

## ПРОБЛЕМЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ ПОВЕРХНОСТНОЙ ОБРАБОТКИ МАТЕРИАЛОВ И НАНЕСЕНИЯ ПОКРЫТИЙ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ВЫСОКОЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ИСТОЧНИКОВ

А.Г. Князева, О.Н. Крюкова, Н.В. Букрина, С.Н. Сорокова\*

Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, г. Томск

\*Томский политехнический университет

E-mail: okruk@ms.tsc.ru

*На примерах конкретных моделей технологических процессов и их стадий анализируются проблемы моделирования необратимых процессов, приводящих к формированию свойств поверхностей и покрытий. Показано, что основные проблемы численного моделирования связаны с разномасштабностью физико-химических и механических процессов, их взаимовлиянием и отсутствием надежных экспериментальных данных по зависимостям свойств от состава.*

### **Ключевые слова:**

*Моделирование технологических процессов и их стадий, неравновесная термодинамика, поверхностная обработка материалов, нанесение покрытий.*

### **Key words:**

*Modeling of the technological processes and them stages, nonequilibrium thermodynamics, surface material treatment, coating.*

### **1. Введение**

Обработку поверхностей материалов и нанесение покрытий осуществляют различными способами с целью модификации структуры, улучшения прочностных и иных свойств, увеличения срока службы и т. д. Моделирование поведения материалов с покрытиями и тонкими пленками при механическом нагружении, конечно, позволяет частично выявить особенности технологий. Формирование структуры и свойств поверхностных слоев происходит непосредственно в процессе обработки и является следствием разнообразных необратимых процессов. Например, в ходе электронно-лучевой обработки наблюдаются нагрев и плавление, перераспределение легирующих элементов. В свою очередь, изменение фазового и химического состава, а также изменяющееся во времени неоднородное температурное поле влекут за собой появление механических напряжений самой разной физической природы. В ходе технологического процесса происходит частичное растворение одних фаз и выделение новых, наблюдаются процессы кристаллизации и рекристаллизации, формирование пор и полостей, микроразрушение.

Более сложные физико-химические процессы сопровождают обработку материалов потоками ионов, т. к. в подобных технологиях наблюдаются сложные физико-химические процессы, приводящие к изменению состава и структуры. Экспериментатор имеет в своем распоряжении только исходный материал, технологические условия и конечный результат обработки и может лишь догадываться по косвенным данным о тех процессах, которые привели к полученному результату. Более того, в условиях лабораторного эксперимента или реальной технологии не удастся четко выявить роль отдельных факторов в формировании структуры и свойств материалов и их поверхностей. Поэтому математическое моделирование в этой области

весьма актуально. Об этом свидетельствуют и публикации [1–7] и др.

Математическое моделирование технологических процессов сталкивается с многочисленными трудностями, обойти которые удастся лишь при целенаправленном решении конкретных задач [8]. Общего рецепта, к сожалению, предложить пока не удастся.

Например, процессы, которые приводят к формированию свойств материалов, характеризуются различными пространственными и временными масштабами, что приводит к необходимости разработки специальных численных алгоритмов. Имеющиеся мощные пакеты не в состоянии решать связанные задачи.

Свойства исходных материалов известны с большой погрешностью, что не дает уверенности в численных значениях ни температуры в зоне обработки, ни состава.

Формально-кинетические параметры химических реакций, фазовых переходов, коэффициенты диффузии являются предметом изучения в различных областях физики и химии. Несмотря на наличие большого количества прикладных термодинамических пакетов, развитых методов молекулярной динамики, методов Монте–Карло, использование их для моделирования сложных технологических процессов затруднительно.

Даже если результатом моделирования является конкретная структура и определенный фазовый состав материала, покрытия или поверхностного слоя, на основе известных методов механики сплошных сред не представляется возможным оценить надежно механические свойства. В этом случае весьма хорошим результатом будет оценка возможной области изменения механических свойств материала в результате обработки, если известен фазовый состав к концу процесса обработки.

Еще одной проблемой всех технологий является оценка или предсказание остаточных напряжений, которые в значительной степени определяют механические свойства.

Все эти проблемы имеют место как при традиционных способах обработки материалов с использованием высокоэнергетических источников, так и при их обработке с целью получения заданной микро- и наноструктуры.

Из разнообразных методов обработки поверхностей остановимся на электронно-лучевых технологиях. Некоторые результаты обобщены в обзоре [9].

## 2. Разновидности электронно-лучевых технологий модификации поверхностей и теплофизика

Электронно-лучевые технологии поверхностной обработки и нанесения покрытий весьма разнообразны и отличаются как по технической организации процесса и материалам, так и по мощности используемых электронно-лучевых установок [10]. Традиционно моделирование стадий технологических процессов обработки с использованием энергии электронного луча осуществляли в рамках теории теплопроводности с введением эффективных подвижных или неподвижных, распределенных или точечных, поверхностных или объемных источников тепла, соответствующих разным режимам сканирования и разным технологическим параметрам. Так, если плотность мощности электронного луча не превышает  $q_0 \sim 10^5 \dots 10^6$  Вт/см<sup>2</sup>, источник тепла можно считать поверхностным. В противном случае необходимо учитывать объемное поглощение энергии. Если обработка поверхности с помощью электронного луча осуществляется в режиме сканирования, то для частот более 50 Гц эффективный источник тепла оказывается распределенным и характеризуется постоянной плотностью  $q_0$ .

Характер распределения энергии в эффективном источнике зависит от режима сканирования. При обработке поверхностей импульсными сильноточными электронными пучками результат зависит не только от введенной энергии, но и от длительностей и количества импульсов и пауз между отдельными импульсами. В этом случае плотности энергии в электронном пучке оказываются настолько высокими, что необходимо говорить об активации материала в поверхностном слое или о его переходе в особое структурно-фазовое состояние [11]. Во всех случаях математические модели поверхностной обработки оказываются различными: различны не только наборы определяющих процесс параметров и учетных явлений, геометрия, макроскопические свойства, но и определяющие соотношения.

## 3. Разномасштабные процессы, протекающие совместно

Свойства поверхностей, формирующихся после термической обработки, зависят от разнообразных процессов, которые характеризуются различными

пространственными и временными масштабами. Это приводит порой к непреодолимым, на первый взгляд, трудностям вычислительного характера. С одной стороны, различие масштабов позволяет изучать разные процессы отдельно. Но за кадром остается взаимовлияние разных процессов и связанные с этим нелинейные эффекты. Например, диффузия в твердой фазе, с которой связывают различные диффузионно-контролируемые процессы рекристаллизации, ползучести, спекания с участием жидкой и твердой фаз, гетерогенные превращения, растворение и др., много медленнее, чем перенос тепла теплопроводностью, и протекает в масштабах, много меньших ширины теплового пограничного слоя. Это относится к диффузии в окрестности границы раздела реагентов и продуктов реакции, в масштабе отдельно взятых частиц в порошковой смеси [12–14].

В моделях макрокинетики это приводит к выделению специальных подзадач и построению особых кинетических законов для скоростей превращения. Иная ситуация возникает при электронно-лучевой обработке материалов: перераспределение примесей в прогревом слое или насыщение поверхности примесью из остаточной плазмы или адсорбционного слоя протекает в существенно неизотермических условиях. Совместное численное решение задач теплопроводности и диффузии для твердой фазы, когда скорости изучаемых процессов различаются на 3–5 порядков даже при повышенной температуре, приводит к необходимости разработки специальных алгоритмов [15, 16] или к учету в моделях некоторых специфических особенностей.

В качестве примера рассмотрим простую задачу. Предположим, что покрытие малой толщины  $h_1$ , предварительно нанесенное на подложку, содержит в своем составе легирующие элементы, концентрации которых обозначим как  $a_i$ ,  $i=1, 2$ . В начальный момент времени  $t=0$  легирующие элементы распределены в покрытии равномерно, а в подложке отсутствуют. При  $t>0$  система со стороны покрытия подвергается действию импульсно-периодического источника тепла, например, потока электронов. Полагаем, что радиус пучка электронов превышает поперечные размеры образца, что позволяет ограничиться одномерной постановкой задачи, которая включает в себя уравнение теплопроводности и уравнения диффузии легирующих элементов из покрытия в основу,

$$\begin{aligned} c\rho \frac{\partial T}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial z} \left( \lambda_T \frac{\partial T}{\partial z} \right), \quad t \geq 0, \quad 0 \leq z < +\infty, \\ \frac{\partial a_1}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial z} \left( D_{11} \frac{\partial a_1}{\partial z} + D_{12} \frac{\partial a_2}{\partial z} \right), \\ \frac{\partial a_2}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial z} \left( D_{21} \frac{\partial a_1}{\partial z} + D_{22} \frac{\partial a_2}{\partial z} \right), \end{aligned} \quad (1)$$

где  $D_{ij}$ ,  $i, j=1, 2$  – парциальные диффузионные коэффициенты;  $T$  – температура;  $c$ ,  $\rho$ ,  $\lambda_T$  – теплоем-

кость, плотность и коэффициент теплопроводности, зависящие от температуры, концентраций диффундирующих веществ и координаты (т. е. все коэффициенты различны для покрытия и подложки). Примем, что толщина покрытия  $h_1$  много меньше, чем толщина подложки  $h$ . Кроме того, пусть  $h_1 < \sqrt{t_* D_{ij}^1}$ ;  $h_1 < \sqrt{t_* \kappa}$ , где  $\kappa = \lambda_{T1}/(c_1 \rho_1)$ ;  $t_*$  – характерное время процесса, верхний индекс «1» у коэффициентов диффузии относится к покрытию. Эти неравенства позволяют не рассматривать распределение температуры и концентрации в покрытии.

Тогда в качестве граничного условия для температуры при  $z=0$  будет справедливо граничное условие в виде дифференциального уравнения:

$$z = 0: \lambda_T \frac{\partial T}{\partial z} = h_1 c_1 \rho_1 \frac{\partial T}{\partial t} + \sigma \varepsilon (T^4 - T_e^4) - q(t),$$

где слагаемое  $\sigma \varepsilon (T^4 - T_e^4)$  описывает тепловые потери по закону Стефана-Больцмана;  $\sigma$  – постоянная Больцмана;  $\varepsilon$  – степень черноты;  $T_e$  – температура окружающей среды или стенок вакуумной камеры, а вид функции  $q(t)$  и начальные условия зависят от описываемой стадии технологического процесса.

Для концентраций на границе имеем аналогичные условия:

$$z = 0: h_1 \frac{\partial a_1}{\partial t} = D_{11} \frac{\partial a_1}{\partial z} + D_{12} \frac{\partial a_2}{\partial z},$$

$$h_1 \frac{\partial a_2}{\partial t} = D_{21} \frac{\partial a_1}{\partial z} + D_{22} \frac{\partial a_2}{\partial z}.$$

Вдали от нагретой области источники и стоки тепла и массы отсутствуют:

$$z \rightarrow \infty: D_{11} \frac{\partial a_1}{\partial z} + D_{12} \frac{\partial a_2}{\partial z} = 0, \quad D_{21} \frac{\partial a_1}{\partial z} + D_{22} \frac{\partial a_2}{\partial z} = 0.$$

В начальный момент времени концентрация и температура в покрытии однородны.

Зависимости теплофизических свойств от температуры аппроксимируются полиномами. Коэффициенты диффузии в общем случае зависят от концентраций по степенному закону, а от температуры – по закону Аррениуса. Теплоемкости веществ резко возрастают в окрестности температур плавления, причем покрытие и подложка в общем случае имеют различные температуры плавления  $T_{ph,1}$ ,  $T_{ph}$ .

Матрица диффузионных коэффициентов должна удовлетворять определенным требованиям. Так, в трехкомпонентной системе должно выполняться неравенство  $D_{11} D_{22} - D_{12} D_{21} > 0$ , следующее из термодинамических ограничений.

Использование специально разработанного алгоритма [15], основанного на описании задач теплопроводности и диффузии на отдельных согласованных сетках (имеющих общие узлы), позволило сократить время счета для одного варианта в 10...100 раз.

Анализ результатов численного решения задачи для модельной системы показывает, что распре-

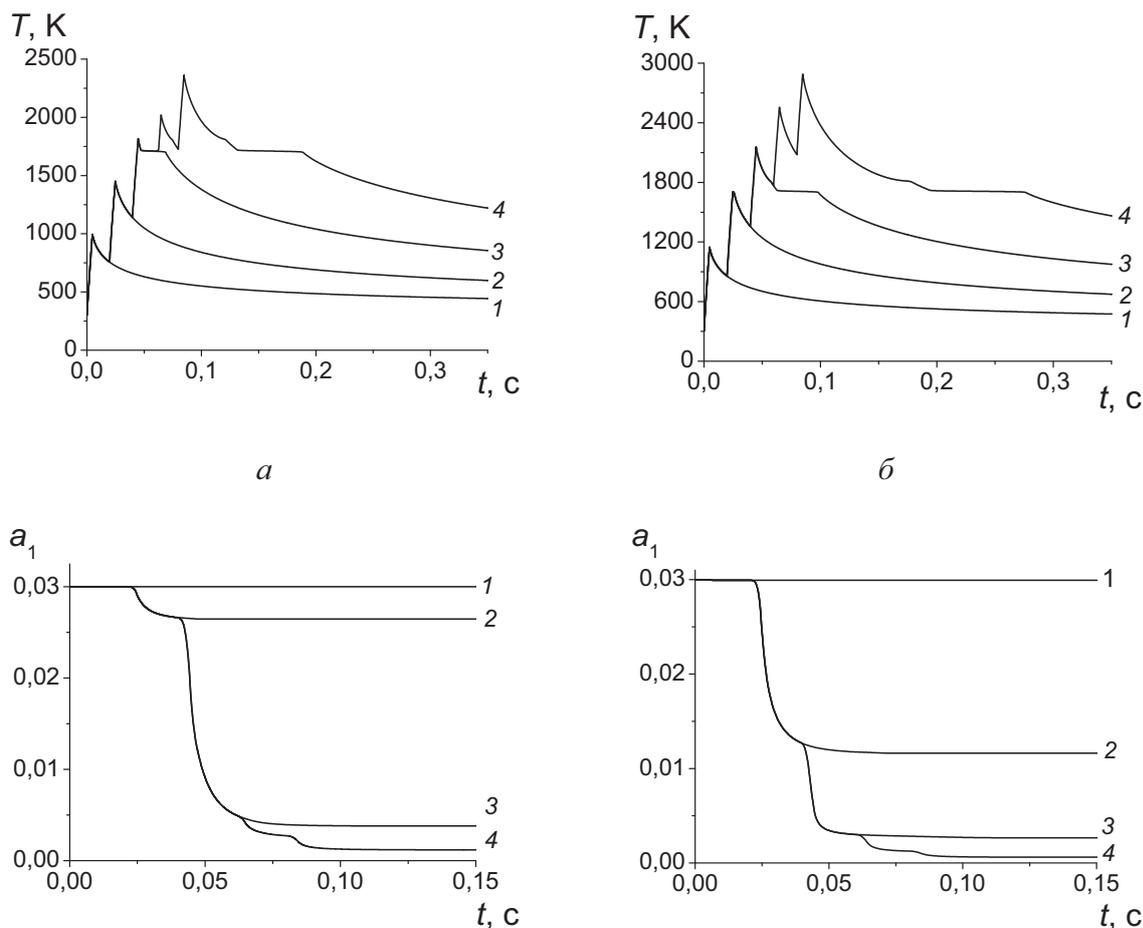
деление и максимальное значение температуры и концентрации в обрабатываемом образце зависят от максимальной плотности мощности, числа и длительности импульсов, а так же от частоты источника. На рис. 1, а, б, в качестве примера представлена зависимость температуры от времени в точке  $z=0$ . К концу первого импульса (рис. 1, а, б, кривая 1) длительностью 0,005 с температура в покрытии и на поверхности подложки при данном наборе параметров не превышает 1100 К. За это время концентрация легирующих элементов в покрытии изменяется слабо (рис. 1, в, кривая 1). Диффузия наблюдается лишь при температуре  $T_* > 700...900$  К и протекает в поверхностном слое за  $\Delta t \approx 0,02$  с. Второй импульс, действующий за первым после времени паузы  $t_p = 0,015$  с, приводит к большему повышению температуры, которая ускоряет диффузию так, что за время второго импульса и при остывании до температуры  $T_*$  концентрация элементов в покрытии уменьшается до  $a_1^* \approx 0,01173$ , а  $a_2^* \approx 0,1212$ .

Пять импульсов (рис. 1, а, б, кривые 4) достаточно для того, чтобы концентрация первого элемента  $a_1$  в покрытии уменьшалась почти до нуля, а трех – до  $a_2^* \approx 0,00982$ . Пики на кривой зависимости температуры от времени соответствуют окончанию импульсов, плато – плавлению (во время действия третьего импульса и кристаллизации – при остывании после 5 импульсов). Концентрации легирующих элементов в покрытии во времени практически отслеживают поведение температуры (рис. 1, в, г).

Пространственные распределения температуры и концентраций в подложке в различные моменты времени, получаемые при численном решении, иллюстрируют тот факт, что ширина диффузионной зоны  $x_D$ , много меньше (на 3–5 порядков) ширины зоны прогрева  $x_T$ , где температура превышала 700...900 К в ходе обработки. Численные значения  $a_1^*$ ,  $a_2^*$  в покрытии к окончанию процесса обработки и величины  $x_T$ ,  $x_D$  существенно зависят от параметров внешнего воздействия. Такие зависимости представляют интерес для конкретных систем. Учет перекрестных диффузионных потоков и зависимостей коэффициентов диффузии от концентраций также оказывает существенное влияние на динамику процесса, что в моделях термической обработки [4, 5] и др. не анализировалось.

#### 4. Зависимость свойств от структуры и состава

Вопрос о зависимости свойств от состава и структуры должен изучаться специальным образом. Практически во всех известных моделях авторы обращают внимание только на зависимости свойств от температуры. Но это не решает проблемы. В процессе обработки материала или покрытия получается новый материал с заранее неизвестным фазовым и химическим составом, а, следовательно, с неизвестными свойствами. Надежных теорий, которые были бы пригодны на этот случай, не су-



**Рис. 1.** Зависимость температуры и концентрации легирующих элементов от времени в точке  $z=0$  при  $q_0$ : а, в)  $5 \cdot 10^4$ ; б, г)  $6,1 \cdot 10^4$  Вт/см<sup>2</sup>;  $n=1$  (1);  $n=2$  (2);  $n=3$  (3);  $n=5$  (4);  $t_i=0,005$  с,  $t_p=0,015$  с

ществует, и приходится довольствоваться полуэмпирическими моделями, догадками и интуицией. Если для свойств композиционных материалов имеются более или менее обоснованные теории, то зависимость свойств от химического состава – это предмет исследования. Поэтому не стоит ожидать от моделей технологических процессов обработки материалов и их поверхностей «точных» цифр или «совпадений» расчетных или экспериментальных зависимостей. В конечном итоге хотелось бы получить в результате моделирования такую цепочку сведений «исходные материалы – режимы обработки и условия + геометрия – образец с новыми свойствами, также рассчитанными в рамках моделей». Пример «пробных» результатов в этом направлении кратко описан в разделе 7 настоящей статьи.

### 5. Химическая кинетика

Химические превращения, протекающие в зоне обработки, могут как сопутствовать основному процессу (например, лимитируя процессы растворения, приводя к образованию переходных слоев и т. п.), так и быть определяющими в формировании

свойств покрытий и поверхностей. Если в первом случае зачастую можно учесть тепловыделение и теплопоглощение в ходе реакций и наличие соответствующих стадий за счет изменения эффективных свойств или технологических параметров (например, как это делается в теплофизических моделях сварочных процессов), то во втором случае необходим анализ кинетики превращения в полном объеме. Здесь при построении моделей появляются трудности иного характера: для большинства химических и фазовых превращений, наблюдаемых или применяемых в процессах обработки, кинетические данные неизвестны или данные разных авторов существенно различаются. В [17–19] использован классический подход, опирающийся на химическую термодинамику и позволяющий пользоваться при формулировке любых моделей стандартными таблицами. Возможности известных термодинамических пакетов и связанные с ними проблемы обсуждаются, например, в [20]. Но ничего иного, к сожалению, пока предложить не удается.

В качестве примера приведем некоторые результаты исследования модели синтеза материала

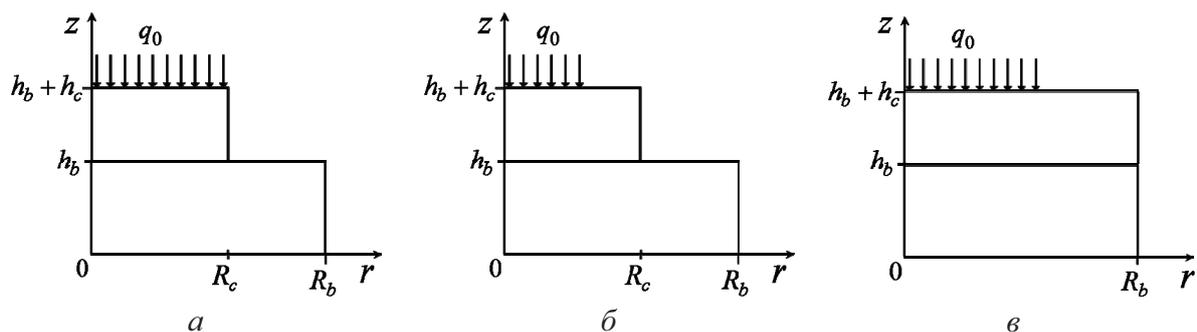
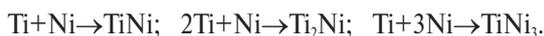


Рис. 2. Иллюстрации к организации первого (а), второго (б), третьего (в) режимов синтеза

на подложке цилиндрической формы в условиях регулируемого нагрева электронным пучком. Математическая модель соответствует рис. 2 и включает подзадачи теплопроводности и химической кинетики, которые здесь не приводим.

Кинетическая задача записана в соответствии с диаграммой состояния системы Ti-Ni в области атомных концентраций, интересных с практической точки зрения, и соответствует системе реакций:



Исследованы следующие варианты организации процесса, когда диаметр прессовки  $2R_c$ :

- меньше диаметра подложки  $2R_c < 2R_b$ , и внешний источник нагревает только поверхность прессовки, т. е.  $R = R_c$ . Начальная температура основы  $T_w = 1073$  К. Нагрев прекращается, если средняя температура прессовки достигает  $T_s = 1073$  К (рис. 2, а);
- меньше диаметра подложки  $2R_c < 2R_b$ , а поверхность прессовки нагревается постоянным источником, меньшего размера (рис. 2, б);
- равен диаметру основы  $2R_c = 2R_b$ , поверхность прессовки нагревается постоянным источником, меньшего размера (рис. 2, в).

Результатом каждого расчета является поле температуры в заданные моменты времени, динамика изменения максимальной температуры, распределение мольных и массовых концентраций химических соединений, атомных концентраций свободных и связанных элементов в заданные произвольные моменты времени, а также изменение во времени среднеинтегральных концентраций всех веществ и тепловыделения (поглощения тепла) в химических реакциях. В качестве примера далее на рисунках показаны пространственное распределение титана (рис. 3) в прессовке в процессе синтеза соответствующего второму режиму синтеза (в различные моменты времени, титан расходуется) и изменение во времени среднеинтегральных концентраций титана (верхняя строка на рис. 4) и TiNi (нижняя строка на этом же рисунке) для разных условий организации процесса. Как видно, динамика процесса существенно зависит от условий

иницирования реакции. Перегибы на концентрационных кривых связаны с подключением реакций в разных частях образца.

В любом случае состав покрытия (прессовки) после синтеза оказывается неоднородным. Но, варьируя параметры электронно-лучевого воздействия и условия нагрева, можно найти такие условия организации процесса, что неоднородностью фазового состава после синтеза можно будет пренебречь [21].

## 6. Остаточные напряжения

Вопрос об оценке механических напряжений в зоне обработки является весьма актуальным. Известные в механике подходы к оценке остаточных напряжений, вообще говоря, не дают представления о том, с какими необратимыми процессами они связаны. На практике же важно знать, как изменяются напряжения в зоне обработки при изменении технологических параметров, состава обрабатываемых слоев и сопутствующих физико-химических превращений. В этом случае плодотворным оказывается путь, основанный на термодинамике необратимых процессов, вернее, ее обобщении на деформируемые среды с химическими превращениями и диффузией. Подробно обобщение модели механики с использованием идей термодинамики описано, например, в [22, 23]. Примеры моделей технологических процессов, где используется этот подход, представлены в [24].

## 7. Оценка механических свойств обработанных поверхностей

В серии публикаций [9, 17, 25] и др. представлены частные варианты модели технологического процесса электронно-лучевой обработки поверхности металлов с использованием модифицирующих частиц [26]. В ванну расплава, формирующуюся за движущимся источником энергии, соответствующим сканирующему электронному лучу и перемещающейся в перпендикулярном направлении плоской детали, поступают частицы, свойства и состав которых могут быть различными (что зависит от целей обработки). Частицы могут растворяться

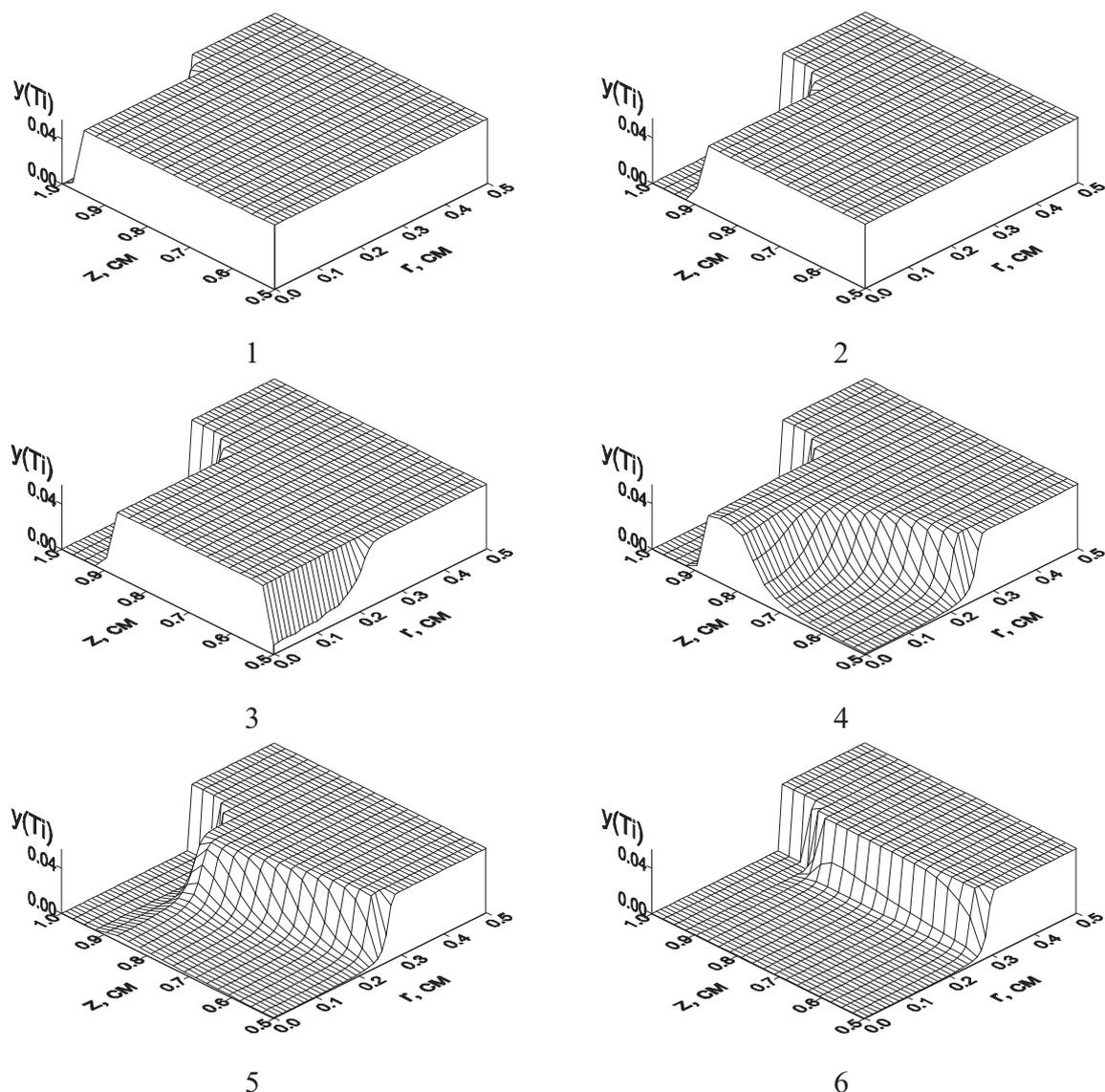


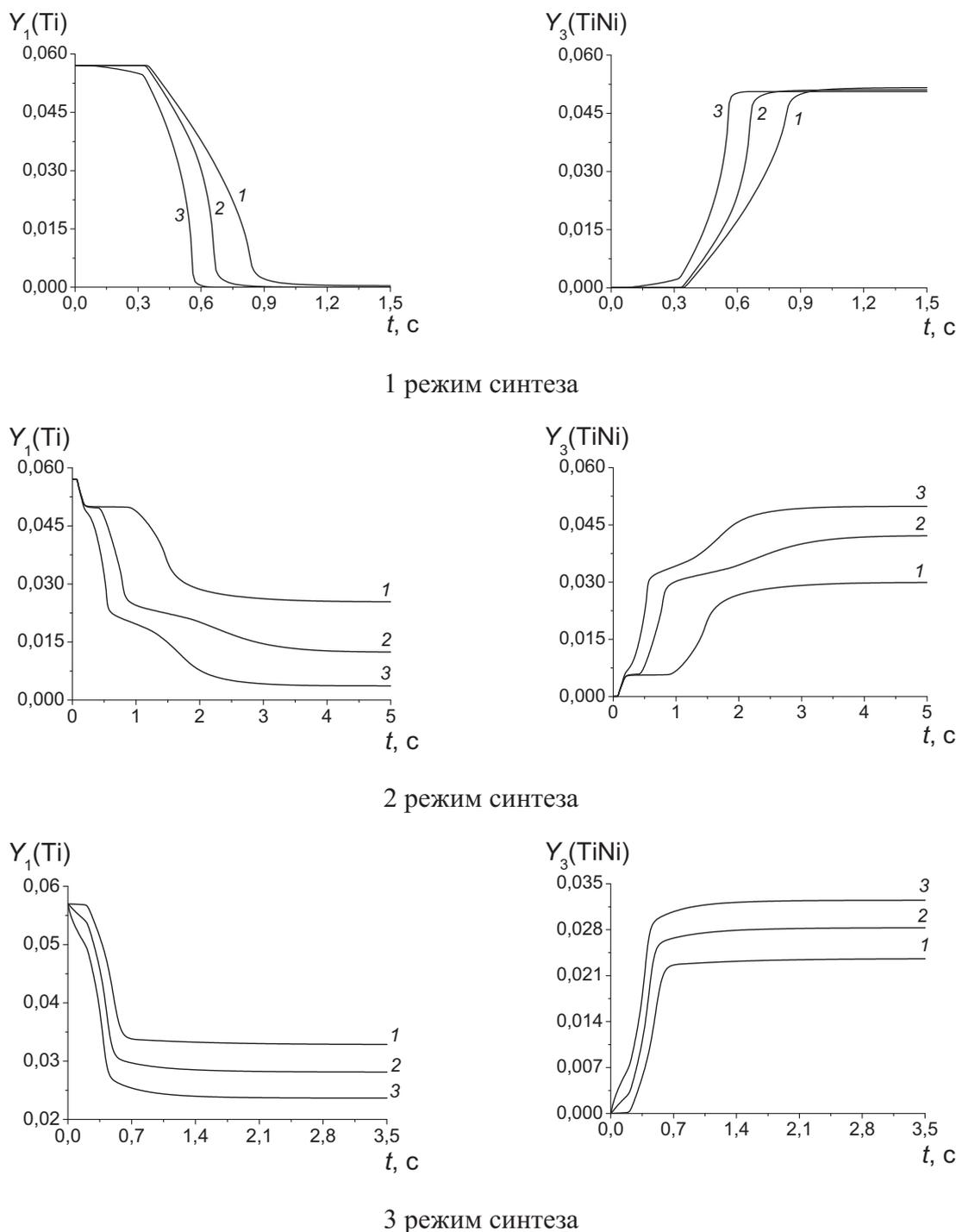
Рис. 3. Пространственное распределение титана в прессовке в различные моменты времени  $t$ : 1) 0,1; 2) 0,6; 3) 0,8; 4) 1,4; 5) 1,6; 6) 3,0 с

полностью или частично, вступать в химические превращения или поглощать тепло и быть центрами кристаллизации.

Установлено, что в случае частично растворимых частиц в зависимости от технологических параметров возможно образование как композиционного, так и однородного (гомогенного) модифицированного поверхностного слоя. Вследствие изменения в ходе процесса химического состава поверхностного слоя (образования, например, непрерывного ряда растворов), причем различным образом в разных частях поверхности (что зависит от различных условий нагрева и охлаждения), меняются не только температура кристаллизации, эффективная теплоемкость, но и результирующие механические свойства.

На рис. 5–7 представлен пример, иллюстрирующий возможность оценки области изменения модуля упругости в результате модификации поверхности. Расчет проведен для системы никель-медь. Некоторые технологические параметры намеренно выбраны так, чтобы результаты были видны как можно более четко:  $V=1$  см/с (скорость движения источника),  $k_0=0,8 \cdot 10^4$  1/с,  $q_0=4200$  Вт/см<sup>2</sup>,  $q_{m0}=1,5$  1/с (константа растворения, максимальная плотность мощности, расход частиц),  $h_0=h_p=5$  см (ширина сканирования и ширина области, в которую попадают частицы).

Так, рис. 5 дает представление о форме ванны расплава (темно-серый цвет) и зоны термического влияния (средняя область) для двух различных мо-



**Рис. 4.** Зависимость интегральных концентраций от времени для различных значений начальной температуры основы  $T_{и}$ : 1) 1073; 2) 1273; 3) 1473 К

ментов времени. Частичное растворение частиц иллюстрируют поверхности на рис. 6 для тех же моментов времени. Рис. 7 дает верхнюю и нижнюю оценку для эффективного модуля упругости в обработанной к моменту  $t=10$  с области. Учитывая, что растворение или структурообразование может

протекать и в процессе остывания образца, а сам процесс термической обработки может быть многопроходным, в результате подобных расчетов можем описать эволюцию модуля упругости при варьировании технологических параметров в данном диапазоне.

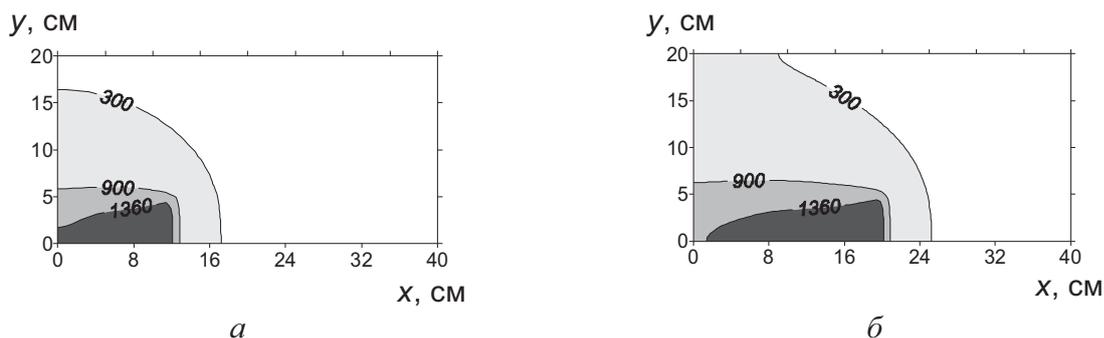


Рис. 5. Поле температуры в моменты времени  $t$ : а) 10; б) 18 с

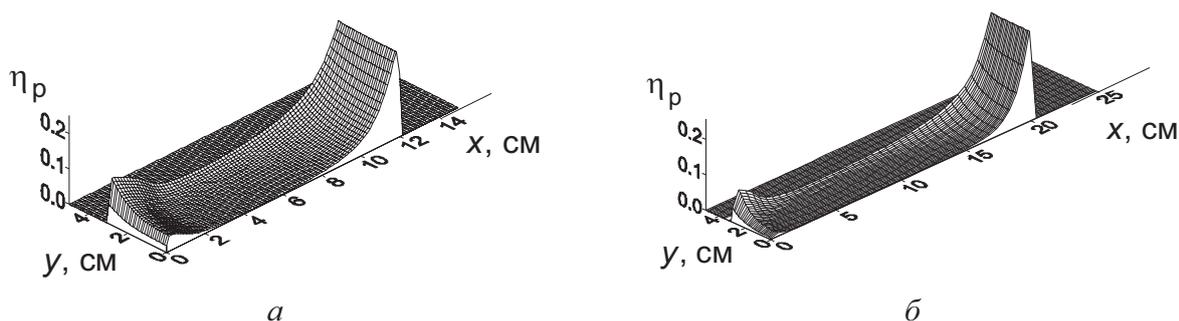


Рис. 6. Доля нерастворившихся частиц в моменты времени  $t$ : а) 10; б) 18 с

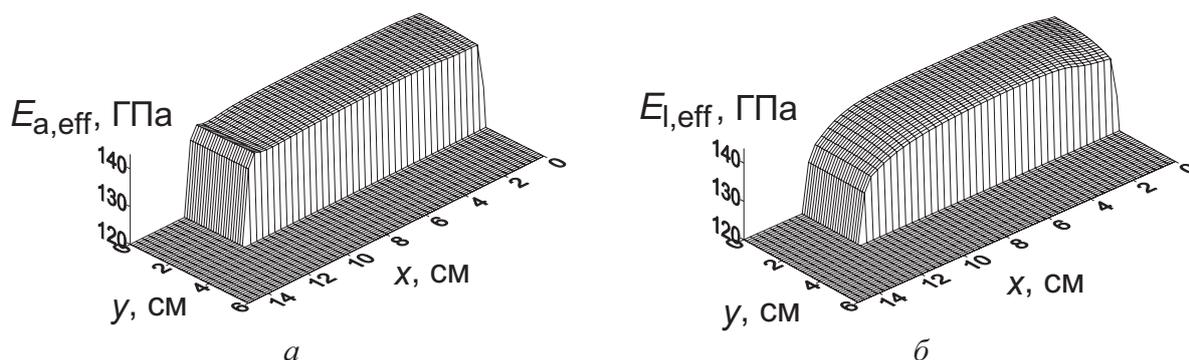


Рис. 7. Модуль упругости в зоне обработки. Оценка: а) верхняя; б) нижняя

### Выводы

1. Дано представление о развиваемом авторами подходе к моделированию технологических процессов поверхностной обработки материалов и нанесения покрытий, а также возникающих при этом проблемах.
2. Для подробного описания необратимых физико-химических явлений, приводящих к изменению свойств материалов в процессе синтеза и обработки, предложены модели технологических процессов, основанные на неравновесной термодинамике.
3. Все предложенные модели используют опыт, накопленный в макрокинетике и химико-технологическом моделировании, и позволяют в отличие от чисто теплофизических моделей изучать в динамике то, что обычно скрыто от глаз экспериментаторов.
4. Результаты численного моделирования по определению химического и фазового состава поверхностных слоев и синтезированных материалов можно использовать для оценки механических, теплофизических и иных свойств.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Zhou B.L. Some non-equilibrium thermophysical problems to be studied in materials processing // *Material Science and Engineering*. – 2000. – V. A292. – P. 133–141.
2. Постольник Ю.С., Тимошпольский В.И., Андрианов Д.Н., Ратников П.Э. Инженерные методы расчетов различных режимов нагрева термомассивных объектов в металлургических технологиях в условиях противотока 1. Состояние вопроса. Конвективный нагрев // *Инженерно-физический журнал*. – 2004. – Т. 77. – № 3. – С. 3–12.
3. Постольник Ю.С., Тимошпольский В.И., Андрианов Д.Н., Трусова И.А. Инженерные методы расчетов различных режимов нагрева термомассивных объектов в металлургических теплотехнологиях в условиях противотока. 2. Радиационный и радиационно-конвективный противоточный нагрев // *Инженерно-физический журнал*. – 2004. – Т. 77. – № 6. – С. 3–10.
4. Головин А.А., Солоненко О.П. Нестационарный сопряженный теплообмен и фазовые превращения при высокоэнергетической обработке поверхности. Ч. 1. Вычислительный метод и его реализация // *Теплофизика и аэромеханика*. – 2007. – Т. 14. – № 3. – С. 413–428.
5. Солоненко О.П., Головин А.А. Нестационарный сопряженный теплообмен и фазовые превращения при высокоэнергетической обработке поверхности. Ч. 2. Моделирование технологических процессов // *Теплофизика и аэромеханика*. – 2007. – Т. 14. – № 4. – С. 623–638.
6. Ковалев О.Б., Оришич А.М., Петров А.П. и др. Моделирование фронта плавления и разрушения пленки расплава при газолазерной резке металлов // *Прикладная механика и техническая физика*. – 2004. – Т. 45. – № 1. – С. 162–172.
7. Шукин В.Г., Марусин В.В. Моделирование энергопоглощения в стали мощными высокочастотными импульсами различной частоты // *Прикладная механика и техническая физика*. – 2004. – Т. 45. – № 6. – С. 154–168.
8. Тихонов А.Н., Кальнер В.Д., Гласко В.Б. Математическое моделирование технологических процессов и метод обратных задач в машиностроении. – М.: Машиностроение, 1990. – 264 с.
9. Князева А.Г., Поболь И.Л., Гордиенко А.И. и др. Моделирование теплофизических и физико-химических процессов, сопровождающих формирование покрытий в электронно-лучевых технологиях модификации поверхностей металлических материалов // *Физическая мезомеханика*. – 2007. – Т. 10. – № 5. – С. 105–119.
10. Шипко А.А., Поболь И.Л., Урбан И.Г. Упрочнение сталей и сплавов с использованием электронно-лучевого нагрева. – Минск: Наука и техника, 1995. – 280 с.
11. Лотков А.И., Псахье С.Г., Князева А.Г. и др. Наноинженерия поверхности. Формирование неравновесных состояний в поверхностных слоях материалов методами электронно-ионно-плазменных технологий. – Новосибирск: Изд-во СО РАН, 2008. – 276 с.
12. Гегузин Я.Е. Диффузионная зона. – М.: Наука, 1979. – 344 с.
13. Бокштейн С.З. Диффузия и структура металлов. – М.: Металлургия, 1973. – 208 с.
14. Романков П.Г., Рашковская Н.Б., Фролов В.Ф. Массообменные процессы в химической технологии (системы с твердой фазой). – Л.: Химия, 1975. – 336 с.
15. Букрина Н.В., Князева А.Г. Алгоритм численного решения задач неизотермической диффузии, встречающихся в процессах поверхностной обработки // *Физическая мезомеханика*. – 2006. – Т. 9. – № 2. – С. 55–62.
16. Букрина Н.В., Князева А.Г. Моделирование формирования диффузионной зоны при импульсной электронно-лучевой обработке материала с покрытием // *Известия Томского политехнического университета*. – 2007. – Т. 310. – № 1. – С. 91–95.
17. Крюкова О.Н. Численное исследование модели электронно-лучевой наплавки покрытий с модифицирующими частицами с учетом физико-химических превращений // *Известия Томского политехнического университета*. – 2006. – Т. 309. – № 6. – С. 120–125.
18. Сорокова С.Н., Князева А.Г. Моделирование формирования фазовой структуры покрытия в процессе электронно-лучевой обработки с использованием синтеза в твердой фазе // *Теоретические основы химической технологий*. – 2008. – Т. 42. – № 4. – С. 457–465.
19. Sorokova S.N., Knyazeva A.G. Modeling of coating modification using condensed phase synthesis // *Nonequilibrium Processes in Combustion and Plasma Based Technologies: Book of reports of the Intern. Workshop*. – Minsk, 2008. – P. 65–69.
20. Белов Г.В. Термодинамическое моделирование: методы, алгоритмы, программы. – М.: Научный Мир, 2002. – 184 с.
21. Сорокова С.Н., Князева А.Г. Моделирование синтеза интерметаллида на подложке цилиндрической формы // *Физическая мезомеханика*. – 2009. – Т. 12. – № 5. – С. 77–90.
22. Князева А.Г. О моделировании необратимых процессов в материалах с большим числом внутренних поверхностей // *Физическая мезомеханика*. – 2003. – Т. 6. – № 5. – С. 11–27.
23. Князева А.Г. Диффузия и реология в локально-равновесной термодинамике // В сб.: *Математическое моделирование систем и процессов* / под ред. П.В. Трусова. – Пермь: Изд-во ПермГТУ, 2005. – С. 45–60.
24. Букрина Н.В., Князева А.Г. Об оценке механических напряжений в материале с покрытием в условиях ионной бомбардировки // *Физическая мезомеханика*. – 2008. – Т. 11. – № 5. – С. 95–102.
25. Крюкова О.Н., Князева А.Г. Критические явления при растворении частиц в ванне расплава в процессе электронно-лучевой наплавки покрытий // *Прикладная механика и техническая физика*. – 2007. – Т. 48. – № 1. – С. 131–142.
26. Белюк С.И., Панин В.Е. Электронно-лучевая порошковая металлургия в вакууме: оборудование, технология и применение // *Физическая мезомеханика*. – 2002. – Т. 5. – № 1. – С. 99–104.

*Поступила 03.11.2009 г.*