

аспирант Антропов И.И.
(ДонГТУ, г. Алчевск, Украина)

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ЛАЗЕРНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ С ПОВЕРХНОСТЬЮ МЕТАЛЛОВ, ИМЕЮЩИХ ПОЛИКРИСТАЛЛИЧЕСКОЕ СТРОЕНИЕ

Сконструйовано нестационарне рівняння Шредингера та обтунтовано перехід до класичного рівняння теплопровідності у випадку складного фазового складу поверхневого шару металів, наведено результати розрахунку розподілення температур для випадку обробки імпульсним лазерним випромінюванням.

Среди большого разнообразия возможностей применения лазера в современном производстве лазерное упрочнение можно рассматривать как одно из наиболее перспективных направлений. На сегодняшний день уже накоплен большой объем экспериментальных данных по взаимодействию лазерного луча с различными материалами, особенно с поверхностью металлов и сплавов [1-3].

Для математического описания лазерной обработки металлов необходимо, в первую очередь, произвести микроскопическое описание взаимодействия ионов в узлах кристаллической решетки и электронного газа с падающим на металлический поликристалл электромагнитным излучением. Для этого построим уравнение Шредингера. Построение будем производить для одного монокристалла, считая, что все неоднородности и дефекты сконцентрированы на границах раздела зерен, после чего обобщим его и на случай поликристалла.

Уравнение Шредингера в общем случае имеет вид:

$$H\psi = E\psi, \quad (1)$$

где оператор полной энергии можно представить как:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(x). \quad (2)$$

Здесь слагаемое $V(x)$ должно соответствовать сумме операторов энергии, описывающих взаимодействие электронов и ионов металличе-

ской решетки между собой, с колебаниями решетки и внешним (лазерным) воздействием.

Для записи гамильтониана всей системы рассмотрим методы его построения для следующих частных случаев:

- взаимодействие свободных электронов с ионами в узлах кристаллической решетки и друг с другом;
- электрон-фононное взаимодействие;
- взаимодействие с электромагнитной волной.

Описание состояния электронного газа.

Для построения уравнения состояния электронного газа металлической решетки можно применять [4] приближение Хартри-Фока, которое будем использовать при следующих ограничениях:

- 1) электроны движутся в строго периодической решетке;
- 2) ионы кристаллической решетки бесконечно тяжелые и покоятся;
- 3) электроны внутренних атомных оболочек учтены тем, что они создают эффективный потенциал V_p с периодом решетки;
- 4) пока считаем, что энергия кулоновского взаимодействия между электронами делает наибольший вклад.

Тогда оператор Гамильтона будет состоять из трех слагаемых: кинетической энергии, потенциальных энергий в периодической решетке и кулоновского взаимодействия.

В терминах вторичного квантования для этого случая уравнение Шредингера будет иметь вид:

$$\left[\int \psi^+(\vec{x}) \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V_p(\vec{x}) \right\} \psi(\vec{x}) dV + \frac{1}{2} \iint \psi^+(\vec{x}) \psi^+(\vec{x}') \frac{e^2}{|\vec{x} - \vec{x}'|} \psi(\vec{x}') \psi(\vec{x}) dV dV' \right] \Phi = E \Phi. (3)$$

При этом функции $\psi^+(\vec{x})$ и $\psi(\vec{x})$ являются операторами, которые удовлетворяют ферми-перестановочным соотношениям. Их можно разложить по собственным функциям:

$$\psi(\vec{x}) = \sum_k a_k \varphi_k(\vec{x}), (4)$$

$$\psi^+(\vec{x}) = \sum_k a_k^+ \varphi_k^*(\vec{x}), (5)$$

где коэффициенты разложения a_k^+ и a_k имеют смысл операторов рождения и уничтожения, соответственно, а $\varphi_k(\vec{x})$ и $\varphi_k^*(\vec{x})$ образуют полный набор ортонормированных функций.

Функции $\varphi_k(\bar{x})$ и $\varphi_k^*(\bar{x})$ не являются решением уравнения (3). Метод Хартри-Фока подразумевает нахождение такого уравнения Шредингера, для которого бы эти функции были "оптимальными" собственными функциями.

В рамках теории вторичного квантования [5] для оператора полной энергии в этом случае получается выражение:

$$\begin{aligned} \langle \Phi | H | \Phi \rangle = & \sum_{k_j} \int \varphi_{k_j}^*(\bar{x}) \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V_p(\bar{x}) \right\} \varphi_{k_j}(\bar{x}) dV + \\ & + \frac{1}{2} \sum_{k_j, k_i} \iint \varphi_{k_j}^*(\bar{x}) \varphi_{k_i}^*(\bar{x}') \frac{e^2}{|\bar{x} - \bar{x}'|} \varphi_{k_i}(\bar{x}') \varphi_{k_j}(\bar{x}) dV dV' - \\ & - \frac{1}{2} \sum_{k_j, k_i} \iint \varphi_{k_j}^*(\bar{x}) \varphi_{k_i}^*(\bar{x}') \frac{e^2}{|\bar{x} - \bar{x}'|} \varphi_{k_j}(\bar{x}') \varphi_{k_i}(\bar{x}) dV dV'. \end{aligned} \quad (6)$$

Здесь суммы распространяются только на занятые состояния k_1, \dots, k_N .

Теперь определим волновые функции φ_k так, чтобы выражение (6) имело минимум. Используя условие нормировки волновой функции на единицу, после проведения варьирования по $\frac{\delta}{\delta \varphi_k^*(\bar{x})}$ выражения (6), приходим к уравнению:

$$\begin{aligned} \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V_p(\bar{x}) \right\} \varphi_k(\bar{x}) + \sum_{k_j} \int \varphi_{k_j}^*(\bar{x}') \frac{e^2}{|\bar{x} - \bar{x}'|} \varphi_{k_j}(\bar{x}') dV' \varphi_k(\bar{x}) - \\ - \sum_{k_j} \int \varphi_{k_j}^*(\bar{x}') \frac{e^2}{|\bar{x} - \bar{x}'|} \varphi_k(\bar{x}') dV' \varphi_{k_j}(\bar{x}) = E \varphi_k(\bar{x}). \end{aligned} \quad (7)$$

Рассмотрим последовательно слагаемые в уравнении (7). Оба члена в фигурных скобках представляют потенциальную и кинетическую энергию электрона в периодическом потенциале решетки кристалла. Следующее выражение представляет собой произведение:

$$\varphi_k(\bar{x}) \tilde{V}(\bar{x}),$$

причем

$$\tilde{V}(\bar{x}) = \sum_{k_j} \int \left| \varphi_{k_j}(\bar{x}') \right|^2 \frac{e^2}{|\bar{x} - \bar{x}'|} dV'. \quad (8)$$

Поскольку $|\varphi|^2 e$ имеет смысл плотности заряда, то сумма по k_j имеет смысл электростатического потенциала, вызванного распределением электронов по состояниям k_j .

Последнее выражение имеет вид:

$$-\sum_{k_j} \varphi_{k_j} A_{k_j, k}(\bar{x}), \quad A_{k_j, k}(\bar{x}) = \int \varphi_{k_j}^*(\bar{x}') \frac{e^2}{|\bar{x} - \bar{x}'|} \varphi_k(\bar{x}') dV', \quad (9)$$

и описывает обменное кулоновское взаимодействие.

Взаимодействие между электронами и фононами.

Энергия электрон-фононного взаимодействия может быть выражена посредством записи гамильтониана Фрелиха, для чего введем дополнительные ограничения:

1) функция Блоха для электронов имеет малый волновой вектор \bar{k} , тогда соответствующие длины волн велики по сравнению с постоянной решетки;

2) для взаимодействия с электронами важны только те колебания решетки, длины волн которых много больше постоянной решетки.

При описании процесса также необходимо учесть, что в металлах основной вклад дает взаимодействие с акустическими колебаниями, для которых справедлив закон дисперсии $\omega = vk$, где v – скорость звука.

Исходя из представлений классической электродинамики, энергию колебаний кристаллической решетки можно представить в виде:

$$E_p = \int \left\{ \frac{\gamma}{2} \dot{\vec{P}}^2(\bar{x}) + \frac{g}{2} \left[(\text{grad} P_x)^2 + (\text{grad} P_y)^2 + (\text{grad} P_z)^2 \right] \right\} dV, \quad (10)$$

где \vec{P} – вектор поляризации; коэффициенты γ и g могут быть определены при помощи экспериментальных данных.

Кроме того, вследствие высокой подвижности электронов в металлах классический закон Кулона необходимо переписать в новой форме, которая учитывает эффекты экранировки:

$$K(\bar{x} - \bar{x}') = C_0 \frac{e^{-\lambda|\bar{x} - \bar{x}'|}}{|\bar{x} - \bar{x}'|}, \quad (11)$$

где λ – постоянная экранирования.

Тогда полный оператор Гамильтона примет вид:

$$H = \int \psi^+(\vec{x}) \left(-\frac{\hbar^2}{2m^*} \Delta \right) \psi(\vec{x}) dV + \frac{1}{2} \int \left\{ \frac{\vec{\Pi}^2(\vec{x})}{\gamma} + g \sum_{j=x,y,z} (\text{grad} P_j)^2 \right\} dV + \quad (12)$$

$$+ C \int \psi^+(\vec{x}) \psi(\vec{x}) (-\text{div} \vec{P}(\vec{x})) dV.$$

Поскольку поляризация обязана своим происхождением продольным колебаниям [6], то для \vec{P} можно использовать подстановку:

$$\vec{P} = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\vec{w}} \sqrt{\frac{\hbar}{2\gamma\omega_w}} \frac{\omega(\vec{w})}{w} e^{i\vec{w}\vec{x}} (b_w - b_w^+). \quad (13)$$

Если подставить разложенные в ряд волновые функции:

$$\psi(\vec{x}) = \sum_k a_k \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{k}\vec{x}} \quad (14)$$

в (12) и (13), то окончательно получим гамильтониан:

$$H = \sum_k \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} a_k^+ a_k + \sum_w \hbar \omega b_w^+ b_w + \underbrace{\hbar \sum_{w,k} (g_w b_w a_{k+w}^+ a_k + g_w^* b_w^+ a_{k-w}^+ a_k)}_{H_{63}}, \quad (15)$$

где константы связи g_w в явном виде можно представить как

$$\hbar g_w = -\frac{ei}{\lambda^2} \sqrt{\frac{\hbar}{2\gamma V \omega_w}}. \quad (16)$$

Взаимодействие электронов с электромагнитным полем.

Полный гамильтониан можно получить путем добавления оператора Гамильтона для свободного светового поля к гамильтониану квантованного электронного поля.

Классическая функция Гамильтона для электрона, который движется в поле векторного потенциала $\vec{A}(\vec{x})$ и скалярного потенциала $V(\vec{x})$ имеет вид:

$$H_{кл} = \frac{1}{2m} (p - eA(\vec{x}))^2 + V(\vec{x}). \quad (17)$$

В рамках вторичного квантования (17) принимает вид:

$$H_{эл} = \int \psi^+(\vec{x}) \left\{ \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} - e\vec{A} \right)^2 + V(\vec{x}) \right\} \psi(\vec{x}) dV + H_{вз}. \quad (18)$$

Слагаемое, содержащее векторный потенциал, можно упростить, возведя в квадрат. Соблюдая точную последовательность множителей

$$\left(\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} - e\vec{A} \right)^2 = -\hbar^2 \Delta - \frac{\hbar e}{i} \vec{A} \vec{\nabla} + e^2 A^2. \quad (19)$$

Тогда гамильтониан можно представить как

$$H_{эл} = H_{0,эл} + H_{св} + H_{вз}, \quad (20)$$

где $H_{0,эл}$ описывает движение электронов в потенциальном поле $V(x)$,

$$H_{0,эл} = \int \psi^+(\vec{x}) \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{x}) \right\} \psi(\vec{x}) dV, \quad (20a)$$

$H_{св}$ – взаимодействие электронов со светом:

$$H_{св} = \int \psi^+(\vec{x}) \left\{ -\frac{\hbar e}{2mi} \vec{A} \vec{\nabla} + e^2 A^2 \right\} \psi(\vec{x}) dV, \quad (20б)$$

а $H_{вз}$ – кулоновское взаимодействие электронов.

Векторный потенциал можно разложить по плоским волнам:

$$\vec{A} = \sum_{\vec{k}, j} \sqrt{\frac{\hbar 2\pi c^2}{\omega_k}} \left(\vec{e}_{k,j} \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{k}\vec{x}} b_{k,j} + \vec{e}_{k,j} e^{-i\vec{k}\vec{x}} b_{k,j}^+ \right), \quad (21)$$

где ω_k – частота парциальных волн излучения;

$\vec{e}_{k,j}$ – вектор поляризации волны \vec{k} ;

j – индекс, различающий направления поляризации;

V – объем нормировки;

$b_{k,j}$ и $b_{k,j}^+$ – операторы рождения и уничтожения, удовлетворяющие бозевским перестановкам.

Тогда для э/м волны оператор Гамильтона имеет вид:

$$H_{cв} = \sum_{k,j} \hbar \omega_{k,j} b_{k,j}^+ b_{k,j}. \quad (22)$$

Полный оператор Гамильтона для взаимодействия электронов с лазерным излучением будет суммой (20) и (22).

Окончательный вид уравнения Шредингера и уравнение теплопроводности.

Исходя из сделанных выше допущений, можно окончательно сформулировать уравнение Шредингера в следующем виде:

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V_p(\vec{x}) + \tilde{V}(\vec{x}) + \sum_{\vec{w}} \hbar \omega_{\vec{w}} b_{\vec{w}}^+ b_{\vec{w}} + H_{\text{вз}} + H_{cв} + H_{cв.в} \right\} \varphi_k(\vec{x}) - \sum_{k_j} A_{k_j,k} \varphi_{k_j}(\vec{x}) = E \varphi_k(\vec{x}), \quad (23)$$

где первые два слагаемых описывают кинетическую и потенциальную энергию электронов в периодическом потенциале; $\tilde{V}(\vec{x})$ определяется (8) и имеет смысл электростатического потенциала; сумма $\sum_{\vec{w}} \hbar \omega_{\vec{w}} b_{\vec{w}}^+ b_{\vec{w}}$ – полную энергию фононов с волновыми векторами \vec{w} ; $H_{\text{вз}}$ – энергия электрон-фононного взаимодействия согласно (15); $H_{cв}$ и $H_{cв.в}$ – характеризуют взаимодействие электронов с квантом света (20б) и энергию падающего излучения (22) соответственно; слагаемое $-\sum_{k_j} A_{k_j,k} \varphi_{k_j}(\vec{x})$

описывает обменные кулоновские взаимодействия между электронами, коэффициенты $A_{k_j,k}(\vec{x})$ определяется выражением (9).

Полученное уравнение (23) для случая монокристалла имеет квантованное решение, если же его обобщить для поликристаллической системы путем суммирования энергетических состояний для каждой фазовой составляющей, то в силу искажения волновых функций на границе отдельных кристаллитов, решение уравнения вида:

$$\sum_i \left[\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V_p(\vec{x}) + \tilde{V}(\vec{x}) + \sum_{\vec{w}} \hbar \omega_{\vec{w}} b_{\vec{w}}^+ b_{\vec{w}} + H_{\text{вз}} + H_{cв} + H_{cв.в} \right\} \varphi_k(\vec{x}) - \sum_{k_j} A_{k_j,k} \varphi_{k_j}(\vec{x}) \right] = \sum_i E \varphi_k(\vec{x}), \quad (24)$$

где индекс i пробегает все значения порядкового номера рассматриваемых кристаллитов, относительно собственных значений энергии кри-

сталла в целом, уже не будет дискретным, а может быть представлено в виде непрерывной функции координат и времени.

Если под волновой функцией φ в уравнениях (23) и (24) понимать функцию, описывающую поведение всего металлического поликристалла в целом, то с учетом того, что

$$E = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t}, \quad (25)$$

эти уравнения удобно представить в следующем виде:

$$[-\alpha\Delta + W(\vec{x})]\varphi = \beta \frac{\partial \varphi}{\partial t}, \quad (26)$$

где α и β – некоторые положительные постоянные множители, а слагаемое $W(\vec{x})$ представляет собой сумму операторов энергии, которые характеризуют взаимодействие электронов с фононами, фотонами и другими электронами, а также энергию падающего излучения.

Из вида уравнения (26) можно сделать вывод о том, что изменение функции состояния всего металлического поликристалла со временем может быть вызвано только изменением слагаемого $W(\vec{x})$, т.е. только за счет процессов, связанных с рождением и распространением фононов в кристалле согласно (15) и за счет получения энергии со стороны падающего излучения по механизмам (20) и (22).

С другой стороны, энергетическое состояние металлического поликристалла хорошо описывается классической молекулярно-кинетической теорией, в рамках которой значение энергии, запасенной в кристаллической решетке, при высоких температурах с точностью до константы, зависящей от рода вещества, однозначно определяется его термодинамической температурой в первой степени.

Поскольку в уравнении (26) и слева, и справа стоит операторное представление энергетического спектра, который, как уже говорилось, в случае поликристалла является непрерывным, то физически корректной будет замена микроскопического гамильтониана на макроскопическое значение энергии, выраженное через термодинамическую температуру. Тогда с точностью до константы (26) можно переписать в виде:

$$-\alpha\Delta T + Q = \beta \frac{\partial T}{\partial t}, \quad (27)$$

где Q уже имеет смысл источника энергии.

Таким образом, мы совершили переход от квантово-механического описания металлического поликристалла посредством уравнения Шредингера вида (24) к классическому уравнению теплопроводности (27), которое в общем виде удобно переписать в форме:

$$\frac{1}{a} \frac{\partial}{\partial t} T(x, y, z, t) - \Delta T = \frac{q(x, y, z)}{\lambda}, \quad (28)$$

где a , λ – коэффициенты температуро- и теплопроводности, q – пространственно распределенный тепловой источник.

Причем поскольку для фиксированных моментов времени энергетическое распределение электронов проводимости и фононный спектр фиксированы, а резонансный электрон-электронный и электрон-фононный энергетический обмен является установившимся, то в качестве слагаемого $q(x, y, z)$ может рассматриваться только значение энергии, которое подводится в кристаллическую решетку за счет теплового источника (лазерного луча).

Решение (28) для постоянного теплового потока $\langle q \rangle$, действующего в течении времени $0 \leq t \leq T$ с последующим его мгновенным выключением подробно рассмотрено в [7]. В случае нормального распределения плотности мощности в пучке оно имеет вид

$$\Delta T(r, z, t) = \begin{cases} \frac{2\langle q \rangle e^{-kr^2} \sqrt{at}}{\lambda} \int_{\frac{z}{2\sqrt{at}}}^{\infty} \Phi^*(\xi) d\xi & \text{при } 0 \leq t \leq T \\ \frac{2\langle q \rangle e^{-kr^2} \sqrt{a}}{\lambda} \left(\int_{\frac{z}{2\sqrt{at}}}^{\infty} \Phi^*(\xi) d\xi - \sqrt{t-T} \int_{\frac{z}{2\sqrt{a(t-T)}}}^{\infty} \Phi^*(\xi) d\xi \right) & \text{при } t > T \end{cases}, \quad (29)$$

где $\Phi^*(\xi)$ – дополнение к интегралу вероятности, равное $1 - \Phi(\xi)$, k – коэффициент пространственного сжатия лазерного луча.

Результаты расчета температурного поля в поверхностном слое металлического образца из ст45 показаны на рисунке 1. Условия расчета: время излучения 3 мс, вкладываемая энергия 1,5 мДж.

Таким образом, температура на поверхности образца достигает порога начала аустенитного превращения за десятые доли мс, а распад аустенита начинается примерно через 7 мс после начала облучения, т.е. время выдержки составляет порядка 5,5-7 мс при скоростях нагрева и охлаждения до 10^7 К/с, что должно быть достаточно для получения при последующем охлаждении мелкодисперсной структуры, например, мар-

тенсита. Из распределения температуры на глубине 250 мкм хорошо видно, что с увеличением глубины за счет инерционности процесса теплопроводности происходит запаздывание прогрева, а убывание температуры характеризуется более пологой кривой, т.е. нижележащие облас-

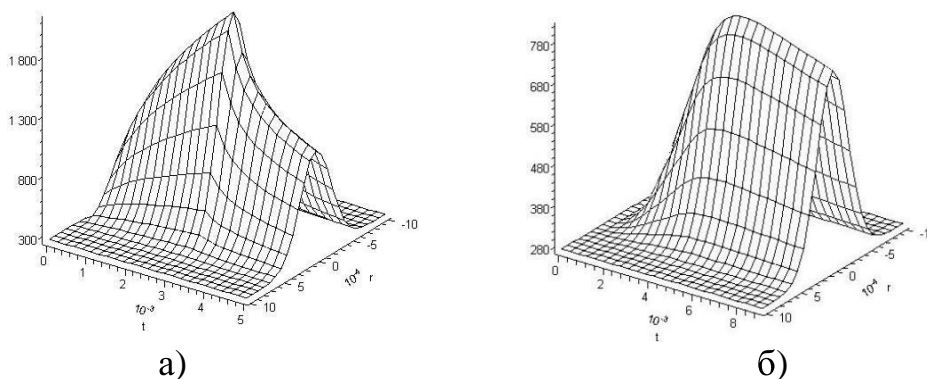


Рисунок 1 – Изменение температуры металла (сталь 45) с течением времени при воздействии импульсным лазерным излучением:

а) на поверхности металла, б) на глубине 250 мкм

ти выдерживаются при повышенных температурах значительно дольше, чем поверхность обрабатываемого металла. В дальнейшем необходимо провести аналогичные исследования для других марок углеродистых сталей и сравнить их результаты с экспериментальными.

Построено нестационарное уравнение Шредингера и обоснован переход к классическому уравнению теплопроводности в случае сложного фазового состава поверхностного слоя металлов, приведены результаты расчета распределения температур для случая обработки импульсным лазерным излучением.

The unstationary Shredinger equation is built and the transition to classic heat conductivity equation in the case of difficult phase composition of superficial layer of metals is grounded, the results of computation of temperature distribution for the pulse laser radiation treatment are defined.

Библиографический список.

1. Постников В.С., Белова С.А. Морфология упрочняющих фаз в слоях, полученных лазерным легированием / Физика и химия обработки материалов, 1998, №2, с. 33-36
2. Воздействие лазерного излучения на материалы / Арутюнян Р.В., Баранов В.Ю., Большов Л.А. и др. – М.: Наука. 1989. – 367 с.

3. *Промышленное применение лазеров / Под ред. Г. Кёбнера; Пер. с англ. Смирнова А.Л.; Под ред. Зуева И.В.. – М.: Машиностроение, 1988. – 280 с.*

4. *Шульце Г. Металлофизика / Пер. с нем. А.К. Натансона; Под ред. Я.С. Уманского. – М.: Мир, 1971. – 504 с.*

5. *Абрикосов А.А. Основы теории металлов: Учеб. руководство. – М.: Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит., 1987. – 520 с.*

6. *Киттель Ч. Квантовая теория твердых тел / Пер. с англ. А.А. Гусева. – М.: Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит., 1967. – 492 с.*

7. *Г. Карслоу, Д. Егер. Теплопроводность твердых тел. – М.: Наука, 1964. – 488 с.*

Рекомендовано к печати д.т.н., проф. Денищиком Ю.С.