

doi: 10.32620/oikit.2026.108.06

УДК 538.95

Ю. В. Широкий, О. Д. Семененко

Дослідження температурних полів і термонапружень у інструментальному матеріалі Н13А при фемтосекундній лазерній обробці

Національний аерокосмічний університет «Харківський авіаційний інститут»

У роботі проведено теоретичне моделювання процесу формування наноструктур інструментального матеріалу Н13А під впливом фемтосекундного лазерного випромінювання з урахуванням технологічних параметрів: густини теплового потоку ($q = 10^8\text{--}10^{11}$ Вт/м²) та часу дії імпульсу ($10^{-16}\text{--}10^{-10}$ с). Дослідження базувалося на порівнянні двох методів задання теплофізичних і термомеханічних характеристик матеріалів – квантово-механічного, що враховує дискретну атомну структуру, та стохастичного, орієнтованого на ймовірнісні розподіли.

Моделювання температурних полів, швидкостей їхньої зміни та температурних напружень на різних глибинах виконувалося за допомогою чисельних методів, адаптованих до екстремальних режимів нагріву та охолодження. Результати показали, що при квантово-механічному підході значення температур і швидкостей наростання температур (V) суттєво вищі, ніж при стохастичному, особливо для високих q (понад 10^{10} Вт/м²) та коротких часів ($10^{-16}\text{--}10^{-14}$ с). Характер розподілу температурних напружень виявив високу неоднорідність: максимуми при $q \approx 10^9$ Вт/м² (завдяки піковим градієнтам) та мінімуми при $q \approx 10^{10}$ Вт/м², що сприяє фазовим переходам і самоорганізації наноструктур. Показано, що при часах $10^{-10}\text{--}10^{-12}$ с напруження можуть самостійно ініціювати наноструктуризацію, тоді як у решті випадків вони прискорюють процес. Квантово-механічний метод демонструє переваги в точності прогнозування екстремальних режимів, забезпечуючи вищі піки напружень і температур, що критично для аморфізації та ультрадисперсних фаз. Водночас стохастичний підхід дає консервативніші оцінки, придатні для скринінгу. Аналіз підкреслює, що для валідації моделі недостатньо температурних даних; ключовим є порівняння об'ємів наноструктур (кластерів), отриманих експериментально та теоретично, з використанням атомно-силової мікроскопії, рентгенівської дифракції та спектроскопії. Інтеграція методів у гібридну модель дозволить оптимізувати параметри лазерної обробки для створення матеріалів з підвищеною зносостійкістю, корозійною стійкістю та біосумісністю. Результати відкривають перспективи для промислового застосування у авіаційній, автомобільній, медичній та інших галузях. Подальші роботи спрямовані на експериментальну верифікацію та масштабування технології.

Ключові слова: фемтосекундний лазер, наноструктури, ріжучий інструмент, наноструктурні шари, температурні напруження, квантово-механічне моделювання, стохастичний метод, теплофізичні характеристики.

Вступ

Сучасні виклики машинобудування – від авіаційно-космічної техніки до важкого обладнання – вимагають матеріалів і покриттів, здатних працювати в екстремальних умовах: високі температури, агресивні середовища, циклічні навантаження. Традиційні методи (термообробка, напилення, лазерне легування) вже вичерпують свій потенціал, тоді як комбіновані підходи зміцнення відкривають принципово нові можливості.

У сучасному машинобудуванні та металообробці різальний інструмент відіграє ключову роль у забезпеченні високої продуктивності та якості продукції. Зносостійкість інструментів безпосередньо впливає на ефективність виробничих

процесів, знижуючи витрати на заміну та простої обладнання. За даними статистики, знос різального інструменту становить до 30% загальних витрат у промисловості, що робить актуальним пошук інноваційних методів підвищення його довговічності. Одним із перспективних напрямків є нанесення зносостійких покриттів на інструментальну основу, таких як нітриди титану (TiN), хрому (TiCrN) та інші багатошарові композиції, які захищають поверхню від абразивного зносу, термічних навантажень та корозії.

Розвиток лазерних технологій у останні десятиліття відкрив нові можливості для модифікації матеріалів. Лазерна фемтосекундна обробка, зокрема імпульсна, дозволяє локально впливати на поверхневі шари, змінюючи їхню мікроструктуру без значного нагріву всього виробу. Це робить її ідеальним інструментом для післяпокриттєвої обробки, де традиційні методи, як термічна обробка чи механічне шліфування, можуть призводити до деформацій або втрати адгезії. Сучасні лазерні системи з регульованою густиною потужності (від кількох до десятків кВт/см²) забезпечують точний контроль процесів, що підтверджується численними дослідженнями в галузі матеріалознавства [1-16].

Сучасний рівень розвитку лазерних технологій визнає фемтосекундну лазерну обробку як перспективний метод впливу на поверхневі шари інструментальної основи. Можливість застосування лазерного випромінювання для зміцнення матеріалу зносостійкого покриття описана в дослідженні [9]. За результатами експериментів, поверхнева структура покриття TiN після лазерної обробки з густиною потужності 40 кВт/см² набуває більш рівномірного вигляду, зменшується кількість поверхневих дефектів, формується псевдоаморфна структура. Густина потужності одиночного лазерного імпульсу значно впливає на період стійкості інструменту, причому ця залежність має екстремальний характер з максимумом у діапазоні 30–45 кВт/см². Наприклад, обробка інструменту з покриттям кількома імпульсами (3–5 імпульсів) з поступовим збільшенням густини потужності від 5 до 35 кВт/см² дозволяє зменшити розкид періоду стійкості на 30–50% і підвищити його середнє значення на 10–20% порівняно з інструментом, обробленим одним імпульсом [7].

На основі аналізу літературних джерел можна дійти висновку про доцільність використання лазерної обробки як способу зміцнення матеріалу зносостійкого покриття. Зокрема, двоїстість впливу лазерного випромінювання на покриття різного складу продемонстрована в роботі [2-7]. Отже, лазерне випромінювання позитивно впливає на термодинамічно стабільні покриття (наприклад, TiCrN). З іншого боку, лазерна обробка покриття TiN, навпаки, спричиняє руйнування зв'язків між атомами титану та азоту з виділенням молекул останнього, що призводить до менш вираженої трансформації мікроструктури.

Імпульсна лазерна обробка на поверхні твердосплавного різального інструменту з покриттям викликає зміни в його структурних характеристиках [2-8]. Період кристалічної ґратки покриття зменшується, що вказує на формування щільнішої кристалічної структури. Зростання густини потужності лазерної обробки призводить до викривлення кристалічної ґратки та дезорієнтації мікрооб'ємів матеріалу покриття, про що свідчить розширення напівширини рентгенівської лінії та зниження інтенсивності лінії, а також зменшення величини залишкових стискаючих напружень. Це пов'язано з релаксацією напруженого стану на межі «покриття – інструментальна основа» внаслідок лазерного нагріву.

Застосування лазерної обробки для двоелементних покриттів викликає сильніше зниження залишкових стискаючих напружень порівняно з

одноеlementними. Зміни параметрів мікроструктури покриттів на твердосплавній основі менш помітні, ніж на швидкорізальній, оскільки структура твердого сплаву не зазнає значних перетворень. Лазерна обробка швидкорізального інструменту з покриттям спричиняє зміни кристалічної структури на межі «покриття–інструментальна основа». Трансформація мікроструктури матеріалу покриттів після лазерної обробки призводить до покращення механічних властивостей. Наприклад, мікротвердість таких покриттів зростає на 10–16% залежно від їхнього складу [4].

Із підвищенням густини потужності лазерної обробки до певних меж адгезійна міцність покриття посилюється, про що свідчить коефіцієнт відшарування [11]. Такий ефект лазерної обробки пов'язаний з релаксацією напружень на межі «покриття–інструментальна основа». Зростання коефіцієнта відшарування при густинах потужності лазерної обробки понад оптимальні значення пояснюється або оплавленням інструменту з швидкорізальної сталі та зниженням його твердості, або інтенсивним утворенням тріщин у твердому сплаві [7]. Використання оптимальних значень густини потужності лазерної обробки сприяє зменшенню інтенсивності зносу різального інструменту, що пов'язано з підвищенням мікротвердості та посиленням адгезійної міцності покриття. Густина потужності лазерного випромінювання, за якої спостерігається мінімальна інтенсивність зносу різального інструменту з покриттями після лазерної обробки, зменшується в 1,5–1,9 рази залежно від складу покриття та оброблюваного матеріалу [4].

Незважаючи на значні досягнення, існують прогалини в розумінні впливу лазерної обробки на багат шарові покриття складного складу, зокрема в моделюванні температурних полів та напруженого стану. Це обумовлює необхідність подальших досліджень для оптимізації процесів, що дозволить розширити застосування лазерних технологій у промисловості. Метою цієї статті є аналіз у зоні дії лазерної фемтосекундної обробки на зносостійкі покриття різального інструменту, з акцентом на структурні зміни, механічні властивості та контактні процеси різання.

1. Постановка задачі

У сучасних умовах промислового виробництва, де вимоги до ефективності та довговічності різального інструменту постійно зростають, актуальною проблемою є підвищення зносостійкості інструментальних матеріалів. Традиційні методи нанесення покриттів, такі як хімічне або фізичне осадження з газової фази, забезпечують певний рівень захисту, але часто не враховують динамічні впливи під час експлуатації, що призводить до передчасного зносу, утворення тріщин та зниження адгезійної міцності на межі «покриття–основа». Особливо це стосується багат шарових покриттів складного складу, які застосовуються для обробки високолегованих сталей, титанових сплавів та інших важкооброблюваних матеріалів. Недостатня стійкість інструменту не тільки знижує продуктивність верстатного обладнання, але й збільшує витрати на заміну інструментів, що становить значну економічну проблему для підприємств машинобудування.

Лазерна обробка поверхні твердосплавного різального інструменту з покриттям викликає зміни в його структурних характеристиках [2–9]. Період кристалічної ґратки покриття зменшується, що вказує на формування щільнішої кристалічної структури. Зростання густини потужності фемтосекундного лазера

призводить до викривлення кристалічної ґратки та дезорієнтації мікрооб'ємів матеріалу покриття, про що свідчить розширення напівширини рентгенівської лінії та зниження інтенсивності лінії, а також зменшення величини залишкових стискаючих напружень. Це пов'язано з релаксацією напруженого стану на межі «покриття–інструментальна основа» внаслідок лазерного нагріву [8].

Застосування лазерної обробки для двоелементних покриттів викликає сильніше зниження залишкових стискаючих напружень порівняно з одноелементними. Зміни параметрів мікроструктури покриттів на твердосплавній основі менш помітні, ніж на швидкорізальній, оскільки структура твердого сплаву не зазнає значних перетворень. Лазерна обробка швидкорізального інструменту з покриттям спричиняє зміни кристалічної структури на межі «покриття–інструментальна основа». Трансформація мікроструктури матеріалу покриттів після лазерної обробки призводить до покращення механічних властивостей. Наприклад, мікротвердість таких покриттів зростає на 10–16% залежно від їхнього складу. Із підвищенням густини потужності лазерної обробки до певних меж адгезійна міцність покриття посилюється, про що свідчить коефіцієнт відшарування [7].

Такий ефект лазерної обробки пов'язаний з релаксацією напружень на межі «покриття–інструментальна основа». Зростання коефіцієнта відшарування при густинах потужності фемтосекундного лазера понад оптимальні значення пояснюється або оплавленням інструменту з швидкорізальної сталі та зниженням його твердості, або інтенсивним утворенням тріщин у твердому сплаві [11]. Використання оптимальних значень густини потужності фемтосекундного лазера сприяє зменшенню інтенсивності зносу ріжучого інструменту, що пов'язано з підвищенням мікротвердості та посиленням адгезійної міцності покриття. Густина потужності лазерного випромінювання, за якої спостерігається мінімальна інтенсивність зносу ріжучого інструменту з покриттями після лазерної обробки, зменшується в 1,5–1,9 раза залежно від складу покриття та оброблюваного матеріалу [3].

Лазерна обробка суттєво впливає на контактні параметри процесу різання, при цьому ступінь цього впливу залежить від складу покриття, матеріалів, що обробляються, інструментальної бази та режимів технологічної обробки. Ключовим завданням при застосуванні лазерної обробки є вибір оптимальних технологічних режимів. Огляд досліджень [1–7] демонструє, що для покриттів різного складу та будови такий вибір здійснюється переважно через експериментальні випробування.

На сьогодні існують дослідження, де робляться спроби аналітично визначити режими лазерної обробки для системи «покриття–підкладка» [2-9]. Водночас математичні моделі здебільшого обмежуються одношаровими покриттями, де моделювання зводиться лише до розрахунку температурних полів у покритті та основі, без урахування ефектів лазерної обробки на трансформацію властивостей покриття, основи та їхньої адгезійної міцності. Аналіз температурних полів у покритті проводиться окремо від вивчення змін напруженого стану, який є критичним показником для оцінки ефективності як самого покриття, так і різального інструменту з покриттям загалом. Бракує даних щодо впливу комбінованої обробки на контактні процеси під час експлуатації різального інструменту з покриттям [17-19].

Огляд досліджень, присвячених вивченню ефектів додаткового енергетичного впливу за допомогою лазерної обробки на продуктивність

твердосплавного різального інструменту, дає змогу виділити такі недоліки та відкриті питання: бракує даних про оптимізацію параметрів лазерної обробки, а також конструкції та структури багат шарових покриттів складного складу; асортимент досліджуваних типів покриттів вкрай обмежений; відсутні математичні моделі для оцінки та аналізу впливу лазерної обробки на структурні параметри й механічні характеристики багат шарових покриттів, а також для визначення її оптимальних технологічних налаштувань; не вивчено закономірності трансформацій контактних процесів та зношування різального інструменту з багат шаровими покриттями після лазерної обробки; не визначено сфери ефективного використання інструменту після імпульсної лазерної обробки.

Виходячи з викладеного, постановка задачі полягає в розробці комплексного підходу до оптимізації імпульсної лазерної обробки для багат шарових зносостійких покриттів на різальному інструменті. Основні цілі дослідження включають: аналіз впливу параметрів лазерної обробки на мікроструктуру та механічні властивості покриттів; створення математичних моделей для прогнозування температурних полів і напруженого стану в системі «покриття–основа»; експериментальне визначення оптимальних режимів обробки для підвищення адгезійної міцності та зменшення зносу; оцінку контактних процесів різання після лазерної обробки. Розв'язання цих задач дозволить підвищити ефективність інструменту на 20–30%, що матиме практичне значення для галузей авіабудування, автомобілебудування та точного машинобудування.

2. Дослідницька частина

Робота ґрунтується на результатах експериментальних і теоретичних досліджень, виконаних у межах наукової школи Г. І. Костюка, а також на узагальненні й критичному аналізі праць провідних учених у галузі створення високоефективних деталей машин і різального інструменту. Проведений огляд наукових джерел підтверджує доцільність застосування різальних інструментів із зносостійкими покриттями. Покриття, такі як нітрид титану (TiN) та його модифікації, значно підвищують стійкість інструменту до абразивного зносу, термічних навантажень і корозії, що підтверджується численними експериментальними даними [1–5]. Проте в багатьох випадках експлуатаційні характеристики такого інструменту не відповідають сучасним вимогам машинобудівного комплексу, особливо при обробці високолегованих сталей, титанових сплавів та композитних матеріалів. Це пов'язано з обмеженою адгезійною міцністю на межі «покриття–основа», утворенням мікротріщин під час циклічних навантажень та недостатньою термостабільністю покриттів. Крім того, технологічний потенціал традиційних одно- та багат елементних, одно- та багат шарових покриттів на основі нітриду титану практично вичерпано, оскільки подальше ускладнення їхнього складу не призводить до пропорційного зростання продуктивності. У зв'язку з цим набуває актуальності науково-технічна проблема пошуку інноваційних технологій та засобів для підвищення працездатності різальних інструментів із зносостійкими покриттями, що дозволить оптимізувати виробничі процеси та зменшити економічні втрати.

Одним із радикальних підходів до розв'язання цієї проблеми є додаткова зміцнювальна обробка різальних інструментів із зносостійкими покриттями, спрямована на модифікацію фізико-механічних властивостей самого покриття та

посилення адгезійних зв'язків між зносостійким шаром і інструментальною основою. Серед усіх видів зміцнювальної обробки особливе місце посідає лазерна обробка яка є універсальним засобом підвищення працездатності інструментів будь-яких типорозмірів із покриттями різного складу та структури. Лазерне випромінювання дозволяє локально нагрівати поверхневі шари до високих температур (до 1000–2000 °С) за мілісекунди, викликаючи фазові перетворення, релаксацію напружень і формування щільнішої мікроструктури без значного впливу на об'єм матеріалу. Широке поширення лазерних систем, таких як Nd:YAG або CO₂-лазери з регульованою густиною потужності (від 10 до 50 кВт/см²), робить лазерну обробку доступною для зміцнення різноманітного різального інструменту з зносостійкими покриттями, включно з тими, що мають складну геометрію різальної кромки. Наприклад, у промислових умовах імпульсна лазерна обробка вже застосовується для фрез і свердел, де спостерігається зростання стійкості на 15–25% [6–8].

Для розширення застосування лазерної обробки як зміцнювальної технології необхідно розв'язати низку наукових і практичних завдань. На сьогодні лазерна обробка переважно використовується для одношарових зносостійких покриттів, тоді як дані щодо багатшарових покриттів, які демонструють вищу ефективність порівняно з одношаровими (завдяки чергуванню шарів із різними властивостями, наприклад, TiN/AlTiN), у літературі відсутні [12].

Механізм трансформації властивостей зносостійких покриттів, зокрема багатшарових, після лазерної обробки до кінця не вивчено: неясно, як лазерне нагрівання впливає на міжшарові інтерфейси, дифузію атомів і формування дефектів. Відсутня інформація про закономірності взаємозв'язку параметрів лазерної обробки (густина потужності, тривалість імпульсу, кількість імпульсів) з механічними властивостями покриттів (мікротвердість, адгезійна міцність) та процесом зношування різального інструменту під час різання. Технологічні режими лазерної обробки в більшості робіт визначаються експериментально, що вимагає значних витрат ресурсів і часу. Існуючі математичні моделі для визначення цих режимів розроблено лише для інструментів з одношаровими покриттями, а для багатшарових вони відсутні. Крім того, ці моделі враховують лише температурний вплив лазерної обробки на різальний інструмент із зносостійкими покриттями, що достатньо для швидкорізальних інструментів [15].

Для твердосплавних інструментів необхідна оцінка напружень, що виникають під час лазерної обробки, оскільки вони можуть спричинити тріщини як у твердосплавній основі (наприклад, WC-Co), так і в зносостійкому покритті. Важливим аспектом при визначенні режимів лазерної обробки є теплофізичні властивості інструментального матеріалу (теплопровідність, теплоємність, коефіцієнт теплового розширення), які в відомих дослідженнях не розглядалися повною мірою [20].

Метою дослідження є підвищення працездатності твердосплавного різального інструменту шляхом застосування лазерної обробки. Реалізація поставлених завдань дозволить науково обґрунтувати перспективність подальшого розвитку та інтеграції нанотехнологій в сучасному машинобудуванні.

3. Результати розрахунків

Взаємодія лазерного випромінювання з поглинальними матеріалами у широкому діапазоні щільностей потужності ефективно описується тепловою моделлю. Відповідно до цієї моделі процес лазерної дії умовно можна поділити

на кілька послідовних стадій: поглинання енергії випромінювання та її передача кристалічній ґратці твердого тіла; нагрівання матеріалу без порушення його цілісності; руйнування матеріалу (абляція); а також охолодження після завершення лазерного впливу [16].

Визначення технологічних режимів лазерної обробки ґрунтується на аналізі температурних полів у об'ємі інструментальної композиції під час лазерної дії. Водночас висока локалізація та надзвичайно короткий характер теплопереносу при лазерній обробці істотно ускладнюють математичний опис процесу, особливо у випадку складних багат шарових покриттів. У низці аналогічних досліджень, зокрема в роботах [2-7], запропоновані математичні моделі є надмірно складними, що значно обмежує можливість отримання аналітичних або формалізованих розв'язків.

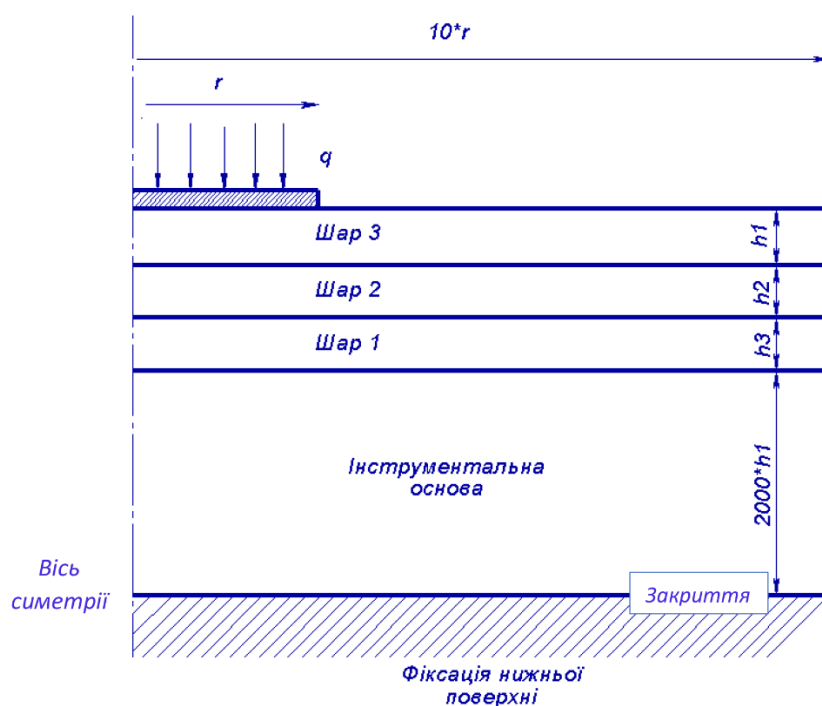


Рис. 1. Схема лазерного впливу на пластину різального інструмента

У низці практичних випадків, зокрема під час зміцнення інструменту шляхом комбінованої обробки з використанням лазерного випромінювання, виникає потреба у визначенні температурного розподілу в двошаровій композиційній системі. Актуальність розв'язання відповідної теплофізичної задачі зумовлена також тим, що наявні математичні моделі не охоплюють повного набору початкових і граничних умов, які б адекватно відображали процес теплопереносу в композиції за умов лазерного нагрівання. У даній роботі здійснено спробу більш повного врахування умов поширення тепла при лазерному впливі.

На рисунку 1 зображено процес лазерного впливу на пластину різального інструмента. Лазерне випромінювання, сформоване оптичною системою, фокусується на обмеженій ділянці поверхні пластилини, утворюючи зону локального теплового навантаження з високою щільністю потужності. У результаті поглинання енергії випромінювання в приповерхневому шарі

матеріалу виникає інтенсивний нагрів, що зумовлює формування температурного градієнта в напрямку від поверхні вглиб пластини.

Пластина різального інструмента подана у вигляді багатошарової композиції, яка складається з функціонального покриття та матеріалу основи. На межі розділу шарів відбувається перерозподіл теплових потоків відповідно до їхніх теплофізичних властивостей. Відведення тепла з поверхні пластини здійснюється за рахунок теплопровідності в об'єм матеріалу та конвективного теплообміну з навколишнім середовищем.

Схема також ілюструє характерні геометричні параметри лазерної обробки: діаметр лазерної плями, координатну систему, орієнтацію пластини та напрям поширення теплових потоків. Такий підхід дозволяє використовувати схему як основу для постановки теплофізичної задачі та подальшого аналізу температурного поля при лазерній обробці різального інструмента.

З огляду на надзвичайно малу тривалість стадії поглинання електромагнітного випромінювання (порядку $\sim 10^{-11}$ с) та незначну товщину приповерхневого шару, в якому відбувається поглинання лазерної енергії (приблизно $\sim (1-100)$ нм), можна вважати, що на поверхню опромінюваного тіла діє поверхнєве джерело тепла з просторовим розподілом густини потужності, яке описується таким співвідношенням:

$$q = q_0 \exp[-k(x - \xi)^2] \quad (1)$$

де q_0 – густина потужності в центрі лазерної плями, Вт/м²; k – коефіцієнт зосередженості випромінювання; ξ – координата центру теплового джерела, м; x – просторова змінна, м.

Припустимо, по-перше, що в момент часу $t=0$ на тіло діє миттєвий розподілений тепловий імпульс, а по-друге, що на його поверхнях реалізується конвективний теплообмін з навколишнім середовищем відповідно до закону Ньютона [18]. За таких умов задача зводиться до розв'язання відповідної системи диференціальних рівнянь теплопровідності.

$$\begin{cases} c_1 \rho_1 \frac{\partial T}{\partial t} = \lambda_1 \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right) \\ c_2 \rho_2 \frac{\partial T}{\partial t} = \lambda_2 \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right) \end{cases} \quad (2)$$

де c_1 та c_2 – відповідно питома теплоємність матеріалів покриття та основи, Дж/кг; ρ_1 та ρ_2 – густина матеріалів покриття та основи, кг/м³; λ_1 та λ_2 – коефіцієнти теплопровідності матеріалів покриття та основи, Вт/(м·°C);

Дослідження швидкості зміни температур залежно від густини теплового потоку на різних глибинах представлені на рисунках 2 (а- 10^{-10} , б- 10^{-12} , в- 10^{-14} , г- 10^{-16}). Показано, що характер зміни швидкостей зростання температур повністю відповідає характеру зміни самих температур від густини теплового потоку. У цьому випадку також для менших часів експозиції відмінність результатів значно збільшується. Незважаючи на те, що ці швидкості є високими та перевищують необхідні значення для формування наноструктур (10^7 К/с), все ж необхідно враховувати теплофізичні та термомеханічні способи задання параметрів процесу.

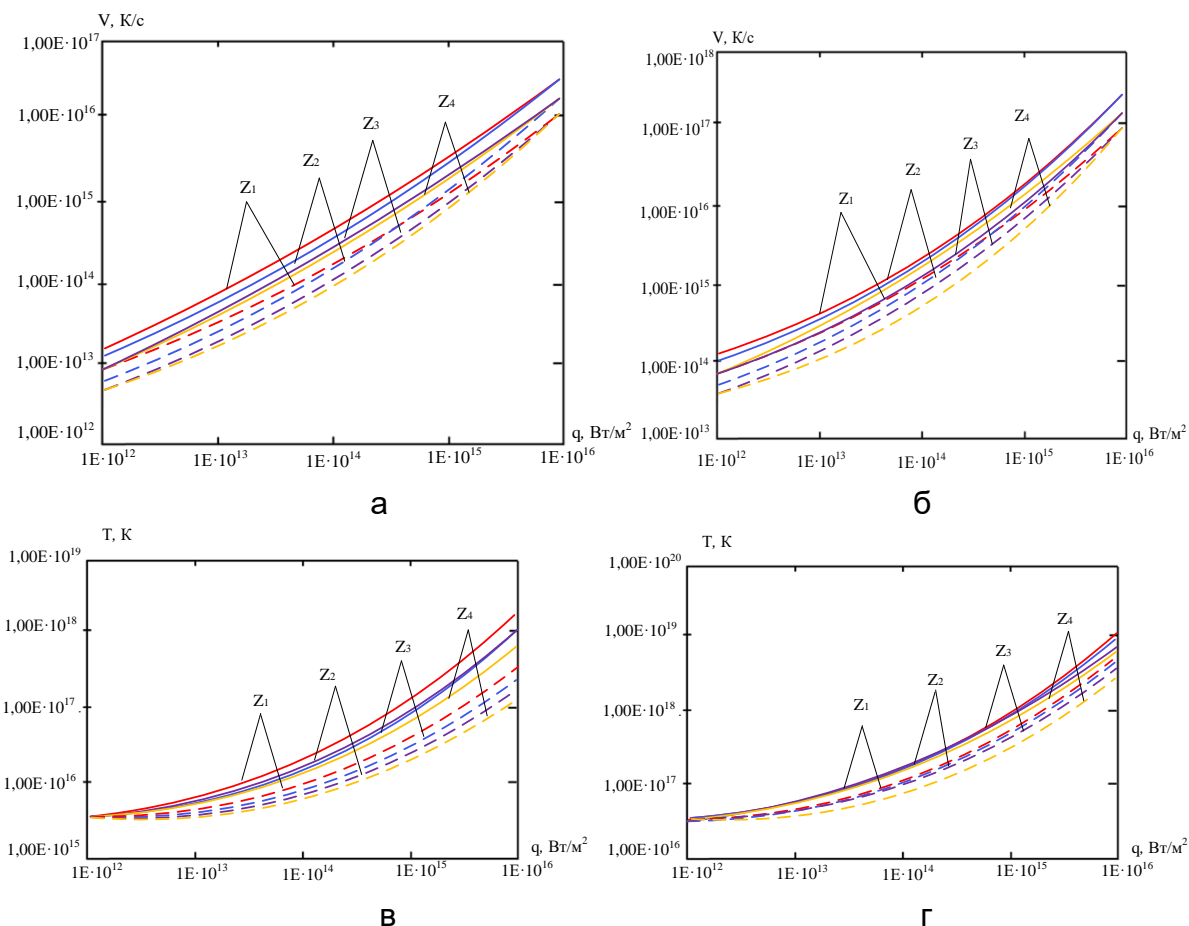


Рис. 2. Залежності швидкості зміни максимальної температури – V від густини теплового потоку q , що створюється лазерним випромінюванням, при різних часах його дії (а- 10^{-10} , б- 10^{-12} , в- 10^{-14} , г- 10^{-16} , с) та на різній глибині (1- $x=0$, 2- $x=x_1$, 3- $x=x_2$, 4- $x=x_3$) при різних способах задання теплофізичних і термомеханічних характеристик: _____ квантово-механічним методом, ----- стохастичним методом для інструментального матеріалу Н13А.

Крім того, аналіз цих залежностей підкреслює важливість комплексного підходу до моделювання теплових процесів. Теплофізичні властивості матеріалів, такі як теплопровідність, теплоємність і коефіцієнт теплового розширення, суттєво впливають на розподіл температурних градієнтів у глибину. Зі свого боку, термомеханічні способи задання, включаючи контроль механічних напружень, деформацій та фазових перетворень під час швидкого нагріву та охолодження, дозволяють уникнути небажаних дефектів структури, таких як тріщини чи пористість. Це особливо актуально для отримання наноструктур у металах та сплавах, де швидкості охолодження понад 10^7 K/c забезпечують аморфізацію або утворення ультрадисперсних фаз [19]. Таким чином, інтеграція цих факторів у розрахункові моделі підвищує точність прогнозування та оптимізує технологічні режими для промислового застосування.

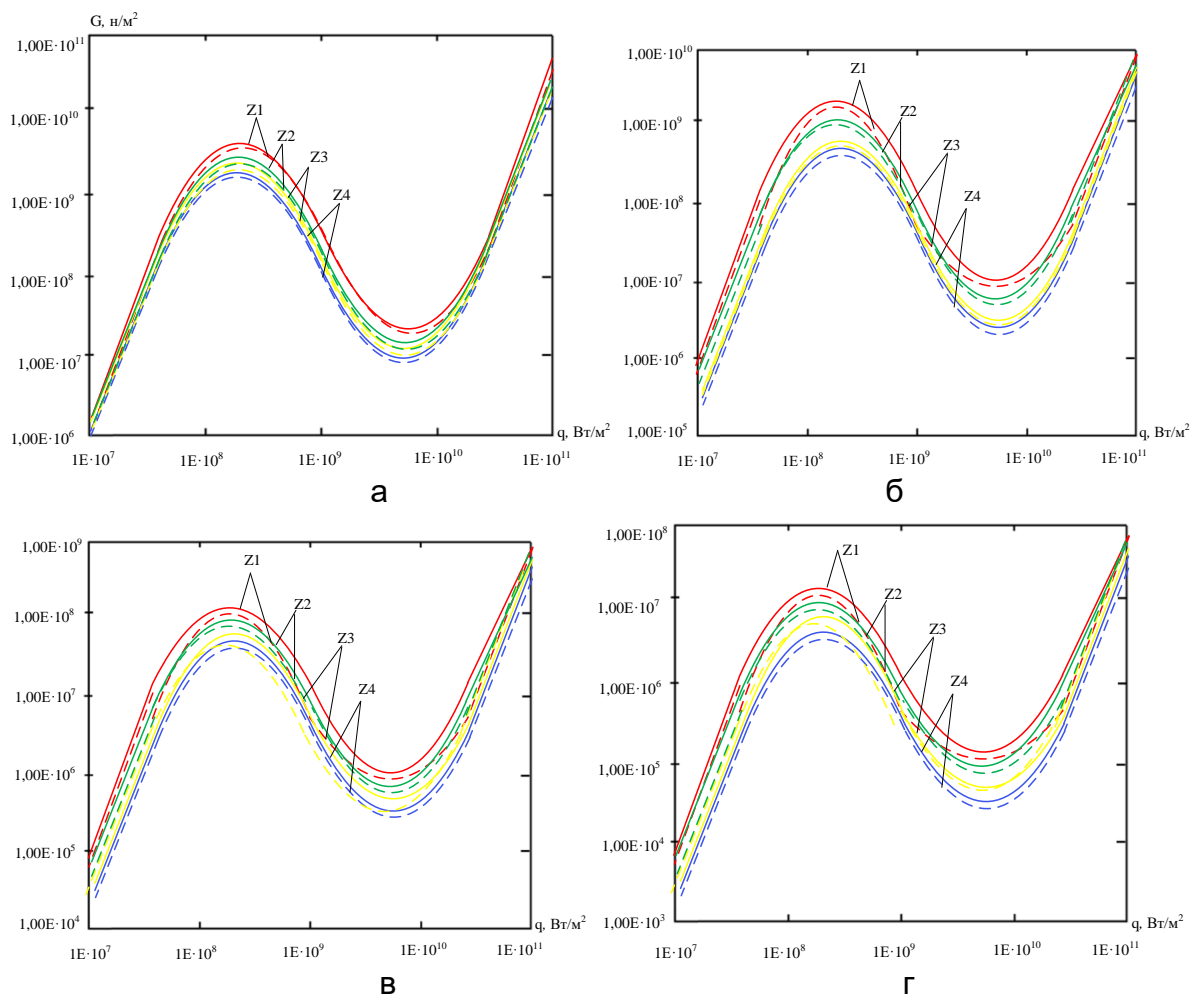


Рис. 3. Залежності температурних напружень від густини теплового потоку q , що створюється лазерним випромінюванням, при різних часах його дії (а- 10^{-10} , б- 10^{-12} , в- 10^{-14} , г- 10^{-16} , с) та на різній глибині (1- $x=0$, 2- $x=x_1$, 3- $x=x_2$, 4- $x=x_3$) при різних способах задання теплофізичних і термомеханічних характеристик: _____ квантово-механічним методом, ----- стохастичним методом для інструментального матеріалу H13A.

Але в розглянутих варіантах ці значення суттєво перевищують необхідні для прискореного отримання наноструктур. Усе це свідчить про те, що ми маємо справу з досить тонким механізмом, і велике значення матиме зіставлення теоретичних значень з отриманими експериментально. Оскільки виміряти ці температури практично неможливо, то ми будемо перевіряти результати за розміром наноструктур, які можна буде оцінити за допомогою запропонованої моделі.

Отже, на рисунку 3 представлені залежності температурних напружень від густини теплового потоку на різних глибинах і для різних часів дії фемтосекундного лазера. Видно, що на всіх є зони з максимумом, які знаходяться поблизу 10^9 Вт/м², і мінімум, які знаходяться поблизу 10^{10} Вт/м², надалі відбувається ріст температурних напружень, що пояснюється концентрацією теплових полів у зоні густини теплового потоку 10^9 Вт/м². Надалі область розширюється і досягає мінімуму при 10^{10} Вт/м². При подальшому рості теплового потоку зона температур стискається (градієнт збільшується, а отже, і зростають

напруження). Величини температурних напружень перевищують 10^{10} Вт/м² лише при трьох часах (рис. 3-а, 3-б, 3-в). У цьому випадку температурні напруження можуть призводити до утворення наноструктур, тоді як в інших випадках вони лише прискорюють процес утворення наноструктур.

Такий детальний аналіз температурних напружень демонструє їхню ключову роль у динаміці створення нанорозмірних структур під впливом ультракоротких лазерних імпульсів. Зокрема, зони максимальних напружень поблизу 10^9 Вт/м² сприяють локальним фазовим переходам, таким як аморфізація або утворення ультрадисперсних фаз, за рахунок інтенсивного термічного розширення та стиснення матеріалу. Це особливо важливо для фемтосекундних режимів, де часові масштаби дозволяють уникнути теплової дифузії в глибину, зберігаючи енергію в поверхневому шарі. Для подальшої верифікації моделі доцільно інтегрувати результати з даними атомно-силової мікроскопії (АСМ) або рентгенівської дифрактометрії, що дозволить кількісно корелювати розміри наноструктур з розрахованими напруженнями. Крім того, урахування таких залежностей у технологічних процесах лазерної наноструктуризації металів і сплавів відкриває перспективи для створення матеріалів з унікальними механічними властивостями, такими як підвищена твердість і стійкість до зносу, без використання додаткових хімічних реагентів.

Висновки

Проведені дослідження отримання наноструктур при різних способах задання теплофізичних і термомеханічних характеристик показали, що значення температур у разі квантово-механічного способу задання значно вищі, ніж при використанні стохастичних значень. Причому для високих значень густини теплового потоку ці відмінності є більш суттєвими, особливо це помітно для часів 10^{-16} – 10^{-14} с. Ці дослідження, на жаль, ще не дозволяють говорити про адекватність моделі з тим чи іншим способом задання теплофізичних і термомеханічних характеристик, тому для більш точного визначення адекватності моделі необхідно буде порівняти об'єми наноструктур, що отримуються в тому чи іншому випадку.

Водночас характер розподілу температурних напружень свідчить про їхню високу неоднорідність: наявність максимуму при густині теплового потоку $q = 10^9$ Вт/м² та мінімуму при $q = 10^{10}$ Вт/м², що пояснюється максимальним градієнтом температур при $q = 10^9$ Вт/м² та його мінімумом при $q = 10^{10}$ Вт/м². Показано, що при часах дії теплового потоку 10^{-10} , 10^{-11} та 10^{-12} с є ймовірність отримання наноструктур лише за рахунок температурних напружень. Виявлено, що максимальні температурні напруження реалізуються саме при квантово-механічному способі задання теплофізичних і термомеханічних характеристик.

Такий порівняльний аналіз підкреслює фундаментальну роль вибору методу моделювання в прогнозуванні теплових і механічних процесів під час фемтосекундної лазерної обробки. Квантово-механічний підхід, що базується на принципах квантової механіки, точніше враховує дискретну природу матеріалу на нанорівні, що призводить до вищих пікових температур і напружень. Натомість стохастичний метод, орієнтований на ймовірнісні розподіли, дає більш консервативні оцінки, що може бути корисним для первинних скринінгів, але менш придатним для детального прогнозування. Інтеграція цих методів у єдину гібридну модель дозволить оптимізувати параметри лазерного впливу, забезпечуючи контрольоване формування наноструктур з заданими

властивостями, такими як підвищена корозійна стійкість чи механічна міцність.

Таким чином, результати моделювання підтверджують ефективність фемтосекундного лазерного випромінювання як інструменту для спрямованого отримання наноструктур у металах та сплавах. Квантово-механічний спосіб задання характеристик демонструє переваги в точності прогнозування екстремальних теплових режимів і температурних напружень, що відкриває перспективи для створення матеріалів з унікальними функціональними властивостями. Водночас, для повної валідації моделі необхідні комплексні експериментальні дослідження, включаючи атомно-силову мікроскопію, рентгенівську дифракцію та спектроскопію, з метою кореляції теоретичних розрахунків з реальними розмірами та морфологією наноструктур. Розроблені підходи можуть знайти широке застосування в авіаційній, автомобільній та медичній промисловості, сприяючи створенню наноструктурованих покриттів з підвищеною зносостійкістю та роботоздатністю. Подальші роботи спрямовані на експериментальну верифікацію моделі та оптимізацію технологічних режимів для промислового впровадження.

Список літератури

1. Широкий, Ю. В. Визначення технологічних параметрів лазерного випромінювання для отримання субмікро- та наноструктур у зміцнювальних покриттях на сталях / Ю. В. Широкий, Ю. О. Сисоєв, Т. О. Постельник // Відкриті інформаційні та комп'ютерні інтегровані технології. – 2023. – № 98. – С. 77–90.
2. Sysoiev, I. Pulsed vacuum-arc plasma source with laser arc excitation / I. Sysoiev, Yu. Shyrokyi, K. Fesenko // Problems of Atomic Science and Technology. – 2024. – № 1 (149). – P. 110–115.
3. Zhou, L. Influence of laser texturing parameters on the surface characteristics and cutting performance of cemented carbide tools / L. Zhou, P. Zou, Z. Yang [et al.] // Optics & Laser Technology. – 2025. – Vol. 185. – P. 112524. – DOI: 10.1016/j.optlas.2024.112524.
4. Широкий, Ю. В. Підвищення ефективності деталей машин та різального інструменту комбінованими методами обробки / Ю. В. Широкий, Ю. О. Сисоєв, О. Д. Семененко, О. В. Торосян // Відкриті інформаційні та комп'ютерні інтегровані технології. – 2025. – № 106. – С. 84–107.
5. Кантемир, І. В. Удосконалення процесів створення наноструктур у плазмово-іонних та лазерних технологіях для підвищення ефективності різального інструменту : дис.... канд. техн. наук : 05.03.07 / І. В. Кантемир. – Харків, 2018. – 190 с.
6. Popov, V. Study of ions energy, their varieties and charge on temperature, rate of temperature rise, thermal stresses for nanostructures on construction materials / V. Popov, G. Kostyuk, M. Nechyporuk, K. Kostyk // Advanced Manufacturing Processes. – Cham : Springer, 2020. – P. 470–477.
7. Kostyuk, G. Determination of technological parameters for obtaining nanostructures under pulse laser radiation on steel of drone engine parts / G. Kostyuk, M. Nechyporuk, K. Kostyk // Proceedings of the 10th International Conference on Dependable Systems, Services and Technologies (DESSERT). – 2019. – P. 208–212.
8. Kostyk, K. O. Intensification of chemical and heat treatment processes to improve the operational properties of machine parts / K. O. Kostyk, Yu. V. Shyrokyi // Findings of Modern Engineering Research and Developments : monograph. – Riga : Baltija Publishing, 2022. – P. 554.

9. Руденко, Н. В. Дослідження впливу параметрів лазерного загартування на глибину зміцненого шару, його структуру і твердість / Н. В. Руденко, Ю. В. Широкий // *New Leading Technologies in Machine Building* : матеріали XXX міжнар. конф. – Харків, 2020. – С. 76–77.

10. Ahmed, Y. S. Optimizing femtosecond texturing process parameters through advanced machine learning models in tribological applications / Y. S. Ahmed // *Lubricants*. – 2024. – Vol. 12, № 12. – P. 454.

11. Широкий Ю. В. Ефективність використання параметрів впливу температурних полів у зоні дії лазерного випромінювання на сталі з різним вмістом вуглецю / Ю. В. Широкий, О. В. Торосян, Г. Д. Торосян-Жидєєва // *New Leading Technologies in Machine Building* : матеріали XXXIII всеукр. конф. – Харків, 2024. – Вип. 34. – С. 148–149.

12. Kostyuk, G. I. Comparison of temperature regimes in the zone of laser femtosecond processing of Volkar hard alloy / G. I. Kostyuk, O. D. Grigor // *Вісник НТУ «ХПІ»*. Серія: Технології в машинобудуванні. – 2018. – № 6 (1282). – С. 90–94.

13. Матвеев, О. В. Формування наноструктур при швидкоплинних процесах іонного і лазерного оброблення різального інструменту і деталей : дис. ... канд. техн. наук : 05.03.07 / О. В. Матвеев. – Харків, 2019. – 185 с.

14. Kostyuk G. I. Influence of the method of setting thermophysical and thermomechanical characteristics of B3 hard alloy on the nature and efficiency of nanostructure formation / G. I. Kostyuk, O. D. Semenenko // *Вісник НТУ «ХПІ»*. – 2018. – № 34 (1310). – С. 40–46.

15. Sadeghi, B. Experimental study on the effect of CNT-enriched nanofluid lubrication on the performance of textured cutting tool / B. Sadeghi [et al.] // *Scientific Reports*. – 2023. – Vol. 13. – P. 22350.

16. Baranova, T. A. Microarc synthesis of nanostructured radiation-absorbing coatings / T. A. Baranova [et al.] // *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering*. – 2017. – Vol. 286.

17. Kostyuk, G. Improving the resource and reliability of details from zirconium alloys / G. Kostyuk, V. Popov // *Вісник НТУ «ХПІ»*. – 2019. – № 19. – С. 40–50.

18. Fox-Rabinovich, G. An effective way to improve the cutting performance of coated tools through annealing / G. Fox-Rabinovich [et al.] // *Surface and Coatings Technology*. – 2001. – Vol. 148. – P. 373–380.

19. Baranov, O. Hierarchical nanomaterials by selective deposition of noble metal nanoparticles / O. Baranov [et al.] // *Advanced Theory and Simulations*. – 2023. – Vol. 6, № 9. – P. 2300288.

20. Широкий, Ю. В. Теоретичне дослідження теплових процесів у зоні дії лазерного випромінювання / Ю. В. Широкий, О. В. Торосян, П. Р. Жидєєв // *Матеріали конф.* – Чернігів, 2024. – Т. 2. – С. 79.

References

1. Shyrokyi, Yu. V. Determination of technological parameters of laser radiation for obtaining submicro- and nanostructures in strengthening coatings on steels / Yu. V. Shyrokyi, Yu. O. Sysoiev, T. O. Postelnyk // *Open Information and Computer Integrated Technologies*. – 2023. – No. 98. – P. 77–90.

2. Sysoiev, I. Pulsed vacuum-arc plasma source with laser arc excitation / I. Sysoiev, Yu. Shyrokyi, K. Fesenko // *Problems of Atomic Science and Technology*. – 2024. – No. 1 (149). – P. 110–115.

3. Zhou, L. Influence of laser texturing parameters on the surface

characteristics and cutting performance of cemented carbide tools / L. Zhou, P. Zou, Z. Yang [et al.] // *Optics & Laser Technology*. – 2025. – Vol. 185. – P. 112524. – DOI: 10.1016/j.optlas.2024.112524.

4. Shyrokyi, Yu. V. Improving the efficiency of machine parts and cutting tools by combined processing methods / Yu. V. Shyrokyi, Yu. O. Sysoiev, O. D. Semenenko, O. V. Torosian // *Open Information and Computer Integrated Technologies*. – 2025. – No. 106. – P. 84–107.

5. Kantemyr, I. V. Improvement of nanostructure formation processes in plasma-ion and laser technologies to enhance the efficiency of cutting tools : PhD thesis (Engineering Sciences) : 05.03.07 / I. V. Kantemyr. – Kharkiv, 2018. – 190 p.

6. Popov V. Study of ions energy, their varieties and charge on temperature, rate of temperature rise, thermal stresses for nanostructures on construction materials / V. Popov, G. Kostyuk, M. Nechyporuk, K. Kostyk // *Advanced Manufacturing Processes*. – Cham : Springer, 2020. – P. 470–477.

7. Kostyuk G. Determination of technological parameters for obtaining nanostructures under pulse laser radiation on steel of drone engine parts / G. Kostyuk, M. Nechyporuk, K. Kostyk // *Proceedings of the 10th International Conference on Dependable Systems, Services and Technologies (DESSERT)*. – 2019. – P. 208–212.

8. Kostyk, K. O. Intensification of chemical and heat treatment processes to improve the operational properties of machine parts / K. O. Kostyk, Yu. V. Shyrokyi // *Findings of Modern Engineering Research and Developments : monograph*. – Riga : Baltija Publishing, 2022. – P. 554.

9. Rudenko, N. V. Study of the influence of laser hardening parameters on the depth of the hardened layer, its structure and hardness / N. V. Rudenko, Yu. V. Shyrokyi // *New Leading Technologies in Machine Building : Proceedings of the XXX International Conference*. – Kharkiv, 2020. – P. 76–77.

10. Ahmed, Y. S. Optimizing femtosecond texturing process parameters through advanced machine learning models in tribological applications / Y. S. Ahmed // *Lubricants*. – 2024. – Vol. 12, No. 12. – P. 454.

11. Shyrokyi, Yu. V. Efficiency of using temperature field parameters in the laser radiation zone on steels with different carbon content / Yu. V. Shyrokyi, O. V. Torosian, H. D. Torosian-Zhydieieva // *New Leading Technologies in Machine Building : Proceedings of the XXXIII All-Ukrainian Conference*. – Kharkiv, 2024. – Issue 34. – P. 148–149.

12. Kostyuk, G. I. Comparison of temperature regimes in the zone of laser femtosecond processing of Volkar hard alloy / G. I. Kostyuk, O. D. Grigor // *Bulletin of NTU “KhPI”. Series: Mechanical Engineering Technologies*. – 2018. – No. 6 (1282). – P. 90–94.

13. Matvieiev, O. V. Formation of nanostructures during rapid ion and laser processing of cutting tools and parts : PhD thesis (Engineering Sciences) : 05.03.07 / O. V. Matvieiev. – Kharkiv, 2019. – 185 p.

14. Kostyuk, G. I. Influence of the method of setting thermophysical and thermomechanical characteristics of B3 hard alloy on the nature and efficiency of nanostructure formation / G. I. Kostyuk, O. D. Semenenko // *Bulletin of NTU “KhPI”*. – 2018. – No. 34 (1310). – P. 40–46.

15. Sadeghi, B. Experimental study on the effect of CNT-enriched nanofluid lubrication on the performance of textured cutting tool / B. Sadeghi [et al.] // *Scientific Reports*. – 2023. – Vol. 13. – P. 22350.

16. Baranova, T. A. Microarc synthesis of nanostructured radiation-absorbing

coatings / T. A. Baranova [et al.] // IOP Conference Series: Materials Science and Engineering. – 2017. – Vol. 286.

17. Kostyuk, G. Improving the resource and reliability of details from zirconium alloys / G. Kostyuk, V. Popov // Bulletin of NTU “KhPI”. – 2019. – No. 19. – P. 40–50.

18. Fox-Rabinovich, G. An effective way to improve the cutting performance of coated tools through annealing / G. Fox-Rabinovich [et al.] // Surface and Coatings Technology. – 2001. – Vol. 148. – P. 373–380.

19. Baranov, O. Hierarchical nanomaterials by selective deposition of noble metal nanoparticles / O. Baranov [et al.] // Advanced Theory and Simulations. – 2023. – Vol. 6, No. 9. – P. 2300288.

20. Shyrokyi, Yu. V. Theoretical study of thermal processes in the laser radiation zone during nanostructure formation / Yu. V. Shyrokyi, O. V. Torosian, P. R. Zhydieiev // Conference Proceedings. – Chernihiv, 2024. – Vol. 2. – P. 79.

Надійшла в редакцію 2.04.2026; розглянута на редколегії 16.04.2026

Study of temperature fields and thermal stresses in H13A tool material under femtosecond laser processing

The study presents a theoretical modeling of the nanostructure formation process in H13A tool material under the influence of femtosecond laser radiation, taking into account the following technological parameters: heat flux density ($q = 10^8\text{--}10^{11}$ W/m²) and pulse duration ($10^{-16}\text{--}10^{-10}$ s). The research was based on a comparison of two approaches to defining the thermophysical and thermomechanical properties of materials: a quantum-mechanical method that considers the discrete atomic structure, and a stochastic method oriented toward probabilistic distributions.

Modeling of temperature fields, their rates of change, and thermal stresses at different depths was performed using numerical methods adapted to extreme heating and cooling regimes. The results showed that within the quantum-mechanical approach, the temperature values and temperature rise rates (V) are significantly higher than those predicted by the stochastic approach, especially at high heat flux densities (above 10^{10} W/m²) and short pulse durations ($10^{-16}\text{--}10^{-14}$ s). The distribution of thermal stresses exhibited pronounced heterogeneity: maxima were observed at $q \approx 10^9$ W/m² (due to peak temperature gradients), while minima occurred at $q \approx 10^{10}$ W/m², which promotes phase transformations and nanostructure self-organization. It was shown that at pulse durations of $10^{-10}\text{--}10^{-12}$ s, thermal stresses can independently initiate nanostructurization, whereas in other cases they accelerate the process. The quantum-mechanical method demonstrates advantages in accurately predicting extreme regimes, providing higher stress and temperature peaks that are critical for amorphization and the formation of ultrafine phases. At the same time, the stochastic approach yields more conservative estimates suitable for preliminary screening. The analysis emphasizes that temperature data alone are insufficient for model validation; the key factor is the comparison of nanostructure (cluster) volumes obtained experimentally and theoretically using atomic force microscopy, X-ray diffraction, and spectroscopy techniques. Integration of both approaches into a hybrid model will enable optimization of laser processing parameters for the development of materials with enhanced wear resistance, corrosion resistance, and biocompatibility. The results open prospects for industrial applications in the aerospace, automotive,

medical, and other industries. Further work will focus on experimental verification and technology scaling.

Keywords: femtosecond laser, nanostructures, cutting tool, nanostructured layers, thermal stresses, quantum-mechanical modeling, stochastic method, thermophysical properties.

Відомості про авторів:

Широкий Юрій Вячеславович – кандидат технічних наук, доцент кафедри теоретичної механіки, машинознавства та роботомеханічних систем, Національний аерокосмічний університет «Харківський авіаційний інститут» м. Харків, Україна; i.shyrokyi@khai.edu; ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-4713-0334>.

Семененко Ольга Діонісівна – асистент кафедри теоретичної механіки, машинознавства та роботомеханічних систем, Національний аерокосмічний університет «Харківський авіаційний інститут», o.semenenko@khai.edu, ORCID: <https://orcid.org/0009-0001-8425-562X>.

About the Author:

Yurii SHYROKYI– Doctor of Philosophy, Assistant-Professor, Department of Theoretical Mechanics, Engineering and Robomechanical Systems, National Aerospace University “Kharkiv Aviation Institute”, Kharkiv, Ukraine; i.shyrokyi@khai.edu; ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-4713-0334>.

OIha SEMENENKO – Assistant, Department of Theoretical Mechanics, Machine Science and Robotic Mechanical Systems, National Aerospace University “Kharkiv Aviation Institute”, o.semenenko@khai.edu, ORCID: <https://orcid.org/0009-0001-8425-562X>.