

ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ Ядерных Исследований

Дубна

P2-98-63

И.В.Амирханов, И.В.Пузынин, В.Н.Самойлов, В.К.Федянин, Х.Т.Холмуродов

МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕРМОУПРУГИХ ЭФФЕКТОВ ПРИ ИОННОЙ БОМБАРДИРОВКЕ МЕТАЛЛОВ

Направлено на 12 международную конференцию «BEAMS'98», Хайфа, Израиль, 7-12 июня, 1998



1. Введение

Как известно [1-3], одним из эффективных методов получения новых материалов для современных технологий является электронное и ионное перемешивание в импульсном взрывоэмиссионном режиме. Облучение тонких пленок мощными импульсными электронными и ионными пучками может создавать в поверхностных слоях совершенно новые структуры с очень интересными для практических целей физико-химическими свойствами [2,4,5]. Другим важным аспектом электронной и ионной обработки материалов являются изменения таких параметров, которые представляют существенный интерес в металлургии. Например, ионная и электронная обработка может изменить усталостную прочность металлов и существенно увеличить их износостойкость [2,6-8].

Взаимодействие сильноточных электронных или ионных пучков с поверхностью материалов, как следствие, приводит к таким динамическим процессам, как термоупругие напряжения и ударные волны [1-4]. Наука о термоупругих процессах, несмотря на свой солидный возраст (см., например, [9-11]), применительно к вопросам электронно-ионной модификации поверхности твердых тел представляет собой малоизученную область [2]. Причиной, на наш взгляд, является слабая связь полей деформации и температуры [10,12]. Однако взаимодействие высокоэнергетических пучков электронов и ионов с поверхностью металлов и сплавов, как отмечено в [2,8], способно вызвать термоупругие напряжения не только на микроуровне, но и во всей облучаемой среде. Ударные волны, термоупругие эффекты могут быть при этом существенными факторами, которые следует учитывать при анализе возникновения новых нетривиальных структур на поверхности облучаемых тел. Целью настоящей работы является исследование термоупругих процессов, которые возникают в металлическом образце под действием мощного импульсного ионного облучения.

2. Модель

Анализ термоупругих процессов мы проводим на базе следующей системы уравнений, учитывающей нелинейное взаимодействие полей деформаций и температуры [9]:

$$\rho_0 \frac{\partial^2 \vec{u}}{\partial t^2} = \mu \nabla^2 \vec{u} + (\lambda + \mu) graddiv \vec{u} - \eta_0 gradT, \tag{1}$$

$$c\rho_0\frac{\partial T}{\partial t} = \lambda_0\nabla^2 T - \eta_0 T\frac{\partial}{\partial t}div\vec{u} + Q.$$
 (2)

Здесь \vec{u} -вектор перемещения; T-температура; λ , μ -постоянные Ламэ; $\eta_0 = (2\mu + 3\lambda)\alpha_T$; c-удельная теплоемкость; ρ_0 - плотность; λ_0 -коэффициент теплопроводности; α_T -коэффициент температурного линейного расширения; Q-количество тепла, производимое внешным источником в единице объема за единицу времени. Вкратце отметим, что вывод уравнений (1) — (2) основан на использовании известного термодинамического соотношения для F свободной энергии упругодеформированного тела как функции от тензора деформации $\epsilon_{ij} = \frac{1}{2}(u_{i,j} + u_{j,i}), \quad u_{i,j} = \frac{\partial u_i}{\partial x_j}, \quad u_i = x'_i - x_i, (i, j = 1, 2, 3),$

$$F = \frac{\lambda}{2}\epsilon_{ii}^2 + \mu\epsilon_{ij}^2 - (2\mu + 3\lambda)\alpha_T(T - T_0)\epsilon_{ii} + F_0,$$

где коэффициенты Ламэ λ и μ выражаются через модуль Юнга Е и коэффициент Пуассона ν известными соотношениями [11]:

$$\lambda = \frac{E\nu}{(1-2\nu)(1+\nu)}, \quad \mu = \frac{E}{2(1+\nu)}, \quad (-1 \le \nu \le \frac{1}{2}).$$

При этом динамическое уравнение для \vec{u} вектора перемещения получается через тензор напряжения с помощью соотношений $\rho_0 \frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2} = \sigma_{ij,j}$ и $\sigma_{ij} = \frac{\partial F}{\partial \epsilon_{ij}}$. Далее на основе баланса энтропии в рассматриваемой среде, $T \frac{dS}{dt} = -q_{i,i} \equiv -divq = div(\lambda_0 \vec{\nabla}T)$, где $S = -\frac{\partial F}{\partial T}$, мы, соответственно, имеем дифференциальное уравнение (2). которое дает нелинейную зависимость между деформацией и температурой среды.

В настоящей работе мы ограничиваемся исследованием эффектов термоупругости, возникающих при ионной бомбардировке только в одномерном случае. Такой подход не обусловлен какими-нибудь трудностями вычислительного или математического характера. хотя исследуемая система существенно нелинейна, и ее анализ требует немалых усилий. Исследования процессов переноса тепла в материалах при действии мощного ионного облучения, выполненные на базе одномерного уравнения теплопроводности (см., например, [1.2.13.14]). показали возможность применения одномерного подхода. Проведенный анализ [1,14] распространения температурного фронта дает хорошее согласие с экспериментальными данными. Естественно, что одномерность-это "первое приближение", простейшая модель, позволяющая выделить эффект. В то же время следует отметить, что при пучковой (особенно электронной) обработке материалов скорость сканирования часто соизмерима со скоростью теплопередачи. и здесь необходимо учесть поперечные эффекты. Что касается динамики упругих напряжений при переходе к двум или трем измерениям, то картина здесь выглядит весьма нетривиальной. А именно. в зависимости от геометрии и граничных условий мы будем иметь совершенно разные режимы распространения упругих деформаций и напряжений в среде [9,12]. Продессы термоупругости в неодномерных случаях составляют предмет дальнейших исследований.

Таким образом, для изучения термоупругих эффектов в образце толщиной l_0 имеем следующую систему уравнений:

$$\frac{\partial^2 \sigma_x}{\partial t^2} = v_s^2 \frac{\partial^2 \sigma_x}{\partial x^2} - \alpha \frac{\partial^2 T}{\partial t^2},\tag{3}$$

$$c\rho + g_0 T)\frac{\partial T}{\partial t} = \kappa_0 \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} - \beta T \frac{\partial \sigma_x}{\partial t} + q. \tag{4}$$

Формулы, выражающие безразмерные величины рассматриваемой

модели через фундаментальные постоянные, имеют вид

$$v_s^2 = \frac{E\tau^2}{\rho_0 l_0^2}, \alpha = \frac{E\alpha_T T_0}{\sigma_0}, \kappa_0 = \frac{\lambda_0 \tau}{c_0 \rho_0 l_0^2}, \beta = \frac{\alpha_T \sigma_0}{c_0 \rho_0} \quad \text{if} \quad g_0 = \frac{E\alpha_T^2 T_0}{c_0 \rho_0}.$$

Отметим, что рассматриваемая система уравнений (3) — (4) написана в терминах напряжений, и при этом мы используем следующую связь между напряжением σ_x , деформацией u и температурой T в образце

$$\sigma_x = E \frac{\partial u}{\partial x} - E \alpha_T (T - T_0).$$

В уравнениях (3) — (4) $\sigma \equiv \sigma_x(x,t); T \equiv T(x,t);$ $q \equiv q(x,t)$ -мощность теплового источника; v_s^2 , κ_0 , α , β и g_0 -постоянные величины. Все величины в формулах (3) — (4) приведены, для удобства анализа, в безразмерном виде. Температура образца (металлической пленки) нормирована на его начальное (нормальное) значение, $T \equiv \frac{T(x,t)}{T_0}$ ($T_0 = 293K$), а в качестве амплитуды напряжений для $\sigma_x \equiv \frac{\sigma_x(x,t)}{\sigma_0}$ мы используем известные экспериментальные данные или существующие данные численных расчетов ($\sigma_0 = 2.2 \cdot 10^6 \Pi a$) [2,13].

Функция q(x,t), описывающая источник, определяется следующим выражением:

$$q(x,t) = rac{E_0 j(t)}{z e R_0} \cdot rac{ au}{c_0
ho_0 T_0},$$
 при $t \le 1, \quad x \le r_0$

И

q(x,t) = 0, при $t > 1, x > r_0,$

где $x \equiv \frac{x}{l_0}, t \equiv \frac{t}{\tau}, r_0 \equiv \frac{R_0}{l_0}, l_0$ -толщина облучаемого образца, τ -время действия источника; $E_0, j(t) = const = \frac{j_{max}}{2}, ze$, R_0 -начальная энергия, плотность тока, заряд и средняя длина пробега иона соответственно. Отметим, что толщину образца можно брать сколь угодно большой $(l_0 \to \infty)$, если не учитывать отражений. При этом единицей длины—физическим параметром, будет, например, Δ -толщина, на которую распространяется "тепло" за

время $\tau: \Delta = \frac{\kappa_0}{c_{\rho}} \cdot \tau$ ($\kappa_0 \to \kappa_0 \cdot \frac{l_0^2}{\Delta^2}$). Для ограниченного интервала $0 < x < l_0$, то есть для рассматриваемой нами конечной толщине образца, имеем, что $R_0 << \Delta$.

Систему уравнений (3) — (4) дополним следующими начальными и граничными условиями:

$$\sigma_x(x,0) = \frac{\partial \sigma_x(x,0)}{\partial t} = 0, \quad \sigma_x(0,t) = \sigma_x(1,t) = 0; \tag{5}$$

$$T(x,0) = T_0, \qquad \frac{\partial T(0,t)}{\partial x} = \frac{\partial T(1,t)}{\partial x} = 0.$$
 (6)

Граничные условия (5) — (6), естественно, подразумевают, что мы исследуем адиабатические деформации, при которых не происходит теплообмен между телом и окружающей средой. Следовательно, для модуля упругости E и коэффициента Пуассона ν следует брать их адиабатические значения [11]:

$$E_{\text{ag.}} = \frac{E}{1-\delta_0}, \quad \nu_{\text{ag.}} = \frac{\nu+\delta_0}{1-\delta_0}, \quad (\delta_0 = \frac{ET\alpha_T^2}{9C_p}).$$

Однако для металлов, а также и для большинства твердых тел поправка δ_0 очень мала и ею можно пренебречь [11].

3. Особенности модели

Совместные уравнения упругости и теплопроводности в своей общей форме (1) — (2) (или в форме (3) — (4)) широко применяются в самых разнообразных прикладных задачах [9-12] и составляют основу теории термоупругости. Система (1) — (2) применялась, например, для описания распространения температурных напряжений в упругом пространстве и полупространстве с разными геометриями под воздействием точечного, а также распределенных по прямой и по плоскости источников тепла (см., например, [9,10]). Наиболее интерессыми, близкими к исследуемой нами проблеме, представляются решения системы (3) — (4), которые описывают тепловые напряжения при тепловом ударе на поверхности твердого тела [10]. В работе [10] на основе применения преобразования Лапласа получены аналитические решения системы (3) — (4) при значениях $\beta = 0, g_0 = 0$ и q = 0. которые удовлетворяют следующим граничным условиям:

$$\sigma_x = 0, \quad \frac{\partial T}{\partial x} - \gamma (T - \theta) = 0, \quad (\gamma = \frac{\alpha_0}{\lambda_0} \to \infty) \quad \text{iff} \quad x = 0.$$

Найденное решение представляет собой напряжение $\sigma_x(x,t)$, изменяющееся от нуля при t = 0 до некоторого отрицательного значения с дальнейшим скачкообразным изменением и переходом в область положительных значений. Также установлено, что динамический эффект существенно уменьшается, если изменение температуры поверхности происходит не мгновенно, а в течение малого, но конечного интервала времени [10].

Проблемам образования термоупругих напряжений, возникающих при импульсном электронном и ионном высокоэнергетическом облучении материалов, как было отмечено выше, в научной литературе пока уделено мало внимания [2]. В то же время термоупругие процессы играют очень важную роль в задачах радиационной обработки твердой поверхности, изучении природы кристаллической решетки и т.п. В работе [2] отмечено существование пяти каналов образования упругих напряжений, что указывает на важность и актуальность данной проблемы. Имеется небольшое количество работ [2,13], посвященных термоупругим процессам при воздействии высокоэнергетических заряженных частиц на поверхность твердых тел, где анализ базируется на той или иной модификации системы уравнений (3) -- (4). В работе [13], например, на основе применения упрощенной системы (3) — (4) получена амплитуда напряжений в звуковой волне, и данная величина связывалась с усталостной прочностью материала. Тем самым была показана важность учета термоупругих эффектов при проведении экспериментов по высокотемпературному облучению материалов [13].

4. Методы численного анализа

Для анализа системы (3) — (4), учитывая сложную нелинейную зависимость упругих напряжений и температуры, нами выполнялись численные расчеты. В расчетах мы использовали конечноразностный метод с явными и неявными разностными схемами (см., например, [15-17]). Приводим некоторые из этих схем:

1) явная схема

$$\frac{\sigma_i^{j+1} - 2\sigma_i^j + \sigma_i^{j-1}}{h_t^2} = v_s^2 \frac{\sigma_{i+1}^j - 2\sigma_i^j + \sigma_{i-1}^j}{h_x^2} - \alpha \frac{T_i^{j+1} - 2T_i^j + T_i^{j-1}}{h_t^2},$$

$$(1 + g_0 T_i^j) \frac{T_i^{j+1} - T_i^j}{h_t} = \kappa_0 \frac{T_{i+1}^j - 2T_i^j + T_{i-1}^j}{h_x^2} - \beta T_i^j \frac{\sigma_i^{j+1} - \sigma_i^j}{h_t} + q_i^j.$$

2) неявная (акустическая) схема. Введением потенциала $\phi(x,t) = \int_0^x \left(\frac{\partial\sigma(\xi,t)}{\partial t} + \alpha \frac{\partial T(\xi,t)}{\partial t}\right) d\xi$, $(\alpha \equiv \frac{g_0}{\beta})$, систему уравнений (3) — (4) приводим к виду

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = v_s \frac{\partial \sigma}{\partial x},$$
$$\frac{\partial T}{\partial t} = \kappa_0 \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} - \beta T \frac{\partial \phi}{\partial x} + q$$
$$\frac{\partial (\sigma + \alpha T)}{\partial t} = v_s \frac{\partial \phi}{\partial x}.$$

Соответствующие разностные схемы имеют вид

$$\frac{\phi_i^{j+1} - \phi_i^j}{h_t} = v_s \frac{\sigma_{i+\frac{1}{2}}^j - \sigma_{i-\frac{1}{2}}^j}{h_x},$$

$$\frac{\frac{T_{i+\frac{1}{2}}^{j+1} - T_{i+\frac{1}{2}}^{j}}{h_{t}} = \kappa_{0} \frac{T_{i+\frac{3}{2}}^{j} - 2T_{i+\frac{1}{2}}^{j} + T_{i-\frac{1}{2}}^{j}}{h_{x}^{2}} - \beta T_{i+\frac{1}{2}}^{j} \frac{\phi_{i+1}^{j+1} - \phi_{i}^{j+1}}{h_{x}} + q_{i+\frac{1}{2}}^{j}}{\frac{(\sigma_{i+\frac{1}{2}}^{j+1} - \sigma_{i+\frac{1}{2}}^{j}) + \alpha(T_{i+\frac{1}{2}}^{j+1} - T_{i+\frac{1}{2}}^{j})}{h_{t}}}{h_{t}} = v_{s} \frac{\phi_{i+1}^{j+1} - \phi_{i}^{j+1}}{h_{x}}.$$

6

Отметим, что представленные схемы имеют точность аппроксимации $O(h_x^2 + h_t)$. В расчетах нами также были использованы неявные схемы, имеющие порядок аппроксимации $O(h_x^2 + h_t^2)$ [15-17].

5. Результаты

Мы рассчитали термоупругие напряжения в образце из железа, которые возникают при наносекундном импульсном облучении ионами углерода. В рассчетах были использованы следующие характеристики ионного пучка и теплофизические параметры железа: —длительность импульса $\tau = 3 \cdot 10^{-7}$ с, —энергия ибнов $E_0 = 250 \div 350$ кэВ, —максимальная плотность тока в пучке $j_{max} = 200 \div 1000 \frac{\text{A}}{\text{см}^2}$, —толщина железной мишени $l_0 = 10 \div 50$ мкм,

—пробег иона $R_0 = 0,7$ мкм,

—заряд иона
$$ze = 12e$$
, $e = 1, 6 \cdot 10^{-19}$ Кл,

-плотность железа $\rho = 7870 \frac{\kappa c}{M^3}$, --удельная теплоемкость $c = 456 \frac{\Lambda \kappa}{\kappa c \cdot K}$,

- -коэффициент теплопроводности $\lambda_0 = 78, 2\frac{BT}{M\cdot K}$,
- —модуль упругости $E = 2 \cdot 10^{11}$ Па.

—коэффициент линейного расширения $\alpha_T = 1, 2 \cdot 10^{-5} \text{K}^{-1}$. Параметры разностной схемы:

—шаг по координате $h_x \in [0, 01 \div 0, 00125],$

—шаг по времени $h_t \in [0,0001 \div 0,0000625].$

Результаты численного решения системы уравнений (3) — (4) с начальными и граничными условиями (5) — (6) приведены на рис.1 и 2. Пространственно-временные профили температуры и напряжений показывают динамику термоупругих напряжений до момента $t \equiv \frac{t}{\tau} \leq 1$ действия источника (рис.1) и после отключения источника (рис.2). Из этих рисунков видно, что момент времени $t = \tau$, в течение которого образец подвергается облучению, разделяет порог "структурных" деформационных изменений в материале. Под действием внешнего импульса при временах $t \leq \tau$ в образце генерируются волны упругих напряжений, однако очень малые по амплитуде.



8



Профиль напряжения $\sigma(x,t)$, который формируется после отключения источника при $t > \tau$, есть одиночный импульс типа ударной волны; мы наблюдаем образования больших по амплитуде упругих напряжений в образце. Амплитуда этих напряжений прямо пропорциональна интенсивности облучения и растет с увеличением энергии Ео и плотности тока ионов j. Что касается скорости импульса напряжений, образуемого после отключения источника, то она от ј не зависит. После отражения от правой границы, импульс упругих напряжений движется в обратном направлении, но при этом он меняет свой знак на противоположный. Мы наблюдали эволюцию импульса напряжений после многократных отражений от концов образца в течение $t\sim 2,5\tau,$ и при этом сколь угодно заметных изменений его формы и скорости мы не обнаружили. Тем не менее вопрос о точной оценке изменения амплитуды и скорости импульса упругих напряжений за достаточно большой период времени требует детального исследования.

Известные решения [9-12], полученные в рамках теории термоупругости (на основе используемой нами модели), показывают, что связанность полей температуры и напряжений очень слабая. Динамический эффект здесь состоит в том, что быстрый нагрев создает напряжения в твердом теле [10,12]. Численные результаты, представленные на рис.2, показывают, что большие по амплитуде упругие напряжения образуются в режиме "быстрого охлаждения" (т:е. после отключения источника при $t > \tau$). Зависимость амплитуды и формы упругих напряжений от интенсивности и формы источника приведена на рис.3. Из рис.3 видно, что максимум амплитуды прямо пропорционален произведению qo · Ro, амплитуды теплового источника q(x,t) на R_0 -глубину проникновения пучка (т.е. заштрихованная площадка на рис.4). Форма упругих напряжений более сложным образом зависит от формы источника (см. рис.4). Тем не менее можно надеяться, что, моделируя различные формы источника с помощью пучка ионов, можно получить различные формы упругих напряжений.

Скорость распространения упругих напряжений больше, чем ско-

10



рость звука в образце из железа при нормальных условиях $T = T_0$ и $\alpha = 0$ (связь отсутствует). Оценим скорость образовавшегося импульса упругих напряжений. Для времен $t > \tau$ (q = 0) второе уравнение системы (3)—(4) перепишем в следующем виде:

$$\frac{\partial^2 T}{\partial t^2} \approx -\beta T_0 \frac{\partial^2 \sigma_x}{\partial t^2}.$$

Подставляя последнее соотношение в первое уравнение системы имеем $\frac{\partial^2 \sigma_x}{\partial t^2} = \tilde{v}_s^2 \frac{\partial^2 \sigma_x}{\partial x^2},$

где

$$\tilde{v}_s^2 = \frac{v_s^2}{1 - \alpha \beta T_0}.$$

Отсюда с учетом значений $v_s = 151,23$ ($v_s = 5041\frac{\text{m}}{\text{c}}$), $\alpha = 3,196 \cdot 10^2, \beta = 7,356 \cdot 10^{-6}$ и $T_0 \approx \frac{T_{0\text{max}} + T_{0\text{min}}}{2} \approx 8$, можно получить следующую оценку для \tilde{v}_s : $\tilde{v}_s \approx 152,1$ ($\tilde{v}_s \approx 5070\frac{\text{m}}{\text{c}}$). Далее из численных расчетов можно получить значение скорости импульса напряжений, который образуется в образце после отключения источника:

$$\tilde{v}_{\text{pacy.}} = \frac{\Delta x}{\Delta t} \approx 152, \quad (\tilde{v}_{\text{pacy.}} \approx 5067 \frac{M}{c}).$$



t77

0.45

t)τ

0.45

t>7

0.45

0.30

0.50

Рис. 4

~

12

Сравнение значений \tilde{v}_s и $\tilde{v}_{\text{pacy.}}$ показывает их хорошее совпадение.

Полученные результаты на данном этапе носят предварительный характер, их интерпретация для понимания глубинных физических процессов требует более детального анализа. Здесь, на наш взгляд, также необходимо изучение термоупругих свойств исследуемого материала в тесной связи с его пластическими свойствами, для чего планируются дальнейшие исследования.

Авторы выражают благодарность профессору И.Н.Мешкову за полезные обсуждения. Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, грант РФФИ-97-01-01040.

Литература

- Stinnett R.W. et.al. Thermal surface treatment using intense, pulsed ion beams.//Proc. Materials Research Society Symp.: Materials Synthesis and Processing Using Ion Beams. V.316. P.521-532. Boston. 1994.
- [2] Диденко А.Н., Лигачев А.Е., Куракин И.Б. Воздействие пучков заряженных частиц на поверхность металлов и сплавов. М.: Энергоатомиздат, 1987.
- [3] Коренев С.А. Импульсная взрывная ионная вакуумная конденсация. Препринт ОИЯИ. P13-89-615. 1989.
- [4] Анисимов С.И, Имас Я.А., Романов Г.С., Ходыко Ю.В. Действие излучения большой мощности на металлы. М.: Наука, 1970.
- [5] Быковский Ю.А., Неволин В.Н., Фоминский В.Ю. Ионная и лазерная имплантация металлических материалов. М.: Энергоатомиздат, 1991.
- [6] Зельдович Я.Б., Райзер Ю.П. Физика ударных волн и высокотемпературные гидродинамические процессы. М.: Наука, 1966.
- [7] Коренев С.А., Лигачев А.Е., Мешков И.Н., Переводчиков В.И. Труды I Международного симпозиума по пучковым технологиям (BT'95). Дубна. 1995.
- [8] Balakin A.N., Isakov M.G., Kastchenko A.P., Meshkov I.N., Strokovsky G.S. The electron beam treatment of heat-zinced steel. 1st Int. Symp. "Beam technologies" (BT'95). p.45. Dubna. Russia. 1995.
- [9] Новацкий В. Вопросы термоупругости. М.: Изд-во АН СССР, 1962.

- [10] Коваленко А.Д. Введение в термоупругость. Киев: Наукова Думка, 1965.
- [11] Ландау Л.Д., Лифшищ Е.М. Теория упругости. М.: Наука, 1987.
- [12] Новацкий В. Теория упругости. М.: Мир, 1975.
- [13] Ганн В.В., Жуков А.И., Блажевич С.В. // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Физика радиационных повреждений и радиационное материаловедение. 1983. вып. 4(27). С. 75—78.
- [14] Davis H.A. et.al.//Annual Report of Los Alamos National Laboratory, 1995.
- [15] Richtmyer R.D. Difference methods for initial-value problems. Interscience Publishers, Inc. New York. 1957.
- [16] Калиткин Н.Н. Численные методы. М.: Наука, 1978.
- [17] Самарский А.А., Гулин А.В. Численные методы. М.: Наука, 1989.

Рукопись поступила в издательский отдел 20 марта 1998 года.