

СООБЩЕНИЯ ОБЪЕДИНЕННОГО Института Ядерных Исследований

Дубна



P11-2000-271

Э.А.Айрян, И.В.Амирханов, Б.Ф.Костенко, Я.Прибиш, И.Сархадов

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕРМОАКУСТИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ, ГЕНЕРИРУЕМЫХ ИНТЕНСИВНЫМИ ИОННЫМИ ПУЧКАМИ В ТОНКИХ ОБРАЗЦАХ



1 Введение

За последние двадцать лет диапазон технологических применений источников концентрированных потоков энергии и, в частности, ионных ускорителей, существенно расширился [1]. В этой связи можно упомянуть различные типы термической обработки материалов, получение тонких пленок и покрытий, а также сверхчистых материалов, направленную модификацию физико-механических и химических свойств металлов и сплавов. Особое значение эти исследования приобретают в связи с дальнейшей перспективой миниатюризации компьютерных технологий, возникшей благодаря открывшейся в последнее время возможности получения капельных наноструктур (кластеров) проводящих материалов, а также создания в поверхностном слое полупроводников так называемых квантовых точек. В качестве отдаленной цели уже сформулирована и развивается концепция квантового компьютера, создание которого будет связано с развитием принципиально новых технологий, включающих, по-видимому, и различные методы обработки материалов мощными ионными импульсами.

Требования к ускорителям, предназначенным для генерации необходимых ионных пучков, определяются как поставленными технологическими задачами, так и особенностями взаимодействия ионов с материалами. В частности, для исключения активации мишеней необходимо ограничить энергию ионов величиной, находящейся ниже порога ядерных реакций. Для протонов, которые обычно всегда присутствуют в ионном пучке из-за различных загрязнений, это соответствует E < 400кэВ. Далее, важно также обеспечить существенную плотность выделяющейся энергии. Например, эксперименты показывают, что для того чтобы воздействие пучка на механические и антикоррозионные свойства поверхности металла стало заметным, необходимо, чтобы энерговклад пучка превышал энергию сублимации [2, 3], а для уменьшения влияния процессов тепловой релаксации важно добиться еще и достаточно высокой мощности поступающей энергии. Оценки показывают, что для практических целей обработки металлов часто бывает достаточно обеспечить длительность ионного импульса $\Delta t \sim 10^{-7}$ с при энергии ионов $E \sim 300$ кэВ и потоке энергии 1 — 10 Дж/см². Кроме этого, могут предъявляться также определенные требования к однородности плотности потока по сечению пучка, высокой долговечности установки, хорошей повторяемости параметров пучка (обычно нестабильность не должна превышать 10-20%).

С точки зрения вышеперечисленных критериев весьма перспективным представляется использование источников ионов со взрывной ион-

ной эмиссией [4]. В этом случае при энергии ионов $E \sim 100 - 300$ кэВ и радиусе пучка $r \sim 10^{-2}$ см удается получить плотность выделившейся энергии в интервале $Q_0 \sim 10^{-2} - 10^2 \ \text{Дж/см}^2$, что отвечает плотности выделяемой мощности $P_0 \sim 10^5 - 10^8 \ \text{Вт/см}^2$ при длительности импульса $\Delta t \sim 10^{-8} - 10^{-7} \ \text{с.}$

Картина взаимодействия мощных ионных пучков с мищенью весьма сложна. Она содержит большое разнообразие самых различных физических явлений: от тепловых и механических, до газодинамических и плазменных. Хотя многие особенности этих процессов уже ясны, в настоящее время общая физическая модель, описывающая в широком диапазоне параметров такие взаимодействия, пока отсутствует. Характерная черта воздействия мощного пучка ионов на металл состоит в том, что зона структурных изменений в этом случае более чем на два порядка превосходит длину свободного пробега ионов (эффект дальнодействия). Например, дислокационные структуры, образующиеся при ионном облучении, могут располагаться на расстояниях до 100 мкм от поверхности при средней длине свободного пробега ионов менее 1 мкм. Удовлетворительного объяснения этого явления в настоящее время не существует. В частности, гипотеза, согласно которой дефекты образуются вблизи поверхности, а затем мигрируют на большие глубины [5, 6], противоречит общепринятым представлениям о том, что дефекты не могут преодолевать границы зерен вещества. Учет механизмов образования в облучаемых материалах волн сжатия, переходящих в процессе нелинейной эволюции в ударные, представляется весьма привлекательным. При этом дислокации могут образовываться за счет энергии упругих волн, возбуждаемых в образце [7 – 9]. Однако и в этом случае имеются экспериментальные данные, которые, по-видимому, не укладываются в рамки такого описания. Мы имеем в виду образование дефектов на расстоянии 100 мкм от источника размером 10 нм, поскольку в этом случае расходящаяся сферическая акустическая волна должна быстро терять плотность энергии, необходимую для образования дефектов [10].

С целью изучения явлений формирования волн сжатия в работах [11] была сформулирована модель, описывающая совместную эволюцию термоупругих напряжений и температур в образце, в основу которой положены результаты [12]. В настоящей публикации мы производим уточнение использовавшейся ранее модели энерговыделения ионов с учетом конкретных особенностей импульсных источников ионов со взрывной эмиссией, а также точной пространственно – временной картины энергетических потерь пучка ионов в веществе.

2 Модель

Анализ термоупругих эффектов мы проводим на базе следующей системы уравнений с начальными и граничными условиями [11]:

$$\frac{\partial^2 \sigma}{\partial t^2} = A_1 \frac{\partial^2 \sigma}{\partial x^2} - A_2 \frac{\partial^2 T}{\partial t^2}, \quad \sigma(x,0) = \frac{\partial \sigma(x,0)}{\partial t} = 0, \tag{1}$$

$$(1+A_4T)\frac{\partial T}{\partial t} = A\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} - A_3T\frac{\partial \sigma}{\partial t} + q,$$
(2)

 $\sigma(0,t) = \sigma(1,t) = 0,$ T(x,0) = 1, $\frac{\partial T(0,t)}{\partial x} = \frac{\partial T(1,t)}{\partial x} = 0.$

В уравнениях (1)-(2) все величины даны в безразмерном виде. Безразмерные величины через постоянные параметры выражаются следующим образом:

$$A = \frac{\lambda_0 \tau}{c_0 \rho_0 l_0^2}, \quad A_1 = \frac{E \tau^2}{\rho_0 l_0^2}, \quad A_2 = \frac{E \alpha_T T_0}{\sigma_0}, \quad A_3 = \frac{\alpha_T \sigma_0}{c_0 \rho_0}, \quad A_4 = \frac{E \alpha_T^2 T_0}{c_0 \rho_0}.$$

В частности, для мишени из железа можно взять

 $A \approx 0,06, \quad A_1 \approx 2 \cdot 10^4, \quad A_2 \approx 300, \quad A_3 \approx 10^{-5}, \quad A_4 \approx 3 \cdot 10^{-3}.$

Функции $T \equiv T(x,t), \sigma \equiv \sigma(x,t)$ описывают температуру образца и напряжение, $q \equiv q(x,t)$ — мощность теплового источника. Температура T и напряжение σ нормированы следующим образом:

$$T \equiv \frac{T(x,t)}{T_0}$$
, $[T_0 = 293 \text{ K}]$, $\sigma \equiv \frac{\sigma(x,t)}{\sigma_0}$, $[\sigma_0 = 2, 2 \cdot 10^6 \text{ Ha}]$.

В дальнейшем расстояния x и времена t будем измерять в единицах $l_0 = 10^{-5}$ см и $t_0 = 3 \cdot 10^{-7}$ с соответственно.

3 Источник

Зависимость от времени интенсивности падающего пучка, измерявшуюся в работе [13], в некотором приближении (передающем, по меньшей мере, ее качественное поведение) можно аппроксимировать формулой

$$I(t) = I_0 \frac{1 - e^{-t/\tau_1}}{1 + e^{(t-\tau_1 - \Delta t)/\tau_2}} \equiv I_0 f(t),$$

где $\tau_1, \tau_2 \sim (1-5) \cdot 10^{-8}$ с — длительности нарастания и спадания импульса, Δt — его длительность. Аналогичным образом описывается и мощность, P = I(t)U, попадающая на поверхность образца: $P = P_0 f(t)$, где U – ускоряющее напряжение. Здесь предполагается выполненным следующее очевидное условие самосогласованности:

$$P_0\int_0^\infty f(t)\ dt=Q_0,$$

для указанных выше интервалов значений P_0 и Q_0 .

Для расчета динамики энерговыделения пучка внутри образца мы использовали данные по тормозным способностям ионов в различных веществах, опубликованные в работе [14]. В интересующем нас диапазоне энергий тормозные способности хорошо аппроксимируются формулой

$$-\frac{dE}{dx} = a \ E^{1/2}.\tag{3}$$

В частности, для ионов углерода, сталкивающихся с железным образцом, в системе единиц $[E] = \kappa_3 B$, [x] = м следует взять $a = 5,82 \cdot 10^7$. Рассматривая соотношение (3) как уравнение, описывающее зависимость энергии налетающего иона с начальной энергией E_0 от пройденного пути, находим

$$E(x) = (E_0^{1/2} - \frac{a}{2}x)^2.$$

Время прихода иона в точку, отстоящую от поверхности на расстоянии *x*, равно

$$\tau(x) = \int_0^x \frac{dx}{v(x)} = \frac{1}{b} \int_0^x \frac{dx}{E_0^{1/2} - ax/2} = -\frac{2}{ab} \ln(1 - x/R(E_0)),$$
$$0 \le x < R(E_0),$$

где символом $R(E_0)$ обозначен пробег иона в веществе:

$$R(E_0) = \int_0^{E_0} \frac{dE}{(-dE/dx)} = \frac{2}{a} E_0^{1/2},$$

а коэффициент b для ионов C в Fe равен $b = 1, 22 \cdot 10^5$, если [v] = м/c. Распределение по времени выделяющейся мощности внутри образца с учетом времени движения иона до точки x можно теперь представить в виде

$$P(x,t) = \frac{2P_0}{R(E_0)} \left(1 - x/R(E_0)\right) f\left(t - \tau(x)\right) \Theta\left(t - \tau(x)\right).$$
(4)

Формула (4) в указанных выше единицах, фактически, соответствует источнику мощности q(x), входящему в уравнения термоупругости, использовавшиеся ранее в работах [11].



Рис. 1. Пространственно-временное распределение мощности источника

На рис. 1 изображено пространственно-временное распределение мощности источника при энергии пучка $E_0 = 300 \text{ кэB}^1$. Время нарастания и спадания импульса $\tau_1 = \tau_2 = 3 \cdot 10^{-8}c$. На рис. 2 приводится распределение мощности источника по глубине образца при $\tau_1 = \tau_2 = 3 \cdot 10^{-8}c$ для разных энергий частиц в пучке:

1) $E_0 = 250 \text{ кэB},$

2) $E_0 = 350 \text{ кэB},$

3) $E_0 = 300$ кэВ — средняя кривая соответственно.

В наших расчетах пучок предполагался монохроматическим. Флуктуации длины свободного пробега, а также ядерные столковения мы не учитывали. Некоторые направления дальнейшего улучшения модели источника понятны из работы [15].

5

¹Здесь единица q_0 измерения плотности мощности $q(x,t) = P(x,t)/q_0$, возникающая естественным образом при переходе к безразмерным переменным в исходной системе уравнений (см. [11]), равна $q_0 = \rho_0 c_0 T_0 / t_0 = 3.5 \cdot 10^9$ Вт/см³.



Рис. 2. Зависимость распределения мощности источника по глубине от энергии налетающей частицы в момент времени $t = 1.5 \cdot 10^{-7}$ с

4 Метод решения

Система (1)-(2) решалась на сетке переменных x и t с шагами h_x и τ_t в интервале $x \in \langle 0, 1 \rangle$, $t \in \langle 0, t_{max} \rangle$. Длина x нормировалась на толщину железной мишени l_0 , а время t - на длительность импульса $\tau = 3 \cdot 10^{-7}$ с [11]. Таким образом, если n_x – число деления интервала x, n_t – число деления интервала t, то

 $egin{aligned} & x_i = h_x \cdot i, & i = 0, \dots, n_x, & h_x = 1/n_x; \\ & t_k = \tau_t \cdot k, & k = 0, \dots, n_t, & \tau_t = t_{max}/n_t. \end{aligned}$

Для решения системы применялась следующая схема [16]:

$$\frac{\sigma_i^{k+1} - 2\sigma_i^k + \sigma_i^{k-1}}{\tau_t^2} = A_1 \frac{\sigma_{i+1}^k - 2\sigma_i^k + \sigma_{i-1}^k}{h_x^2} - A_2 \frac{T_i^{k+1} - 2T_i^k + T_i^{k-1}}{\tau_t^2};$$
(5)

$$(1 + A_4 T_i^k) \frac{T_i^{k+1} - T_i^k}{\tau_t} = A \frac{T_{i+1}^k - 2T_i^k + T_{i-1}^k}{h_x^2} - A_3 T_i^k \frac{\sigma_i^{k+1} - \sigma_i^k}{\tau_t} + q_i^k.$$
(6)

Краевые условия взяты в виде

$$\sigma(x,0) = \frac{\partial \sigma(x,0)}{\partial t} = 0 \Rightarrow \frac{\sigma_i^1 - \sigma_i^0}{\tau_t} = 0 \Rightarrow \sigma_i^0 = \sigma_i^1 = 0, \ i = 0, \dots n_x,$$

$$\sigma(0,t) = \sigma(1,t) = 0 \Rightarrow \sigma_0^k = \sigma_{n_x}^k = 0, \qquad k = 0, \dots n_t;$$
(7)

$$\frac{T_1^k - T_{-1}^k}{2h_x} = \frac{T_{n_x+1}^k - T_{n_x-1}^k}{2h_x} = 0 \Rightarrow T_1^k = T_{-1}^k, T_{n_x+1}^k = T_{n_x-1}^k, k = 0, \dots n_t,$$

$$T(x,0) = 1 \qquad \Rightarrow \qquad T_i^0 = 1, \qquad i = 0, \dots n_x. \tag{8}$$

Условие $\frac{\partial T(0,t)}{\partial x} = 0$ позволяет ввести симметричную точку $x_{-1} = -h_x$ с соответствующим значением $T_{-1} = T_1$ [16]. Это дает возможность использовать соотношение (6) в точке x = 0 (для любого t). Аналогичным образом можно поступить и в точке x = 1. Такие же результаты дает условие $T_1 = T_0$ и использование уравнения (6) только во внутренних точках.

Из формулы для времени задержки $\tau(x)$ следует, что эта величина неограниченно возрастает при $x \to R(E_0)$. Однако, оказывается, что при реальных расчетах на дискретной пространственной сетке запаздыванием вообще можно пренебречь. В самом деле, из представления

$$\tau(x) = -\frac{2}{ab} \frac{R(E_0)}{h_x} \left(\frac{h_x}{R(E_0)} \ln \left(\frac{h_x}{R(E_0)} \right) \right),$$

в силу того, что выражение в скобке при $h_x \to 0$ стремится к нулю, видно, что при шаге $h_x = 0,001$ имеем

$$au(R(E_0) - h_x) < rac{2}{ab} rac{R(E_0)}{h_x} \approx 10^{-10}.$$

Поэтому запаздывание с этой точностью можно не учитывать (что подтверждается и численными расчетами).

5 Результаты

Следующие результаты расчетов получены при выполнении условий устойчивости [16]:

- для схемы (5) $\tau_t \leq h_x/\sqrt{A_1}$ (условие Куранта);
- для схемы (6) $\tau_t \leq h_x^2/(2A)$, с шагами
- $h_x = 0,00125$ и $\tau_t = 0,00000625.$



Рис. 3. Пространственно-временное распределение температуры в образце



Рис. 4. Пространственно-временное распределение напряжения в интервале времени от 0 до 10^{-8} с

На рис. 3 показано распределение температуры в металлическом образце толщиной 10^{-5} м вплоть до момента времени $9 \cdot 10^{-7}c$ при энергии частиц падающего пучка 300 кэВ (см. рис. 1). Из сравнения с рис. 1 видно, что максимум температуры достигается в области, где мощность

энерговыделения максимальна. В дальнейшем температура уменьшается экспоненциальным образом за счет переноса энергии вглубь образца. На рис. 4 приведено распределение напряжения в образце при той же энергии. Отчетливо видна волна разрежения, сформировавшаяся в результате отражения волны сжатия от задней поверхности (в виде выброса на "дне" волны сжатия).

Рис. 5 и 6 показывают, что распределение температуры и напряжения в образце при фиксированном энерговыделении слабо зависят от энергии частиц пучка (нумерация кривых — такая же, как на рис. 2).



Рис. 5. Зависимость распределения температуры по глубине образца от энергии частиц пучка в момент времени $t \approx 1,5 \cdot 10^{-7}$ с



Рис. 6. Зависимость распределения напряжения по глубине образца от энергии частиц пучка в момент времени $t = 10^{-8}$ с

6 Обсуждение

Развитие новых радиационных технологий обработки материалов, наблюдающееся в последние годы, сделало актуальной задачу разработки моделей расчета прохождения потоков ионов через вещество. Такие модели должны учитывать явления генерирования и эволюции тепловых и термомеханических полей, а также процессы фазовых превращений, приводящих как к полезной модификации приповерхностного слоя, так и к нежелательному разрушению облучаемой поверхности. В общем случае эти процессы описываются сложной системой уравнений слошной среды, решаемых на современных ЭВМ.

При низких интенсивностях пучка, когда средняя тепловая энергия $\varepsilon \sim kT$ молекул среды существенно меньше теплоты испарения ΔH , вылет вещества из мишени может осуществляться только за счет высокоэнергетических хвостов распределений — реализуется тепловой активационный механизм испарения. Скорость распространения фронта

испарения V в таком режиме описывается формулой Аррениуса [17]:

$$V \simeq \frac{a}{\tau} \exp(-\Delta H/kT).$$

Здесь параметры a — постоянная решетки и τ — период собственных колебаний молекул, связанные со скоростью звука с соотношением $a/\tau \simeq c$. При более высоких мощностях пучка, когда испарение еще не носит характера взрыва, все еще можно говорить о существовании у образца поверхности, разделяющей паровую и конденсированную фазы. Очевидно, что скорость перемещения этой поверхности детерминирована законом сохранения энергии, а учет испарения в уравнении теплопроводности может быть произведен путем наложения соответствующих условий на границе раздела конденсированной и паровой фаз. В простейшей форме граничное условие на фронте испарения имеет вид [18]

$$K\frac{\partial T}{\partial x} + F - LRV_f = 0,$$

где K — коэффициент теплопроводности конденсированной среды (теплопроводностью паровой фазы здесь пренебрегаем), F — поглощенная в волне испарения плотность энергии падающего пучка, L — удельная теплота плавления, R — плотность конденсата, T — его температура, V_f — скорость перемещения фронта испарения. Если T превышает температуру плавления, то испарение происходит не с твердой, а с жидкой (кипящей) поверхности при давлении насыщенного пара, причем температура пара и вещества с разных сторон поверхности совпадают и равны температуре кипения. Расчет температурных полей в этом случае может быть выполнен с использованием уравнения теплопроводности (2) в рамках задачи Стефана, учитывающей скорость движения границы раздела твердой и жидкой фаз вещества на основе уравнения теплового баланса [19]. При этом температура на границе раздела, как и в случае границы жидкость-пар, меняется непрерывно, а ее производная претерпевает скачок, описываемый соотношением теплового баланса:

$$K_L \frac{\partial T(x_b - 0, t)}{\partial x} - K_S \frac{\partial T(x_b + 0, t)}{\partial x} = QRV_b,$$

где Q — удельная теплота фазового перехода, K_L, K_S — теплопроводности в жидкой и твердой фазах соответственно, V_b — скорость движения границы: $V_b = \partial x_b / \partial t$.

При дальнейшем повышении плотности энергии падающего пучка механизм равновесного испарения нарушается. В настоящее время описание процессов испарения такого типа производится в рамках модели с кнудсеновским слоем [17]. Критерием перехода от модели с кипящей поверхностью к модели с кнудсеновским слоем является, очевидно, условие

$$P \geq P_{cr}$$
,

где P — давление вблизи поверхности, P_{cr} — критическое давление перехода жидкость-пар. Расчеты с использованием уравнения Больцмана показывают, что в кнудсеновском слое пара, непосредственно прилегающем к поверхности конденсата и имеющем толщину порядка нескольких длин свободного пробега, устанавливается температура T_K несколько меньшая, чем температура T жидкой фазы:

$$T_{K} = 0,65T$$

и плотность

$$\rho_K = \rho_v,$$

где ρ_v — плотность насыщенного пара. Кроме этого, на границе раздела следует задать условия, отвечающие законам сохранения энергии, импульса и массы.

Даже этот метод описания испарения может стать совсем неадекватным задаче в том случае, когда средняя энергия молекул є в приповерхностной области намного превосходит теплоту испарения. В этих условиях резкой границы между конденсированным и испарившимся веществом не существует, так что уравнения среды в переходной области следует решать совместно с уравнениями состояния. Подобные граничные условия изучались в задачах инерционного ядерного синтеза (см., например, [20]), когда генерируются интенсивные ударные волны, т.е. фактически происходит взрыв поверхностного слоя вещества. Критерии перехода от модели двухфазной границы к этому режиму испарения сформулированы в работе [21].

Расчеты показали, что в описанной здесь модели максимальные механические напряжения, возникающие вследствие теплового расширения вещества, не превышали ни предел текучести железа, ни его временное сопротивление разрыву. Поэтому, для описания эффекта дальнодействия обсуждавшиеся здесь представления нуждаются в дальнейшем развитии и уточнении.

Авторы благодарны проф. И.В. Пузынину за постановку задачи и обсуждение, а также А.И. Луценко, Т.П. Пузыниной и А.В. Федорову за сотрудничество.

Настоящая работа была частично поддержана грантом Российского фонда фундаментальных исследований № 99-01-01101.

12

Список литературы

- [1] В.И. Бойко, А.Н. Валиев, А.Д. Погребняк, УФН, 1999, т.169, с.1243.
- [2] А.Н. Диденко и др., Поверхность, 1985, вып. 1, с.150.
- [3] A.N. Didenko et al., VI Int. Conf. on Effect. and Ion Beam, Kobe, Japan, 1986.
- [4] С.А. Коренев и др. Труды I Межд. симпозиума по пучковым технологиям (ВТ'95), Дубна, 1995.
- [5] Н.П. Морозов, Д.И. Тетельбаум, ФТП, 1983, т.17, с. 838.
- [6] Yu. Martynenko, P. Moskovkin, Rad. Eff.: ef. in Solids, 1994, v.129, p. 193.
- [7] V.P. Zhukov, A.V. Ryalenko, Rad. Eff., 1984, No. 1-2, p.85.
- [8] Ю.А. Семин и др., Письма в ЖТФ, 1988, т.14, с. 273.
- [9] П.В. Павлов и др., ФТП, 1986, т. 20, с.503.
- [10] Ю.В. Мартыненко, Эффекты дальнодействия при ионной имплантации, в сб.: Итоги науки и техники, сер. Пучки заряженных частиц и твердое тело, ВИНИТИ, Москва, 1993, т. 7, с. 82.
- [11] И.В. Амирханов и др., Препринт ОИЯИ Р2-98-63; ОИЯИ Р2-98-201, Дубна, 1998.
- [12] В. Новацкий, Вопросы термоупругости. М.: АН СССР, 1962.
- [13] С.А. Коренев, Препринт ОИЯИ Р13-89-615, Дубна, 1989.
- [14] L.C. Northcliffe, R.F. Schilling, Nuclear Data Tables, 1970, A7, p.233.
- [15] J.P. Biersack, L.G. Haggmark, Nucl. Instr. and Meth., 1980, v.174, p.257.
- [16] Н.Н. Калиткин, Численные методы. М.: Наука, 1978.
- [17] С.И.Анисимов и др., Действие излучения большой мощности на металлы, М.: Наука, 1970.
- [18] В.И. Зубов и др., Журн. вычислит. мат. и мат. физ., 1986, т. 26, с. 1740.
- [19] E.A. Ayryan et al. JINR Rapid Comm. 1997, No.6[86]-97, p. 103

[20] А.Ф. Аккерман и др., ЖЭТФ, 1985, т.89, с.852.

· · · · ·

[21] В.П. Кривобоков, О.В. Пащенко, Г.А. Сапульская, Изв. вузов. Физика, 1993, № 12, с.37.

Рукопись поступила в издательский отдел 9 ноября 2000 года.