \cdot \mathbf{u}| \leq \Delta,$$

где Δ – заданное малое число. На последнем этапе вычислений рассчитывается распределение легирующей примеси в расплаве. Решение алгебраических систем, получаемых при неявной аппроксимации уравнений движения, тепло- и массопереноса, осуществляется итерационным методом блочной последовательной верхней релаксации [17].

После завершения лазерного импульса расчеты продолжают до момента полного затвердевания материала подложки. Конвективное перераспределение примеси происходит только в расплаве, а в затвердевшей области фиксируются последние рассчитанные значения.

Результаты численных экспериментов

Численные исследования проводились при следующих параметрах:

$$\begin{aligned} r_0 &= 0,001 \text{ м}; \\ z_g &= 0,0006 \text{ м}; \\ r_g &= 0,0015 \text{ м}; \\ t_H &= 0,004 \text{ с}; \\ T_c &= 300 \text{ К}; \\ T_0 &= 300 \text{ К}; \\ \Delta T &= 10 \text{ К}; \\ q_0 &= 4 \cdot 10^8 \text{ Вт/м}^2. \end{aligned}$$

Теплофизические свойства сплава [10; 11; 18]:

$$\begin{aligned} \rho &= 7\,065 \text{ кг/м}^3; \\ c_p &= 787 \text{ Дж/(кг}\cdot\text{К)}; \\ \lambda &= 27 \text{ Вт/(м}\cdot\text{К)}; \\ \kappa &= 2,77 \cdot 10^5 \text{ Дж/кг}; \\ T_s &= 1\,775 \text{ К}; \\ \nu &= 8,5 \cdot 10^{-7} \text{ м}^2/\text{с}; \\ k_{\sigma} &= 4,3 \cdot 10^{-4} \text{ Н/(м}\cdot\text{К)}; \\ \beta_p &= 1,18 \cdot 10^{-4} \text{ 1/К}; \\ D &= 2,5 \cdot 10^{-9} \text{ м}^2/\text{с}; \\ \varepsilon &= 0,5; \\ R &= 8314,3 \text{ Дж/(моль}\cdot\text{К)}; \\ S_l &= 3,18 \cdot 10^{-3}; \\ \Gamma_s &= 1,3 \cdot 10^{-8} \text{ моль/м}^2; \\ \Delta H^0 &= -1,88 \cdot 10^8 \text{ Дж/моль}. \end{aligned}$$

Рассматриваемые объемы серы в железе $C_s = 0\text{--}0,04$ % от массы.

Безразмерные параметры, используемые в расчетах:

$$\text{Pr} = 0,175; \text{Gr} = 2,848 \cdot 10^3;$$

$\text{Mn}_0 = 2,62 \cdot 10^4$ (для металла без примеси серы);

$$\text{Sc} = 170; \text{Bi}_D = 0.05.$$

Вычисления проводились на пространственных сетках $I \times K$ от 120×150 до 240×300 (различие получаемых результатов не превышало 2 %). Значение временного шага $\tau = 10^{-4}$, $\Delta = 10^{-4}$.

На рис. 2 представлены варианты решений задачи при различных концентрациях поверхностно-активного вещества в расплаве и прочих одинаковых параметрах расчетов. В случае постоянного значения $\partial\sigma/\partial T$ при $C_s = 0$ (рис. 2, а, б) было определено, что с момента подплавления подложки в области максимального воздействия теплового источника в расплаве вблизи свобод-

ной поверхности существует расходящееся от центра течение, которое у границы фазового перехода формирует интенсивный нисходящий поток. В центральной части лунки происходит восходящее движение жидкости. По мере прогрева подложки размер лунки увеличивается, ее форма и структура течения в ней сохраняются. Рис. 2, а отображает поле скоростей в расплаве в момент завершения лазерного импульса. (Здесь и далее стрелки на рисунке указывают направление, а их длина характеризует интенсивность потока.) Существующая структура течения приводит к тому, что легирующая добавка не проникает глубже 5 мкм в расплав в центральной области лунки, и только часть материала с помощью нисходящего потока проникает на глубину около 30 мкм вдоль фазовой границы (рис. 2, б). После отключения источника энергии температурные градиенты в жидкости уменьшаются, интенсивность конвекции снижается, расплав быстро затвердевает (0,4 мс), чему способствует низкая начальная температура подложки. За время кристаллизации распределение примеси существенно не меняется.

На рис. 2, в, г представлены результаты, полученные при $C_s = 0,02$ %. Из расчетов следует, что к моменту прекращения импульса вдоль свободной поверхности жидкости наблюдается существенная немонотонность параметра $\partial\sigma/\partial T$, приводящая к возникновению пяти тороидальных вихрей (рис. 2, в). Такая структура течения способствует переносу тепла вглубь расплава к границе фазового перехода, что существенно изменяет ее форму, а также распространению легирующей добавки во всем объеме лунки (рис. 2, г). После прекращения импульса за время затвердевания металла распределение примеси практически не изменяется.

Результаты, полученные при содержании серы в железе $C_s = 0,04$ % от массы, иллюстрирует рис. 2, д, е. Согласно представленным данным, к моменту прекращения импульса в расплаве формируется несколько тороидальных вихрей. Особенностью рассматриваемого варианта является наличие интенсивных нисходящих потоков как в самом центре лунки, так и вблизи него. Такая структура течения способствует переносу тепла с поверхности вглубь расплава к границе фазового перехода, что существенно изменяет ее форму, и углубляет лунку

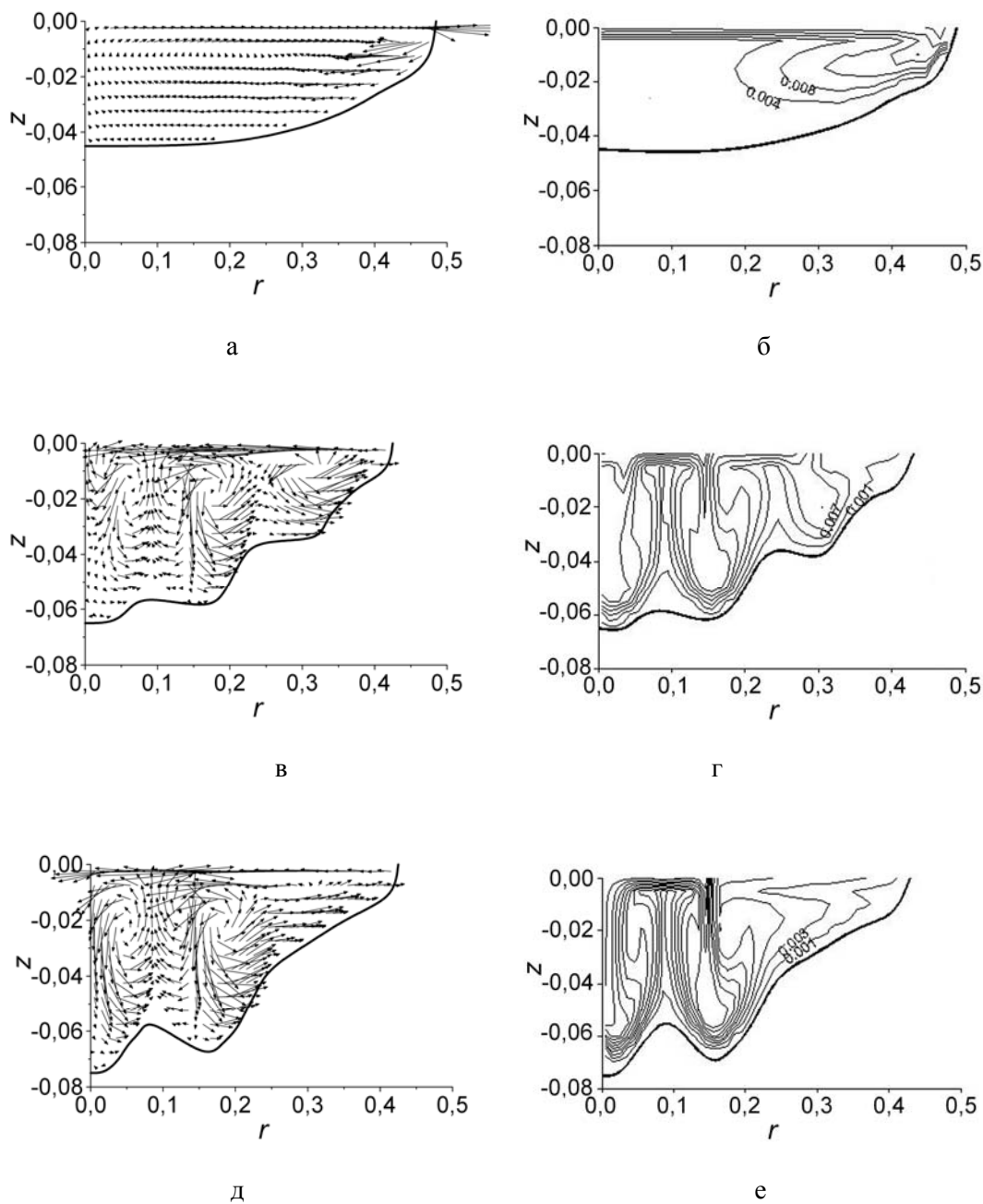


Рис. 2. Варианты решения задачи:
 а, б – при $C_S = 0$; в, г – при $C_S = 0,02\%$; д, е – при $C_S = 0,04\%$

(рис. 2, д). Наряду с этим у поверхности расплава формируется течение, направленное от границы фазового перехода к центру системы. Другими словами, из этой области легирующая добавка, увлекаемая потоком, переносится в центральную часть лунки, где опускается в глубину расплава (рис. 2, е).

Отметим что, так как не рассматривается механизм взаимодействия с расплавом частиц легирующего вещества, расположенного на его поверхности, решением диффузионной задачи является качественный результат. Вместе с тем в ходе расчетов было определено, что результаты при измене-

нии безразмерного параметра Sc в диапазоне от 50 до 500 фактически совпадают. Иначе говоря, распределение легирующего вещества в расплаве происходит за счет процесса конвективной диффузии.

Заключение

Можно сделать вывод о том, что поверхностно-активные вещества, являясь компонентами расплава, существенно влияют на процессы легирования. В результате численного моделирования показано, что наличие в жидком металле поверхностно-активного вещества приводит к формированию многовихревой структуры течений, способствующей более однородному распределению легирующей добавки в расплаве. Можно предположить, что в некоторых случаях, разместив на поверхности металла композицию поверхностно-активного вещества с нейтральными добавками, можно способствовать повышению качества модификации поверхности металла.

Список литературы

1. Веденов А. А., Гладуш Г. Г. Физические процессы при лазерной обработке материалов. М.: Энергоатомиздат, 1985. 208 с.
2. He X., Fuerschbach P. W., DebRoy T. Heat Transfer and Fluid Flow during Laser Spot Welding of 304 Stainless Steel // *J. Phys. D: Appl. Phys.* 2003. Vol. 36. P. 1388–1398.
3. Uglov A. A., Smurov I. Yu., Tagirov K. I., Guskov A. G. Simulation of Unsteady-State Thermocapillary Mass Transfer for Laser Doping of Metals // *Int. J. Heat Mass. Transfer.* 1992. Vol. 35. No. 4. P. 783–793.
4. Smurov I., Covelli L., Tagirov K., Akse-nov L. Peculiarities of Pulse Laser Alloying: Influence of Spatial Distribution of the Beam // *J. Appl. Phys.* 1992. Vol. 71 (7). P. 3147–3158.
5. Майоров В. С. Лазерное упрочнение металлов // Лазерные технологии обработки материалов: современные проблемы фундаментальных исследований и прикладных разработок / Под ред. В. Я. Панченко. М.: Физматлит, 2009. С. 439–469.
6. Багмутов В. П., Захаров И. Н. Моделирование тепловых процессов при поверх-

ностной обработке неоднородных металлических тел высокотемпературным движущимся импульсным источником // *Вычисл. мех. сплош. сред.* 2011. Т. 4, № 1. С. 5–16.

7. Гладуш Г. Г., Лиханский В. В., Лобойко А. И. Влияние поверхностно-активных веществ на тепло- и массоперенос при плавлении поверхности вещества лазерным импульсом // *Квантовая электроника.* 1997. Т. 24, № 3. С. 274–278.

8. Зуев А. Л., Костарев К. Г. Особенности концентрационно-капиллярной конвекции. // *УФН.* 2008. Т. 178, № 10. С. 1065–1085.

9. Бурих П. В., Рудаков П. Н. Влияние интенсивности адсорбционно-десорбционных процессов на концентрационную конвекцию около капли в горизонтальном канале // *Вычисл. мех. сплош. сред.* 2010. Т. 3, № 1. С. 24–31.

10. Sahoo P., DebRoy T., McNallan M. J. Surface Tension of Binary Metal-Surface Active Solute Systems under Conditions Relevant to Welding Metallurgy // *Metall. Trans. B.* 1988. Vol. 19 B. P. 483–491.

11. Ehlen G., Ludwig A., Sahn P. R. Simulation of Time-Dependent Pool Shape during Laser Spot Welding: Transient Effects // *Metall. Mater. Trans. A.* 2003. Vol. 34 A. P. 2947–2961.

12. Höche D., Müller S., Rapin G., Shinn M., Remdt E., Gubisch M., Schaaf P. Marangoni Convection during Free Electron Laser Nitriding of Titanium // *Metall. Mater. Trans. B.* 2009. Vol. 40. No. 4. P. 497–507.

13. Борисов В. Т. Теория двухфазной зоны металлического слитка. М.: Металлургия, 1987. 224 с.

14. Harlow F. H., Welch J. E. Numerical Calculation of Time-Dependent Viscous Incompressible Flow of Fluid with Free Surface // *Phys. Fluids.* 1965. Vol. 8. P. 2182–2189.

15. Patankar S. V., Spalding D. B. A Calculation Procedure for Heat, Mass and Momentum Transfer in Three-Dimensional Parabolic Flows // *Int. J. Heat Mass Trans.* 1972. Vol. 15. P. 1787–1806.

16. Chorin A. J. A Numerical Method for Solving Incompressible Viscous Flow Problems // *J. Comput. Phys.* 1967. Vol. 2. P. 12–26.

17. Самарский А. А., Николаев Е. С. Методы решений сеточных уравнений. М.: Наука, 1978. 592 с.

18. *Kawai Ya.* Diffusion of Slufur in Liquid Iron. I: Diffusion in Pure Iron // Science Reports of the Research Institutes. Tohoku Uni-

versity. Ser. A. Physics, Chemistry and Metallurgy. 1957. Vol. 9. P. 78–83.

Материал поступил в редколлегию 05.03.2012

V. N. Popov, O. B. Kovalev, E. M. Smirnova, Yu. S. Tsivinskaya

**NUMERICAL EVALUATION OF THE EFFECT OF A SURFACE-ACTIVE COMPONENT
ON THE CONVECTIVE MASS TRANSFER DURING THE METAL SURFACE MELTING
BY THE LASER IMPULSE**

Under consideration is a mathematical model of the alloying process of the metal surface by the pulsed laser radiation. The dependence of the surface tension on the surface-active impurities in the melt is analyzed. The numerical simulation enabled to determine the possibility of development of flows and distribution of the alloying material into the metal.

Keywords: metal alloying, laser radiation, convective heat and mass transfer, numerical simulation.