

Министерство образования и науки Российской Федерации
федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования
**«НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ТОМСКИЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»**

Институт Физико-технический

Направление подготовки Техническая физика

Кафедра Экспериментальной физики

МАГИСТЕРСКАЯ ДИССЕРТАЦИЯ

Тема работы
Тепловые процессы и эрозия поверхности металлов под действием мощных короткоимпульсных ионных пучков

УДК _____

Студент

Группа	ФИО	Подпись	Дата
ОДМ41	Трунцева Р.П.		

Руководитель

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор	Блейхер Г.А.	д.ф.-м.н.		

КОНСУЛЬТАНТЫ:

По разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Черепанова Н.В.	к.ф.н.		

По разделу «Социальная ответственность»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Ассистент	Гоголева Т.С.	к.ф.-м.н.		

ДОПУСТИТЬ К ЗАЩИТЕ:

Зав. кафедрой	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата

**Результаты обучения магистров
направления 16.04.01 «Техническая физика»
(профиль «Пучковые и плазменные технологии»)**

Код результата	Результат обучения (выпускник должен быть готов)	Требования ФГОС, критериев и/или заинтересованных сторон
<i>Профессиональные компетенции</i>		
P1	Демонстрировать и использовать теоретические и практические знания фундаментальных и прикладных наук, составляющих основу современной технической физики, вскрывать физическую сущность проблем, возникающих при проектировании и реализации радиационных и плазменных технологий.	Требования ФГОС (ПК-2, 4). Критерий 5 АИОР, согласованный с требованиями международных стандартов EUR-ACE и FEANI
P2	Профессионально эксплуатировать современное научное и технологическое оборудование и приборы в процессе создания и реализации радиационных и плазменных технологий	Требования ФГОС (ПК-1). Критерий 5 АИОР, согласованный с требованиями международных стандартов EUR-ACE и FEANI
P3	Заниматься научно-исследовательской деятельностью в различных отраслях технической физики, связанных с современными радиационными и пучково-плазменными технологиями, критически анализировать современные проблемы, ставить задачи и разрабатывать программу исследований, выбирать адекватные методы решения задач, интерпретировать, представлять и применять полученные результаты	Требования ФГОС (ПК-5, 6, 9). Критерий 5 АИОР, согласованный с требованиями международных стандартов EUR-ACE и FEANI
P4	Самостоятельно выполнять физико-технические научные исследования для прогнозирования результатов воздействия различных радиационных и плазменных потоков на вещество, а также оптимизации параметров радиационных и пучково-плазменных технологий, с использованием современных физико-математических методов, стандартных и специально разработанных инструментальных и программных средств.	Требования ФГОС (ПК-7, 8). Критерий 5 АИОР, согласованный с требованиями международных стандартов EUR-ACE и FEANI
P5	Разрабатывать и оптимизировать современные пучковые и плазменные технологии с учетом экономических и экологических требований, проводить наладку и испытания технологических установок и аналитического оборудования, решать прикладные инженерно-технические и технико-экономические задачи с помощью пакетов прикладных программ.	Требования ФГОС (ПК-10, 11,12). Критерий 5 АИОР, согласованный с требованиями международных стандартов EUR-ACE и FEANI

Код результата	Результат обучения (выпускник должен быть готов)	Требования ФГОС, критериев и/или заинтересованных сторон
Р6	Участвовать в проектно-конструкторской деятельности, формулировать технические задания, составлять техническую документацию, разрабатывать и использовать средства автоматизации, анализировать варианты проектных, конструкторских и технологических решений, разрабатывать проекты и проектную документацию для создания оборудования, реализующего пучковые и плазменные технологии.	Требования ФГОС (ПК-13, 14). Критерий 5 АИОР, согласованный с требованиями международных стандартов EUR-ACE и FEANI
Р7	Заниматься научно-педагогической деятельностью в области технической физики, участвовать в разработке программ учебных дисциплин, проводить учебные занятия, обеспечивать практическую и научно-исследовательскую работу обучающихся, применять и разрабатывать новые образовательные технологии	Требования ФГОС (ПК-18, 19, 20). Критерий 5 АИОР, согласованный с требованиями международных стандартов EUR-ACE и FEANI
Р8	Заниматься организационно-управленческой деятельностью, владеть приемами и методами работы с персоналом, находить оптимальные решения при реализации технологий и создании продукции, управлять программами освоения новой продукции и технологий.	Требования ФГОС (ПК-15, 16, 17). Критерий 5 АИОР, согласованный с требованиями международных стандартов EUR-ACE и FEANI
Р9	Осуществлять научно-инновационную деятельность, анализировать и систематизировать научно-техническую информацию, передовой отечественный и зарубежный опыт в области радиационных и пучково-плазменных технологий, внедрять и коммерциализировать новые наукоемкие технологии, готовить документы по защите интеллектуальной собственности, разрабатывать планы и программы организации инновационной деятельности, осуществлять технико-экономическое обоснование инновационных проектов.	Требования ФГОС (ПК-21, 22, 23, 24). Критерий 5 АИОР, согласованный с требованиями международных стандартов EUR-ACE и FEANI
<i>Универсальные компетенции</i>		
Р10	Развивать свой интеллектуальный и общекультурный уровень, в течение всей жизни самостоятельно обучаться новым методам исследований, пополнять свои знания в области современной технической физики и смежных наук, расширять и углублять свое научное мировоззрение.	Требования ФГОС (ОК-1, 2, 6). Критерий 5 АИОР, согласованный с требованиями международных стандартов EUR-ACE и FEANI
Р11	Активно общаться в научной, производственной и социально-общественной сферах деятельности, свободно и грамотно пользоваться русским и иностранными языками как средством делового общения	Требования ФГОС (ОК-3). Критерий 5 АИОР, согласованный с требованиями международных стандартов EUR-ACE и FEANI

Код результата	Результат обучения (выпускник должен быть готов)	Требования ФГОС, критериев и/или заинтересованных сторон
Р12	Участвовать в организации научно-исследовательских и научно-производственных работ, проявлять инициативу, брать на себя всю полноту ответственности, уметь находить творческие, нестандартные решения профессиональных и социальных задач.	Требования ФГОС (ОК-4, 5, ПК-3). Критерий 5 АИОР, согласованный с требованиями международных стандартов EUR-ACE и FEANI

Министерство образования и науки Российской Федерации
 Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
 высшего профессионального образования
**«НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
 ТОМСКИЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»**

Институт Физико-технический
 Направление подготовки (специальность) Техническая физика
 Кафедра Экспериментальной физики

УТВЕРЖДАЮ:
 Зав. кафедрой

 (Подпись) (Дата) (Ф.И.О.)

**ЗАДАНИЕ
 на выполнение выпускной квалификационной работы**

В форме:

Магистерской диссертации <small>(бакалаврской работы, дипломного проекта/работы, магистерской диссертации)</small>

Студенту:

Группа	ФИО
ОДМ41	Трунцевой Руслане Павловне

Тема работы:

Тепловые процессы и эрозия поверхности металлов под действием мощных короткоимпульсных ионных пучков
Утверждена приказом директора (дата, номер)

Срок сдачи студентом выполненной работы:	23.06.2016
--	------------

ТЕХНИЧЕСКОЕ ЗАДАНИЕ:

Исходные данные к работе	Компьютерная программа TERM_ENERGY, выполняющая моделирование тепловых процессов и фазовых превращений первого рода в твёрдом теле под действием мощных импульсных пучков заряженных частиц, созданная на кафедре ВЭПТ ФТИ ТПУ. В ней коэффициенты теплопроводности и теплоемкости приняты постоянными.
Перечень подлежащих исследованию, проектированию и разработке вопросов	Освоить методику моделирования тепловых и эрозионных процессов под действием мощных пучков заряженных частиц, научиться работать с комплексом компьютерных программ и применять их для расчетов заданных зависимостей; учесть зависимость теплофизических характеристик облучаемого вещества от температуры. Получить закономерности испарения, расхода энергии на удаление частиц с поверхности, глубины проплавления, времени существования

	<p>жидкой фазы и т.д. в зависимости от параметров пучков (энергии частиц, длительности импульса, плотности мощности), проанализировать изменение составляющих баланса энергии в зависимости от длительности импульса, плотности мощности и поперечных размеров следа пучка на поверхности мишени.</p> <p>Сопоставить характеристики эрозии и фазовых превращений под действием сфокусированных короткоимпульсных ионных пучков со случаем лазерного излучения аналогичной длительности импульса и плотности мощности.</p>
<p>Перечень графического материала</p>	<ol style="list-style-type: none"> 1. Введение. 2. Актуальность. 3. Цель, задачи. 4. Объекты исследования. 5. Параметры мощных короткоимпульсных ионных пучков (МКИП). 6. Процессы, которые происходят в веществе под действием МКИП. 7. Модель тепловых процессов и эрозии в твердом теле под действием мощных импульсных пучков заряженных частиц. 8. Расчет температур и толщины испарившегося и расплавленного слоев. 9. Теплопроводность $\lambda(T)$. 10. Теплоемкость $c(T)$. 11. МКИП с большим следом на поверхности: фазовые переходы. 12. Эволюция плавления и испарения мишени. 13. Зависимость толщины испарившегося слоя и энергии пучка, необходимой для удаления одного атома от длительности импульса. 14. Зависимость толщины расплавленного слоя и времени существования жидкой фазы от длительности импульса. 15. Удаление вещества с поверхности твердого тела под действием МКИП. 16. Сравнение действия на поверхность МКИП с широким следом и сфокусированных. 17. Зависимость толщины испарившегося слоя и энергии пучка, необходимой для удаления одного атома меди от длительности импульса. 18. Зависимость толщины расплавленного слоя и времени существования жидкой фазы меди от длительности импульса. 19. Сравнение действия на поверхность сфокусированных МКИП и импульсного

	<p>лазерного излучения</p> <p>20. Характерные параметры излучений.</p> <p>21. Зависимость толщины испарившегося слоя и энергии пучка, необходимой для удаления одного атома от длительности импульса.</p> <p>22. Зависимость толщины расплавленного слоя и времени существования жидкой фазы от длительности импульса.</p> <p>23. Положения на защиту.</p> <p>24. Заключение.</p> <p>25. Публикации.</p>
--	--

Консультанты по разделам выпускной квалификационной работы

Раздел	Консультант
Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение	Доцент Черепанова Н.В., к.ф.н.
Социальная ответственность	Ассистент Гоголева Т.С., к.ф.-м.н.
Раздел на иностранном языке (английский)	Старший преподаватель Ермакова Я.В.

Названия разделов, которые должны быть написаны на русском и иностранном языках:

Введение.
Математическое описание тепловых и эрозионных процессов в твердом теле под действием мощных импульсных пучков заряженных частиц.
Описание комплекса компьютерных программ и порядка работы с ним.
Особенности эрозии и тепловых процессов в твердом теле под действием короткоимпульсных ионных пучков.
Сравнение характеристик эрозии поверхности металлов и фазовых превращений, вызываемых облучением сфокусированными мощными короткоимпульсными ионными пучками и лазерным излучением.
Introduction.
The phenomena that occur in a solid under the action of powerful pulsed ion beams.
Interaction of laser radiation on matter
Model of thermal processes and erosion in a solid under the action of powerful pulsed ion beams

Дата выдачи задания на выполнение выпускной квалификационной работы по линейному графику	
---	--

Задание выдал руководитель:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор	Блейхер Г.А.	д.ф.-м.н.		

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
ОДМ41	Трунцева Руслана Павловна		

**ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА
«ФИНАНСОВЫЙ МЕНЕДЖМЕНТ, РЕСУРСОЭФФЕКТИВНОСТЬ И
РЕСУРСОСБЕРЕЖЕНИЕ»**

Студенту:

Группа	ФИО
ОДМ41	Трунцевой Р.П.

Институт	ФТИ	Кафедра	Экспериментальной физики
Уровень образования	Магистратура	Направление/специальность	Техническая физика

Исходные данные к разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»:

1. <i>Стоимость ресурсов научного исследования (НИ): материально-технических, энергетических, финансовых, информационных и человеческих</i>	Стоимость сырья и расходных материалов. Размер заработной платы исполнителям проекта.
2. <i>Нормы и нормативы расходования ресурсов</i>	Трудовым законом предусмотрены нормы рабочих часов в неделю.
3. <i>Используемая система налогообложения, ставки налогов, отчислений, дисконтирования и кредитования</i>	Традиционная система налогообложения. Предусматривает уплату наибольшего количества налогов: налог на прибыль, уплачиваемый юридическими лицами; НДФЛ для индивидуальных предпринимателей и физических лиц; налог на добавленную стоимость; страховые взносы и прочие налоги

Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:

1. <i>Оценка коммерческого и инновационного потенциала НТИ</i>	SWOT-анализ.
2. <i>Разработка устава научно-технического проекта</i>	Определение заинтересованных сторон, целей и результатов проекта. Рабочая группа проекта
3. <i>Планирование процесса управления НТИ: структура и график проведения, бюджет, риски и организация закупок</i>	Календарный план проекта, ограничения и бюджет проекта
4. <i>Определение ресурсной, финансовой, экономической эффективности</i>	

Перечень графического материала (с точным указанием обязательных чертежей):

1. Матрица SWOT
2. График проведения и бюджет НТИ

Дата выдачи задания для раздела по линейному графику

Задание выдал консультант:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
доцент	Черепанова Н.В.			

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
ОДМ41	Трунцева Р.П.		

ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА «СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ»

Студенту:

Группа	ФИО
ОДМ41	Трунцева Р.П.

Институт	Физико-технический	Кафедра	Экспериментальной физики
Уровень образования	Магистратура	Направление/специальность	Техническая физика

Исходные данные к разделу «Социальная ответственность»:

<p>1. Описание рабочего места (рабочей зоны, технологического процесса, механического оборудования) на предмет возникновения:</p>	<p>Вредные и опасные факторы рабочего места:</p> <ul style="list-style-type: none"> – психофизиологический фактор; – микроклимат; – освещение; – шумы; – повышенный уровень электромагнитных излучений; – ионизирующее излучение; – электробезопасность; – пожаровзрывоопасность.
<p>2. Знакомство и отбор законодательных и нормативных документов по теме</p>	<p>Электробезопасность, пожаровзрывоопасность и требования к работе на ПЭВМ</p>

Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:

<p>1. Анализ выявленных вредных факторов проектируемой производственной среды в следующей последовательности:</p>	<ul style="list-style-type: none"> – действие фактора на организм; – приведение допустимых норм; – предлагаемые средства защиты.
<p>2. Анализ выявленных опасных факторов проектируемой производственной среды в следующей последовательности</p>	<ul style="list-style-type: none"> – электробезопасность (в т.ч. статическое электричество, средства защиты); – пожаровзрывоопасность (в т.ч. причины, профилактические мероприятия).

Дата выдачи задания для раздела по линейному графику	
--	--

Задание выдал консультант:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Ассистент	Гоголева Т.С.	к.ф.-м.н.		

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
ОДМ41	Трунцева Р.П.		

РЕФЕРАТ

Выпускная квалификационная работа содержит 131 с., 56 рис., 8 табл., 26 источников, 1 приложение, 28 слайдов.

Ключевые слова: мощные короткоимпульсные ионные пучки, энергоэффективность эрозии, испарение, плавление, функция энергосвечения, лазерный импульс.

Объектом исследования является влияние параметров пучков (длительность импульса, плотность мощности) на характеристики эрозии и тепловых процессов в поверхностных слоях вещества при обработке мощными короткоимпульсными ионными пучками с большой и малой площадью следа на поверхности.

Цель работы – выявить закономерности фазовых превращений и эрозии поверхности металлов при облучении мощными ионными пучками длительностью 10-500 нс в зависимости от их параметров.

В процессе исследования проводилось моделирование диссипации энергии, расчет количества испаренного, распыленного и расплавленного вещества, времени существования жидкой фазы и затрат энергии на удаление одного атома. В результате исследования была определена зависимость данных параметров от длительности импульса. Выявлены режимы облучения, для которых толщины расплавленного и испаренного слоев являются максимальными. Проведено сравнение эффективности обработки поверхности мощными короткоимпульсными ионными пучками с малой и большой площадью следа на поверхности. Выявлено, что сфокусированные мощные короткоимпульсные ионные пучки обеспечивают большую толщину испарившегося и расплавленного слоев, чем импульсное лазерное излучение.

Основные характеристики мощных короткоимпульсных ионных пучков: энергия ионов в пучке, плотность тока, плотность энергии, плотность мощности, длительность импульса, площадь следа на поверхности. Основные характеристики импульсного лазерного излучения: плотность энергии, плотность мощности, длительность импульса, коэффициент объемного поглощения, поверхностная поглощательная способность.

Степень внедрения: разработан программный комплекс, производящий расчёт характеристик тепловых процессов и эрозии поверхности вещества при облучении мощными короткоимпульсными ионными пучками на основе программы TERM_ENERGY, моделирующую тепловые и эрозионные процессы в твёрдом теле при облучении мощными импульсными пучками заряженных частиц.

Область применения: пучковые и плазменные технологии обработки материалов

Экономическая значимость работы заключается в том, что создается комплекс программ, позволяющий определить эффективность эрозии и тепловых процессов в поверхности металлов под действием мощного короткоимпульсного ионного излучения с заданными параметрами, не прибегая к проведению эксперимента.

Оглавление

Введение.....	14
Глава 1. Математическое описание тепловых и эрозионных процессов в твердом теле под действием мощных импульсных пучков заряженных частиц.	17
1.1 Параметры современных мощных импульсных пучков заряженных частиц	17
1.2 Явления, которые происходят в твердом теле под действием мощных импульсных пучков заряженных частиц	18
1.3 Моделирование тепловых процессов	21
1.4 Фазовые превращения первого рода и их описание в математической модели	23
1.4.1 Плавление вещества	23
1.4.2 Расчет скорости испарения	24
1.4.3 Теплота испарения	27
1.5 Распыление вещества под действием мощных ионных пучков	29
1.6 Постановка задачи	31
Глава 2. Описание комплекса компьютерных программ и порядка работы с ним	33
2.1 Методика построения пространственно-временной функции энерговыделения при торможении средних и тяжелых ионов с энергией от 100 до 1000 кэВ	33
2.2 Описание компьютерной программы, с помощью которой производится расчет линейных потерь энергии	36
2.3 Зависимости теплофизических свойств вещества от температуры и влияние их учёта на результаты расчётов	40
2.4 Описание компьютерной программы, с помощью которой производится расчет тепловых процессов и эрозии поверхности металлов под действием мощных импульсных ионных пучков.....	44
Глава 3. Особенности эрозии и тепловых процессов в твердом теле под действием короткоимпульсных ионных пучков.....	49
3.1 Эрозия поверхности МИП с большой площадью следа на поверхности.....	49
3.1.1 Эволюция испарения и потери энергии пучка в парах вещества мишени..	49

3.1.2	Изменение величины плотности энергии для инициации начала испарения при увеличении длительности импульсов ионных пучков с широким следом на поверхности.	51
3.1.3	Изменение толщины испарившегося слоя в зависимости от длительности импульса ионных пучков с широким следом на поверхности	52
3.1.4	Распыление поверхности под действием короткоимпульсных ионных пучков с широким следом на поверхности	54
3.1.5	Зависимость интенсивности и энергоэффективности эрозии поверхности от длительности импульса короткоимпульсного пучка ионов с широким следом на поверхности	58
3.1.6	Анализ баланса энергии при короткоимпульсном воздействии пучками ионов с широким следом на поверхность.....	61
3.2	Образование жидкой фазы (глубина проплавления и время существования жидкой фазы)	63
3.3	Сравнение характеристик эрозии и тепловых процессов на поверхности при ее облучении мощными короткоимпульсными ионными пучками с широким следом и сфокусированными	66
Глава 4.	Сравнение характеристик эрозии поверхности металлов и фазовых превращений, вызываемых облучением сфокусированными мощными короткоимпульсными ионными пучками и лазерным излучением.....	70
4.1	Особенности взаимодействия лазерного излучения с металлами	70
4.2	Функция энерговыделения при описании теплового воздействия лазерного излучения на металлы	73
4.3	Анализ толщины испарившегося вещества и энергоэффективности удаления атомов с поверхности в зависимости от мощности и длительности импульсов лазерного излучения, сопоставление со случаем сфокусированных ионных пучков.....	74
4.4	Сопоставление характеристик плавления под действием сфокусированных импульсных ионных пучков и лазерного излучен.....	83
5	Финансовый менеджмент.....	90
6	Социальная ответственность	105
	Заключение	116
	Список публикаций студента.....	118
	Список использованных источников	119

Приложение А	122
--------------------	-----

Введение

Развитие техники в современном мире приводит к потребности в новых, модифицированных материалах. Такие материалы получают различными способами: 1) классический способ, основанный на плавлении и затвердевании расплава с возможной последующей термомеханической и химико-термической обработкой; 2) схема, основанная на смешении веществ (порошки, нанокристаллы) с последующим силовым и термическим воздействием для компактизации и стабилизации структуры; 3) схема, основанная на принципе одновременного создания материала и изделия (возможно осуществить путем атомной сборки материала методами нанотехнологии, нанесения покрытий) [1]. Обработка поверхности мощными короткоимпульсными ионными пучками связана с термическим воздействием на вещество. Однако воздействие импульсного ионного излучения на вещество отличается от указанных способов, потому что речь идет о концентрированном потоке энергии, время воздействия на поверхность которого не превышает микросекунды. Имеют место быстропротекающие процессы плавления, испарения, распыления на которые расходуется большая часть энергии импульсного пучка. Данные процессы протекают в поверхностных и приповерхностных слоях вещества мишени. В связи с такими особенностями взаимодействия данного источника излучения с поверхностью, мощные короткоимпульсные ионные пучки нельзя относить к указанным выше способам.

В настоящее время данная технология используется для синтеза новых материалов, улучшения механических характеристик (твердость); осаждения покрытий; сварки и резки.

Для создания технологии обработки материалов необходимы надежные инструменты, позволяющие прогнозировать результаты воздействия пучков на вещество и определять оптимальные параметры облучения для достижения тех или иных целей. В качестве таких инструментов весьма эффективным оказываются различные расчетные методики, использующие математические модели.

Особенность воздействия мощных короткоимпульсных пучков ионов на вещество по сравнению с пучками невысокой интенсивности состоит в том, что поверхностные слои облучаемого твердого тела испытывают сильный радиационный разогрев. Поэтому очень часто именно тепловые процессы оказываются причиной значительного изменения свойств обработанной поверхности, причём скорости нагрева и охлаждения облучаемого вещества оказываются на много порядков выше, по сравнению с традиционными технологиями, основанными на термическом воздействии. Временные масштабы наиболее значительных изменений температуры и фазовых превращений лежат в нано– и микросекундных диапазонах. Экспериментально их исследовать пока не представляется возможным. Следовательно, моделирование тепловых процессов должно производиться с особой тщательностью.

В настоящее время в научной литературе описаны модели тепловых процессов в твердом теле под действием мощных короткоимпульсных пучков ионов [3-7]. При этом часто теплофизические свойства облучаемых веществ в них принимаются постоянными. Такое приближение несколько упрощает задачу. В настоящей работе реализован учёт зависимости теплофизических свойств облучаемого вещества от температуры. Выявлена роль этого фактора в количественных зависимостях различных характеристик тепловых и эрозионных процессов от температуры.

Немаловажен подбор оптимальных параметров ионного пучка (энергия ионов, поток, плотность энергии, длительность импульса) для обеспечения наиболее энергоэффективного создания фазовых превращений на поверхности металлических материалов. Необходимо определить зависимость характеристик эрозии и плавления поверхности мишени от параметров пучков ионов.

Следует отметить также использование сфокусированных короткоимпульсных ионных пучков. Они широко используются в материаловедении для локального анализа, напыления и травления материалов.

Но в обработке, основанной на термическом действии пучка, они практически не задействованы. Это связано и с техническими трудностями их генерации, и с недостатком представлений об их физических возможностях в создании фазовых превращений на поверхности материалов. Тем не менее, вполне вероятно, что в дальнейшем они найдут применение в данной области. Здесь появляется вопрос об энергоэффективности их использования, в том числе по сравнению с широко используемым мощным лазерным излучением.

Таким образом, цель настоящей работы состоит в выявлении закономерностей фазовых превращений и эрозии поверхности металлов при облучении мощными ионными пучками (МИП) длительностью 100 нс и короче в зависимости от их параметров. Рассмотреть два вида короткоимпульсных МИП: с большим следом на облучаемой поверхности (с площадью следа от нескольких единиц до нескольких десятков квадратных сантиметров) и сфокусированных МИП (с площадью следа не больше нескольких квадратных миллиметров).

Задачи работы были следующими: 1) освоить методику моделирования тепловых и эрозионных процессов в металлах под действием мощных пучков заряженных частиц, научиться работать с комплексом компьютерных программ и применять их для расчётов заданных зависимостей; учесть зависимость теплофизических характеристик облучаемого вещества от температуры и создать программный модуль для их реализации; 2) получить закономерности испарения, расхода энергии на удаление атомов с облучаемой поверхности, глубины проплавления, времени существования жидкой фазы и т.д. в зависимости от параметров пучков (энергии частиц, длительности импульса, плотности мощности), проанализировать изменение составляющих баланса энергии на облучаемой поверхности в зависимости от длительности импульса, плотности мощности и поперечных размеров следа пучка на поверхности мишени; 3) сопоставить характеристики эрозии и фазовых превращений под действием сфокусированных короткоимпульсных ионных пучков со случаем лазерного излучения аналогичной длительности и плотности мощности.

Глава 1. Математическое описание тепловых и эрозионных процессов в твердом теле под действием мощных импульсных пучков заряженных частиц

Диссипация энергии пучков заряженных частиц в веществе представляет собой превращение их кинетической энергии в тепловую. Количество энергии, мощность её ввода в вещество, пространственно-временное распределение объёмной мощности энерговыделения во многом определяют модифицирующее действие пучка, в особенности для импульсных режимов облучения [3].

В настоящей главе описаны подходы к математическому моделированию явлений, обуславливающих диссипацию энергии мощных импульсных пучков заряженных частиц в веществе. Показана необходимость детального изучения эволюции тепловых процессов.

1.1 Параметры современных мощных импульсных пучков заряженных частиц

Пучком заряженных частиц называется совокупность частиц, движущихся по близким траекториям в одном направлении, имеющая малые поперечные размеры по сравнению с длиной. Частицы движутся со скоростью, много выше скорости их хаотического теплового движения.

Взаимодействие мощных импульсных пучков заряженных частиц (МИП ЗЧ) с твердым телом активно исследуется с момента создания импульсных ускорителей, так как даже первые эксперименты по их воздействию на твёрдое тело показали, что происходящие в веществе изменения являются уникальными. В частности, тонкие поверхностные слои быстро разогреваются до очень высоких температур с последующим высокоскоростным охлаждением. Наблюдается плавление тонких поверхностных слоёв, интенсивное испарение и массоперенос вблизи поверхности, интенсивность которых существенно превышает показатели, свойственные непрерывному слабotoчному облучению, и др. [3].

Параметры импульсного пучка, характеризующие их модифицирующее действие на вещество: вид частиц в пучке, их начальная энергия, плотность тока в пучке, длительность облучения, плотность энергии, частота следования импульсов (для импульсно-периодических режимов облучения), флюенс и др.

Для современных установок, генерирующих пучки ускоренных заряженных частиц в импульсном режиме, свойственны следующие значения параметров:

- вид ионов: на примере однократно и положительно заряженных ионов углерода (C^+) и аргона (Ar^+);

- плотность мощности: $10^8..10^{10}$ Вт/см²;

- энергия ионов: в диапазоне от 100 до 1000 кэВ;

- длительность импульса: $10^{-9}..10^{-7}$ с;

- площадь следа пучка на поверхности:

случай 1) – пучки относительно большой площади, т.е. $10..100$ см²;

случай 2) – сфокусированные пучки, т.е. $10^{-2}..10^{-1}$ см².

Именно эти параметры пучков были приняты нами во внимание при выполнении расчётов в рамках настоящей работы.

1.2 Явления, которые происходят в твердом теле под действием мощных импульсных пучков заряженных частиц

В основе явлений, которые являются доминирующими при воздействии МИП ЗЧ на твердое тело, лежит быстрый высокотемпературный разогрев тонких поверхностных слоев облучаемого вещества [3].

В результате поверхность вещества может плавиться и испаряться. Имеют место генерация волн сжатия и разгрузки, отколы, образование капельной фракции и т.п.

Эти явления не свойственны непрерывному облучению с малыми и умеренными плотностями тока.

Под действием ионных пучков так же, как и в непрерывном режиме облучения, имеет место распыление. При этом следует учитывать возможность влияние высокой температуры на его интенсивность.

Все перечисленные выше процессы являются быстропротекающими. Их весьма затруднительно исследовать экспериментально (непосредственные эксперименты по измерению температуры, напряжений, плотности трудновыполнимы). Поэтому, математическое моделирование является весьма полезным способом исследования закономерностей этих явлений.

Под действием импульсного пучка вещество переходит в неравновесное термодинамическое состояние. Оно претерпевает нагрев, плавление и испарение. Рассмотрим особенности протекания и способы математического описания этих явлений.

Поток ускоренных частиц, который падает на поверхность, является источником тепловыделения, поскольку часть его энергии, поглощенная мишенью, переходит в тепловую. Уровень и интенсивность разогрева мишени зависит от начальной энергии частиц пучка, плотности тока, длительности облучения, теплофизических характеристик вещества мишени и условий теплообмена со средой. Кинетическая энергия ускоренных частиц превращается во внутреннюю энергию вещества в результате упругих и неупругих взаимодействий ускоренных частиц с ядрами и электронной подсистемой вещества. В результате энергия пучка превращается в следующие виды энергии:

- энергию отраженного излучения;
- тепловую энергию вещества в зоне торможения частиц, часть из которой распространяется в облучаемый образец путем теплопроводности;
- энергию фазовых переходов;
- энергию, уносимую через поверхность частицами облучаемого вещества (в случае эрозии поверхности);

- энергию, теряемую потоками излучения в пароплазменном слое, образованном в результате эрозии поверхности;
- энергию теплового излучения и энергию, передаваемую окружающей среде в результате конвективного теплообмена (в импульсном режиме облучения последняя, как правило, ничтожно мала по сравнению с предыдущими).

При упругих взаимодействиях с ядрами атомов кинетическая энергия ускоренных частиц (касается ионов) передается непосредственно ядрам атомов. Также значительная доля энергии ионов выделяется при их неупругих взаимодействиях с электронной подсистемой облучаемого вещества. Затем избыточная энергия передаётся от сильно разогретых электронов атомам вещества. Оценки показывают, что выравнивание температур электронной и ионной подсистем в металлах происходит за время около $10^{-11} - 10^{-10}$ с [8]. Поэтому условно считают, что при длительности импульса облучения больше 10^{-8} с является корректным понятие мгновенного источника теплоты, которое подразумевает, что релаксация между электронной и фононной подсистемами происходит мгновенно, следовательно, разницы температур между ними не существует.

В результате энергия тепловых колебаний атомов облучаемого вещества возрастает. Следовательно, возрастает и температура тела.

Появляющийся поток тепла \vec{S} будет распространяться в облучаемом веществе по закону Фурье:

$$\vec{S} = -\lambda \cdot \text{grad}T, \quad (1.1)$$

где λ - коэффициент теплопроводности.

Градиент температуры является сложным вектором. Направлен он по нормали к изотермической поверхности. Его считают положительным, если направлен он в сторону возрастания температуры.

При интенсивном нагреве мишени возможно ее плавление и испарение. В связи с тепловым движением некоторая часть молекул поверхности имеет достаточные скорости, для преодоления удерживающих их сил. Интенсивность

испарения и динамика его протекания зависят от температуры, давления и условий движения слоев над поверхностью. Интенсивность характеризуется скоростью испарения. Под скоростью испарения понимается количество вещества, удаляемое с поверхности при испарении в единицу времени.

1.3 Моделирование тепловых процессов

Так как результат действия МИП ЗЧ на вещество в первую очередь обуславливается высокотемпературным разогревом, то особое внимание следует уделять моделированию тепловых процессов. В настоящем разделе описана математическая модель тепловых процессов в твёрдом теле при его облучении МИП ЗЧ, которая позволила выявить наиболее существенные закономерности эволюции тепловых и эрозионных процессов в зависимости от параметров пучков. Она разработана авторами статьи [7] и частично описана в ней.

Данная модель испарения предполагает расчет температур в конденсированной фазе с помощью уравнения теплопроводности, которое можно записать в следующем виде [7]:

$$\frac{\partial E_T(x,t)}{\partial t} - v_f \frac{\partial E_T(x,t)}{\partial x} = \lambda \frac{\partial^2 T(x,t)}{\partial x^2} + W(x,t), \quad (1.2)$$

$$T = \begin{cases} E_T / c\rho, & E_T \leq E_m, \\ T_m, & E_m < E_T \leq E_m + q_m\rho, \\ T_m + (E_T - (E_m + q_m\rho)) / c\rho, & E_T > E_m + q_m\rho. \end{cases} \quad (1.3)$$

Здесь $T(x,t)$ - пространственно-временное распределение температуры (ось x направлена перпендикулярно облучаемой поверхности); E_T – тепловая компонента внутренней энергии вещества мишени; $W(x,t)$ – пространственно-временная функция энерговыведения; λ , c , ρ - соответственно коэффициент теплопроводности, удельная теплоемкость и плотность облучаемого вещества; T_m и q_m – температура и удельная теплота плавления; $E_m = T_m c \rho$.

Условия на границе раздела «конденсированная среда – газ» ($x=0$) [7]:

$$\lambda \left. \frac{\partial T(x,t)}{\partial x} \right|_{x=0} = \rho_0 v_f \Delta H, \quad (1.4)$$

где v_f – скорость фронта испарения, ΔH – разность энтальпий паровой и конденсированной фаз.

Рассматривается ограниченная теплоизолированная мишень, в приповерхностной области которой выделяется энергия вследствие торможения излучения.

Корректность использования в данной модели одномерного приближения объясняется тем, что толщина слоя, охваченного значительным радиационным разогревом и фазовыми превращениями, намного меньше диаметра пучка [7].

Необходимо учитывать затраты тепловой энергии на испарение на облучаемой поверхности:

$$\lambda \left. \frac{\partial T(x,t)}{\partial x} \right|_{x=0} = v_F \rho L(T), \quad (1.5)$$

где $L(T)$ – удельная теплота испарения при температуре T .

Если пренебрегать разностью температур паровой и конденсированной фаз и изменением объема при переходе вещества из конденсированного состояния в пар, то для удельной теплоты испарения получится следующее выражение [3]:

$$L = L_0 - \frac{1}{2} nkT = L_0 - RT / 2A, \quad (1.6)$$

где L_0 – удельная теплота сублимации при 0 К (Дж/кг), n – количество атомов вещества в единице массы (шт./кг), k – постоянная Больцмана, R – универсальная газовая постоянная, A – молярный вес.

Расчет скорости испарения проводим из уравнения (1.12) Герца-Кнудсена. При этом необходимо задавать соответствующие газодинамические условия, а именно необходимо учитывать величину давления паров вещества мишени на поверхность.

В данной работе рассматривается одномерная модель. Ее возможно использовать при выполнении условия:

$$r_{\text{пучка}} \gg \sqrt{at}, \quad (1.7)$$

где $r_{\text{пучка}}$ – радиус пучка, a – коэффициент температуропроводности, t – время наблюдения. Величина \sqrt{at} описывает расстояние, на которое тепловая волна распространяется за время наблюдения. Другими словами, если в течение наблюдения тепловая волна распространяется в облучаемом теле на расстояния, много меньшие радиуса падающего пучка, то подход корректен. Поскольку наибольшее значение имеют начальные стадии нагрева, то использование одномерной модели приемлемо.

В представленном математическом описании тепловых и эрозионных процессов нет учёта зависимости теплофизических характеристик облучаемого вещества от температуры.

1.4 Фазовые переходы первого рода и их описание в математической модели

1.4.1 Плавление вещества

Вещества, имеющие кристаллическую структуру, испытывают переход из твердого в жидкое состояние при некоторой определенной температуре. Это происходит при такой температуре, когда смещения частиц из положений равновесия соизмеримы с равновесными расстояниями между частицами в решетке. Процесс плавления однокомпонентного кристалла происходит при постоянной для данного давления температуре.

Чтобы расплавить некую область вещества, разогретую до температуры плавления, ей необходимо сообщить тепло в количестве $Q_{\text{melt}} = q_{\text{melt}} V\rho$, где q_{melt} – удельная теплота плавления, V – объем этой области. При этом $T = T_{\text{melt}} = \text{const}$ до тех пор, пока тепловая компонента внутренней энергии в этой области не превысит $E_T = c_\rho(T_{\text{melt}} - T_0) + Q_{\text{melt}}$.

С ростом E_T происходит увеличение температуры жидкости по закону $\Delta T = \Delta E_T / (c_\rho)_{\text{liquid}}$.

Температура T находится из соотношений (1.3).

1.4.2 Расчёт скорости испарения

Герцем было установлено, что: а) для каждого вещества существует максимальная скорость испарения, которая зависит только от температуры поверхности и специфических свойств данного вещества; б) максимальная скорость испарения никогда не может быть больше числа молекул пара, ударяющихся о поверхность конденсата в состоянии равновесия; и верхний предел для максимальной скорости испарения есть:

$$i = \frac{v}{4} n_s \quad (1.8)$$

где v – средняя арифметическая скорость молекулы, n_s – равновесная концентрация молекул пара. Им же было введено понятие коэффициента испарения.

Коэффициент испарения, называемый также коэффициентом конденсации, определяется как отношение скорости испарения в вакууме к максимальному значению скорости, определяемому по формуле (1.8). Он показывает, что из всех молекул пара, ударяющихся о поверхность, только α конденсируется, а $1-\alpha$ отражается обратно в пар. Они дают вклад в давление испаряемого вещества, но не участвуют в молекулярном потоке при переходе. Поэтому в общем случае скорость испарения выражается как:

$$i = \alpha \frac{v}{4} (n_s - n). \quad (1.9)$$

Это уравнение написано для случая, когда вещество испаряется не в вакуум, а в пар с давлением на границе фаз, определяемым концентрацией молекул $n < n_s$. (1.9) есть закон Герца-Кнудсена.

Учитывая, что а) давление и плотность пара связаны уравнением $p = nkT$, б) средняя арифметическая скорость молекулы может быть найдена из распределения Максвелла: $\bar{v} = \sqrt{\frac{8kT}{\pi m}}$, уравнение (1.9) может быть записано в виде:

$$\frac{dN_e}{Sdt} = \alpha(2\pi mkT)^{-1/2}(p_{нас} - p), \quad (1.10)$$

здесь $p_{нас}$ – давление насыщенного пара при температуре T , p – гидростатическое давление испаряемого вещества в газовой фазе.

Уравнение Герца-Кнудсена говорит о том, что число молекул dN_e , испаряющихся с площади поверхности S в единицу времени dt , равно числу молекул, соударяющихся с поверхностью в единицу времени при давлении насыщенного пара $p_{нас}(T)$, за вычетом обратного потока, соответствующего гидростатическому давлению p испаряемого вещества в газовой фазе. При этом следует использовать множитель α , называемый коэффициентом испарения и равный отношению наблюдаемой скорости испарения в вакуум к теоретически возможной величине.

Максимальная скорость испарения равна:

$$\frac{dN_e}{Sdt} = (2\pi mkT)^{-1/2} p_{нас}. \quad (1.11)$$

Если умножить (1.11) на массу молекулы, то можно получить скорость испарения по массе:

$$\Gamma = m \frac{dN_e}{Sdt} = \left(\frac{m}{2\pi kT} \right)^{1/2} p_{нас}. \quad (1.12)$$

Общее количество испаренного вещества за время t с площадки площадью S равно:

$$M_e = \int_t \int_S \Gamma dS dt. \quad (1.13)$$

Уравнение Герца-Кнудсена требует знания давления паров перед поверхностью, с которой происходит испарение.

Предположим, что насыщенный пар может быть описан уравнением состояния идеального газа.

Выражение для плотности числа частиц насыщенного пара n_0 как функции температуры поверхности T_0 для эйнштейновской модели твердого тела имеет следующий вид:

$$n_0 = \left(\frac{mk\theta_0^2}{2\pi\hbar^2 T_0} \right)^{3/2} \exp\left(-\frac{L_0}{kT_0} - 1\right). \quad (1.14)$$

Здесь θ_0 – дебаевская температура, $\theta_0 = \frac{h\nu_0}{k}$, $\nu_0 = \frac{h}{2\pi}$ – постоянная Планка.

В случае, когда интенсивность испарения невелика, и испаренные атомы могут разлетаться от поверхности в режиме свободного течения, величиной p пренебрегают. Но если же температура поверхности достаточно высокая, то требуется учет этой величины. Иначе скорость испарения будет завышена, что и показывают результаты экспериментов.

Градиент давления паров создает необходимые условия для их оттока от поверхности и дальнейшего распространения в окружающем пространстве. Поэтому нахождение давления паров вблизи поверхности испарения, а также других параметров состояния и движения вещества, будем называть определением газодинамических граничных условий испарения в вакуум.

Газ, образующийся у поверхности в результате испарения, свободно расширяется в окружающее пространство. Частицы, испускаемые нагретой поверхностью, имеют максвелловское распределение по скоростям в телесном угле 2π с температурой T_0 , равной температуре поверхности, и плотностью n_0 , равной плотности насыщенного пара при этой температуре.

При достаточно высоких скоростях испарения молекулы пара не успевают быстро разлетаться. Поэтому частота их столкновений друг с другом становится большой. Это влияние как-то учитывать.

Все течение газа распадается на 2 характерных области.

В первой, примыкающей к поверхности и имеющей характерную ширину L , равную нескольким длинам свободного пробега, и называемую кнудсеновским слоем, в результате соударений частиц устанавливается новое состояние газа, которое характеризуется новой, теперь уже изотропной, функцией распределения по скоростям с новыми температурой \bar{T} и плотностью

\bar{n} . Перераспределение энергии у частиц должно привести также к новой, отличной от $\frac{\bar{v}}{4}$, массовой скорости потока \bar{u} .

Появление в результате столкновений внутри слоя L частиц со скоростями, направленными к поверхности, приводит к конденсации некоторой доли β от полного числа частиц, достигающих поверхности.

Во второй области газ движется в режиме течения сплошной среды; происходящие здесь процессы описываются соответствующими уравнениями. Граничными условиями для этого потока будут значения $\bar{T}, \bar{u}, \bar{p}, \bar{n}$, которые приобретены частицами пара при прохождении кнудсеновского слоя.

Знание всех перечисленных выше параметров позволяет определить скорость испарения в условиях, когда величиной давления паров в уравнении Герца-Кнудсена пренебрегать нельзя.

Испарение вещества с поверхности имеет место, при любой температуре, отличной от абсолютного нуля. Наибольшую вероятность покинуть поверхность вещества имеют атомы, которые обладают наибольшей энергией. С повышением температуры средняя энергия молекул возрастает, и на поверхности увеличивается число молекул, энергия которых превышает энергию связи с другими молекулами, так как энергия связи на поверхности меньше, чем в объеме вещества.

Некоторые вещества достаточно интенсивно испаряются из твердого состояния, а некоторые можно испарять, не доводя их до плавления.

1.4.3 Теплота испарения

Для испарения одной молекулы вещества с поверхности образца, необходимо затратить работу на преодоление сил связи с соседними молекулами. Математически это запишется так:

$A' = U_{\text{п}} - U_{\text{ж}} = 0 - U_{\text{ж}} = |U_{\text{ж}}| \approx 12|U_{\text{мин}}|$. Значит, на испарение одного моля жидкости необходимо работу по разрыву связей каждой молекулы: $q' = N_A A' = N_A (U_{\text{п}} - U_{\text{ж}}) \approx 12N_A |U_{\text{мин}}|$. При испарении будет происходить

расширение вещества, и появится добавочная работа расширения против сил внешнего давления: $q_a = P\Delta v = P_{НАС}(v_{П} - v_{Ж})$.

Полная работа, затрачиваемая на испарение одного моля жидкости:

$$q = q' + q_a = N_A(U_{П} - U_{Ж}) + P_{НАС}(v_{П} - v_{Ж}), \quad (1.15)$$

где q – скрытая теплота испарения. По мере повышения температуры растет объем жидкой фракции, а в паровой падает. Свойства этих фракций сближаются. В критической точке, то есть при равенстве объемов и внутренних энергий жидкой и паровой фаз:

$$q' = 0, \quad q_a = 0, \quad q = 0 \quad . \quad (1.16)$$

Из (1.15) следует, что $q = q' + q_a = \Delta U + P\Delta V = \Delta H$ - изменение энтальпии системы. Таким образом, величина скрытой теплоты фазового перехода первого рода есть изменение энтальпии системы. Часто слагаемым $P\Delta V$ пренебрегают и полагают, что скрытая теплота перехода является разницей между тепловыми составляющими внутренних энергий двух фаз.

В случае равенства температуры пара \bar{T} и температуры конденсированной поверхности T , скрытая теплота испарения будет выглядеть следующим образом:

$$q = \bar{E}_T - E_T = \Delta U + \frac{5}{2}nk\bar{T} - 3nkT = \Delta U - \frac{1}{2}nkT. \quad (1.17)$$

Здесь $\Delta U + \frac{5}{2}nk\bar{T}$ - тепловая составляющая внутренней энергии пара с теплоемкостью $\frac{5}{2}nk$, а ΔU – высота потенциального барьера для перескока атома из узла в междоузлие. Последнюю полагают равной энергии связи атомов в решетке (энергия сублимации L_0). Тогда можно переписать (1.17):

$$q = L_0 - \frac{1}{2}nkT. \quad (1.18)$$

В случае же неравенства температур в поверхностном слое T и паров \bar{T} выражение для q будет выглядеть следующим образом:

$$q = \bar{E}_T - E_T = \Delta U + \frac{5}{2}nk\bar{T} - 3nkT. \quad (1.19)$$

Таким образом, удельная теплота парообразования уменьшается при повышении температуры кипения и становится равной нулю при критической температуре.

Чем выше температура, тем интенсивнее процесс испарения и больше давление насыщенного пара.

1.5 Распыление вещества под действием мощных ионных пучков

При бомбардировке атомными частицами поверхность твёрдого тела может разрушаться в результате упругих взаимодействий быстрых частиц с ядрами атомов вещества. Данный процесс называется столкновительным распылением. Элементарные процессы при распылении происходят на атомарном уровне. Так, из области распыления испускается свет с линиями спектра характеристического излучения атомов распыляемого материала. Различают физическое и химическое распыление. Физическое распыление означает передачу кинетической энергии падающей частицы атомам мишени и последующий вылет через поверхность атомов, имеющих достаточную скорость для преодоления поверхностных сил со стороны мишени.

Интенсивность удаления атомарных частиц с облучаемой поверхности характеризуется коэффициентом распыления, который определяется как среднее число удаленных с поверхности атомов, приходящееся на одну бомбардирующую частицу [6,9]. Он зависит от типа распыляемого материала, его состояния (детальной структуры поверхности и ее состава), от характеристик падающей частицы, а также от угла падения ионов θ относительно нормали к поверхности. Значения коэффициентов распыления металлов ионами с энергиями $10^2 \dots 10^6$ эВ лежат в пределах $10^{-5} \leq Y \leq 10^2$ атомов на одну упавшую частицу [6].

В данной работе рассматривается физическое столкновительное распыление. Оно происходит при высоких энергиях налетающих частиц, начиная от десятков и сотен электрон-вольт, и может распространяться до мегаэлектронной области.

Одним из теоретиков, предложивших формулы для расчёта коэффициентов распыления металлов для столкновительного распыления был П. Зигмунд. В режиме линейных каскадов она имеет следующий вид [6]:

$$S = \frac{4,2 \cdot 10^{14} \alpha S_n}{n_0 U_s}, \quad (1.20)$$

где $4,2 \cdot 10^{14}$ – множитель, имеющий размерность см^{-2} и одинаковый для любых комбинаций ион-мишень, S_n – ядерная тормозная способность (в эВ/см), n_0 – ядерная плотность вещества мишени, U_s – поверхностная энергия связи атомов мишени (эВ), α – параметр, зависящий от отношения масс атомов мишени и бомбардирующих ионов.

В момент времени t с начала действия импульса тока коэффициент распыления определяется формулой (1.20), а коэффициент распыления, усреднённый по всему импульсу тока, равен:

$$\bar{S} = \frac{\int_0^{\tau} S(t) j(t) dt}{\int_0^{\tau} j(t) dt}, \quad (1.21)$$

где $j(t)$ – форма импульса тока.

В формуле (1.20) присутствует обратная зависимость коэффициента распыления от поверхностной энергии связи. Эта зависимость имеет глубокий физический смысл, так как частица конденсированного вещества должна преодолеть поверхностный потенциальный барьер для того, чтобы покинуть поверхность.

Величину поверхностной энергии связи довольно сложно определить экспериментально. В расчётах коэффициентов распыления часто используют величину теплоты сублимации [5]. Она зависит от температуры. В дальнейшем будет рассмотрено влияние температуры на величину теплоты испарения, а значит и на коэффициент распыления в условиях высокотемпературного разогрева твёрдого тела под действием МИП ЗЧ.

1.6. Постановка задачи

В настоящей работе поставлена задача выяснить закономерности испарения и плавления металлов под действием мощных ионных пучков длительностью от нескольких десятков до нескольких сотен наносекунд. Этот диапазон интересен тем, что здесь должно наблюдаться наиболее эффективное использование энергии пучка на фазовые превращения, так как теплопроводность за такое короткое время не успевает перенести в глубину вещества энергию, выделившуюся в поверхностных слоях при торможении ионов. Подобная работа была проделана раньше [26], но в ней не был детально рассмотрен диапазон пучков длительностью короче 100 нс. Не был также изучен случай сфокусированных мощных ионных пучков указанной длительности.

Предстояло выяснить, при каких параметрах пучков будет наблюдаться максимальный выход испарившегося и расплавленного вещества мишени, как изменится время существования жидкой фазы при увеличении длительности облучения, какая доля энергии пучка будет расходоваться на испарение, плавление, как будет изменяться количество энергии, затрачиваемой на удаление одного атома при изменении параметров пучков. Поэтому задачи были поставлены следующие:

1) освоить методику моделирования тепловых и эрозионных процессов в металлах под действием мощных пучков заряженных частиц, научиться работать с комплексом компьютерных программ и применять их для расчётов заданных зависимостей; учесть зависимость теплофизических характеристик облучаемого вещества от температуры, разработать программный модуль, реализующий этот учёт;

2) рассчитать закономерности испарения, расхода энергии на удаление атомов с поверхности металлов, глубины проплавления, времени существования жидкой фазы в зависимости от параметров пучков (энергии частиц, длительности импульса, плотности мощности), проанализировать изменение составляющих баланса энергии в зависимости от длительности

импульса, плотности мощности и поперечных размеров следа пучка на поверхности мишени;

3) сопоставить характеристики эрозии и фазовых превращений под действием сфокусированных короткоимпульсных ионных пучков со случаем лазерного излучения аналогичной длительности и плотности мощности.

Глава 2. Описание комплекса компьютерных программ и порядка работы с ним

В настоящей главе представлен расчет пространственно-временной функции энерговыделения, линейных потерь энергии, которые необходимы в программе по расчету тепловых процессов и эрозии поверхности твердого тела под действием МИП ЗЧ. Описан комплекс программ, который используется в данной работе. Также показано влияние точного задания зависимостей теплофизических характеристик вещества от температуры на результаты расчетов.

2.1. Методика построения пространственно-временной функции энерговыделения при торможении средних и тяжелых ионов с энергией от 100 до 1000 кэВ.

Функция энерговыделения оказывает существенное влияние на тепловые процессы в твердом теле при воздействии на него мощных импульсных пучков заряженных частиц субмикросекундной длительности. При ее построении возникает вопрос о правомерности принципа аддитивности энергоклада, который производится отдельными частицами пучка.

Неаддитивность торможения частиц в интегральном энерговыделении пучка возможна из-за нескольких факторов. Самыми важными являются влияние собственного магнитного поля пучка и тормозящего электрического поля, создаваемого возникающим в процессе облучения объемным зарядом мишени. В литературе рассмотрено влияние собственного магнитного поля сильноточного электронного пучка на торможение его частиц в облучаемом веществе. Его объясняют тем, что релятивистские электроны под действием магнитного поля сильноточного пучка движутся в веществе по циклоидным траекториям, в следствии чего плотность потерь энергии на единицу массы мишени увеличивается в J/I_A раз, где J – ток пучка, I_A – альфвеновский ток. Этот эффект приводит к уменьшению зоны поглощения энергии в несколько раз по сравнению с классическим механизмом энерговыделения. Он проявляется при

очень высоких плотностях тока. Поэтому считается, что при плотностях тока порядка единиц мегампер на квадратный сантиметр эффектами коллективного взаимодействия частиц в пучке, связанных с влиянием собственного магнитного поля, можно пренебречь [3].

Функция энерговыделения для пучков заряженных частиц из исследуемого диапазона плотности мощности построена на принципе аддитивности энерговклада от каждой отдельной частицы пучка. Если принять, что спектр частиц неизменен на протяжении импульса, временное и пространственное распределение функции энерговыделения можно считать независимыми. Тогда она будет иметь следующий вид:

$$W(x, t) = \frac{1}{e} j(t) G(x), \quad (2.1)$$

где e – заряд электрона; $j(t)$ – временное распределение плотности тока в импульсе; $G(x)$ – пространственное распределение линейных потерь энергии при прохождении одного иона с начальной энергией E_0 через вещество.

В (2.1) предполагается, что бомбардирующие ионы однозарядные. Если в пучке присутствуют ионы другой кратности заряда, то это несложно учесть, скорректировав (2.1) на соответствующий коэффициент, учитывающий среднюю кратность заряда ионов в пучке [3].

Форма импульса тока $j(t)$ в общем случае зависит от вида ускорителя, режима его работы и параметров пучка. Фиксируемую в экспериментах по облучению осциллограмму $j(t)$ можно подставлять в выражение (2.1) для $W(x, t)$. Практика показала, что для расчетов подходят либо треугольная, либо трапецевидная аппроксимации $j(t)$ вида:

$$j(t) = \begin{cases} J \frac{t}{t_{\max}}, & 0 \leq t \leq t_{\max}; \\ J \frac{t - \tau}{t_{\max} - \tau}, & t_{\max} \leq t \leq \tau; \quad (\text{треугольная}) \\ 0, & t > \tau; \end{cases} \quad (2.2)$$

либо:

$$j(t) = \begin{cases} J \frac{t}{\Delta t_b}, & 0 \leq t \leq \Delta t_b; \\ J, & \Delta t_b < t < \tau - \Delta t_e; \\ J \frac{\tau - t}{\tau - \Delta t_e}, & \tau - \Delta t_e \leq t \leq \tau; \\ 0, & t > \tau. \end{cases} \quad \text{(трапецевидная)} \quad (2.3)$$

здесь J – максимальное значение плотности тока в импульсе, τ – длительность импульса, t_{max} – положение его максимума в треугольном импульсе, Δt_b и Δt_e – периоды нарастания и спада тока в трапецевидном импульсе. Мы рассматриваем импульс треугольной формы [3].

Для модельных расчетов полагают пучки монохроматическими.

Под плотностью мощности пучка P понимается ее среднее значение в импульсе, которое вычисляется как:

$$P = E_o \frac{1}{\tau_0} \int_0^{\tau} j(t) dt, \quad (2.4)$$

а плотность энергии пучка F есть величина, равная следующему значению:

$$F = E_o \int_0^{\tau} j(t) dt. \quad (2.5)$$

При вычислении пространственного распределения энергии бомбардирующих ионов по глубине $G(x)$ необходимо учитывать то, что в рассматриваемом диапазоне энергий (от 0,1 до 1 МэВ) необходимо брать в расчет как электронное, так и ядерное торможение [3].

Качественные и количественные характеристики пространственного распределения линейных потерь энергии бомбардирующих ионов в твердом теле определяются массой ионов и их энергией. Эти обстоятельства оказывают влияние на закономерности тепловой эрозии.

2.2. Описание компьютерной программы, с помощью которой производится расчет линейных потерь энергии; их вид в зависимости от вида и энергии ионов, вещества мишени.

Когда ставится задача об ионном легировании, то сразу возникают вопросы о глубине проникновения внедряемой примеси и ее пространственном распределении. Ответы на них дает теория пробегов или теория Линдхарда-Шарффа-Шиотта (ЛШШ). Исходный постулат теории ЛШШ - при внедрении в твердую мишень движущийся ион теряет энергию по двум независимым каналам: первый – столкновения с атомными ядрами, второй – возбуждение электронной подсистемы. Следовательно, для энергетических потерь можно записать следующее соотношение:

$$\frac{dE}{dx} = -N[S_n(E) + S_e(E)], \quad (2.6)$$

где E [кэВ] – энергия иона в точке x , N [см⁻³] – число атомов мишени в единице объема, S_n [кэВ·см²] – ядерная тормозная способность, S_e [кэВ·см²] – электронная тормозная способность. Отсюда средний полный пробег иона с начальной энергией E_0 :

$$\langle R \rangle = \frac{1}{N} \int_0^{E_0} \frac{E}{[S_n(E) + S_e(E)]} dE. \quad (2.7)$$

Таким образом, если знать зависимости S_n и S_e от энергии, то можно рассчитать пробег ионов. Расчет ядерной тормозной способности сводится к известной задаче о столкновении двух заряженных частиц. Атомное ядро налетающего иона взаимодействует с атомными ядрами атомов мишени по закону Кулона. Энергия отдачи при столкновении определяется скоростью падающего иона, массами ядер, их зарядами и прицельным расстоянием. Роль электронных оболочек учитывается через функцию экранирования. Поскольку ядро налетающего иона одновременно взаимодействует со всеми ядрами мишени, то следует проинтегрировать результат одиночного столкновения по прицельным расстояниям от нуля до бесконечности. При точном решении задачи

появляются уравнения с тригонометрическими функциями, что приводит к техническим сложностям в получении окончательного результата. На основе данной теории Ганн и Юдин создали методику расчета стандартных профилей облученного пучками тяжелых ионов. Методика Ганна и Юдина осуществлена в программе для расчетов линейных потерь энергии иона «Ion_Windows», разработанная на кафедре экспериментальной физики НИ ТПУ. Внешний вид программы представлен на рисунке 2.1.

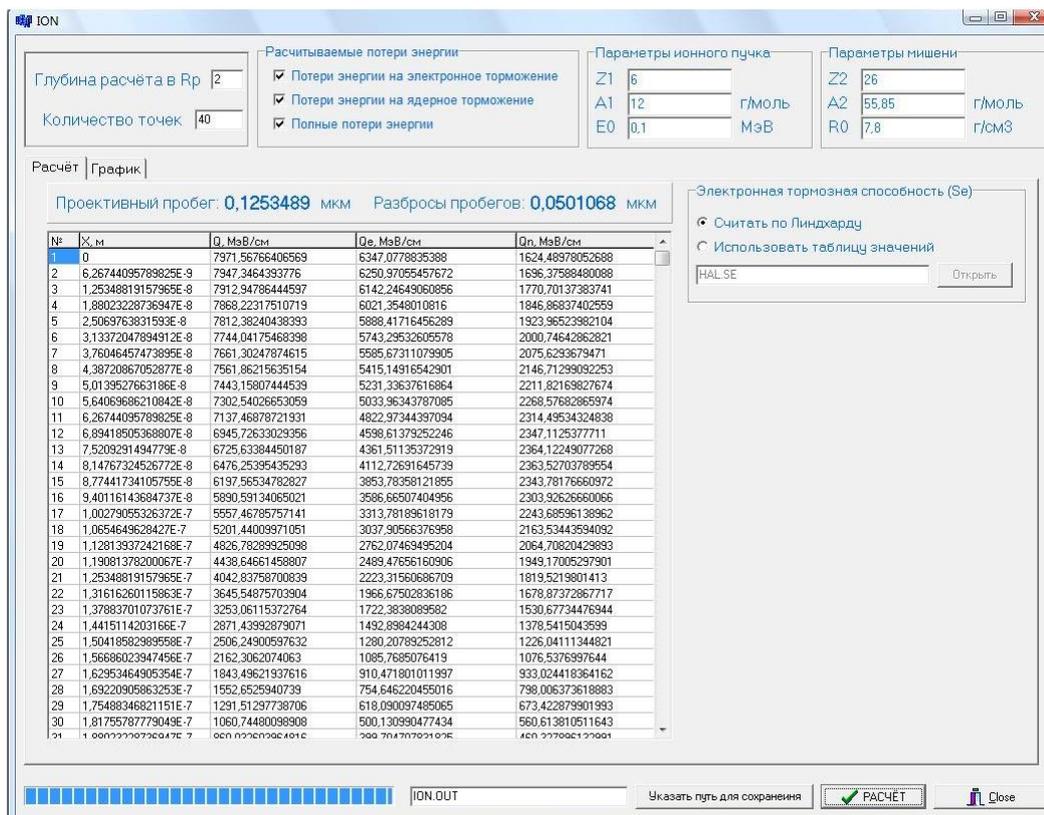


Рисунок 2.1. Внешний вид программы «Ion_Windows», осуществляющей расчеты линейных потерь энергии одной падающей частицы.

Общий вид потерь энергии одного иона, рассчитанный по данной программе представлен на рисунке 2.2 на примере иона углерода с энергией 300 кэВ, взаимодействующего с медной мишенью.

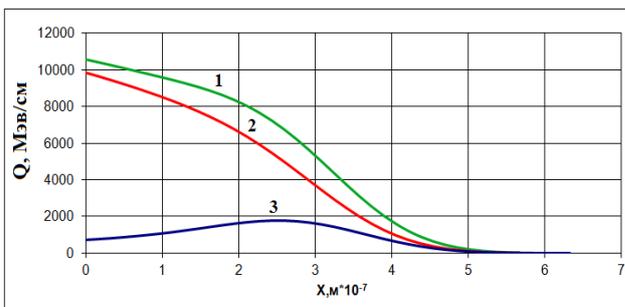


Рисунок 2.2. Общий вид линейных потерь энергии одного иона на примере иона углерода с энергией 300 кэВ взаимодействующего с поверхностью медной мишени (кривая 1 – суммарные линейные потери энергии иона, кривая 2 – электронные потери, 3 – ядерные суммарные линейные потери энергии иона, кривая 2 – электронные потери, 3 – ядерные потери).

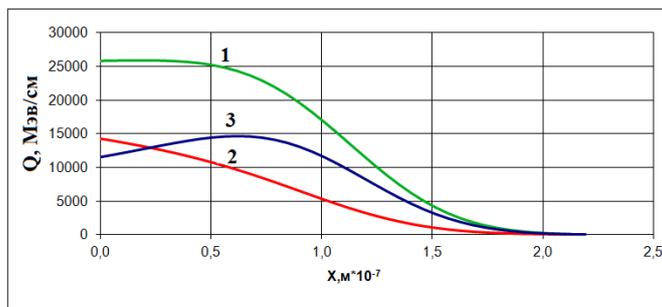


Рисунок 2.3. Линейные потери энергии иона аргона с энергией 300 кэВ взаимодействующего с поверхностью меди (кривая 1 – суммарные линейные потери энергии иона, кривая 2 – электронные потери, 3 – ядерные суммарные линейные потери энергии иона, кривая 2 – электронные потери, 3 – ядерные потери).

На рисунке 2.2 видим, что глубина проникновения ионов в вещество составляет десятые доли микрона. Наибольшие потери наблюдаются в поверхностных слоях и уменьшаются по мере продвижения частицы вглубь вещества. Большую часть составляют электронные потери. В зависимости от вида ионов, их энергии, будут меняться доли энергии, теряющиеся при торможении на ядерной решетке или электронной подсистеме. Для сравнения со случаем облучения меди ионами углерода (рис. 2.2) рассмотрим рисунок 2.3. Здесь представлены потери одного иона аргона с энергией 300 кэВ при торможении его на поверхности медной мишени.

Здесь мы видим, что из-за того, что ион аргона тяжелее иона углерода, его потери, соответственно будут выше. Кроме того, поскольку ион аргона более крупная частица, возрастает также доля ядерных потерь. Глубина проникновения в данном случае в два раза меньше глубины проникновения иона углерода в такую же мишень.

Далее определим влияние энергии падающей частицы на ее потери в веществе мишени. На рисунке 2.4 представлены потери иона углерода с энергией 1 МэВ в медной мишени.

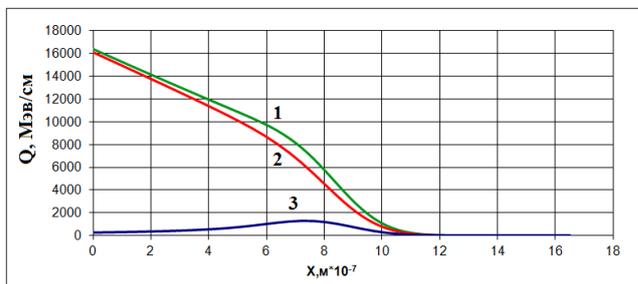


Рисунок 2.4. Линейные потери энергии иона углерода с энергией 1 МэВ взаимодействующего с поверхностью меди (кривая 1 – суммарные линейные потери энергии иона, кривая 2 – электронные потери, 3 – ядерные потери).

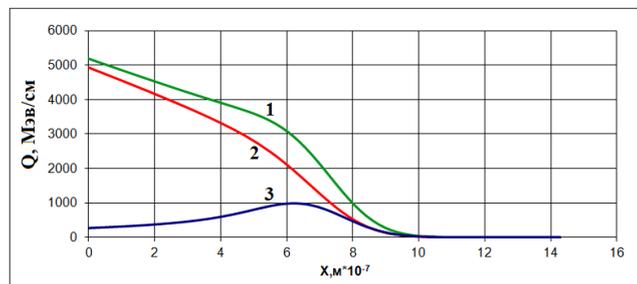


Рисунок 2.5. Линейные потери энергии иона углерода с энергией 300 кэВ взаимодействующего с поверхностью алюминия (кривая 1 – суммарные линейные потери энергии иона, кривая 2 – электронные потери, 3 – ядерные потери).

На рисунке видим, что при увеличении энергии ядерные потери становятся заметны на достаточной глубине поверхности, ближе к остановке частицы. Здесь основной вклад составляют потери, связанные с взаимодействием с электронной подсистемой. По сравнению с начальным случаем, здесь суммарные потери несколько возрастают, а глубина проникновения возрастает больше, чем в два раза.

Рассмотрим влияние вещества мишени на линейные потери энергии падающего иона. На рисунке 2.5 представлены линейные потери энергии иона углерода с энергией 300 кэВ в алюминиевой мишени.

На рисунке 2.5 видим, что плотность материала мишени напрямую влияет на потери энергии падающей частицы. То есть, в данном случае, из-за того, что плотность алюминия меньше плотности меди, ядерные потери будут меньше. Значит, и суммарные линейные потери иона на всем его пути в поверхности мишени также будут меньше по сравнению с медью. По той же

причине глубина проникновения в поверхность будет выше случая с медной мишенью.

На рисунке 2.6 представлены линейные потери энергии иона углерода с энергией 300 кэВ в поверхности железа.

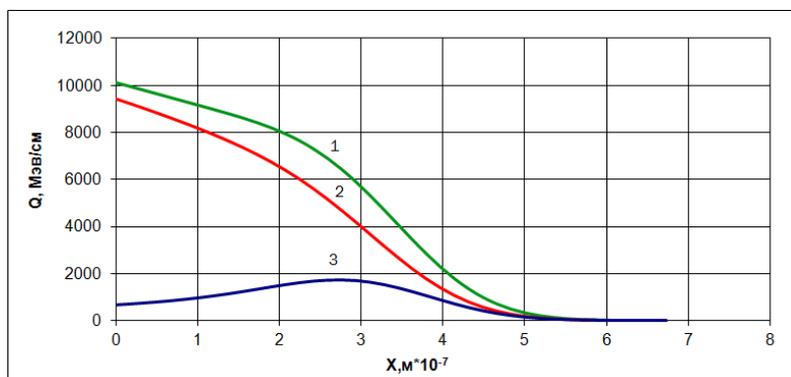


Рисунок 2.6. Линейные потери энергии иона углерода с энергией 300 кэВ взаимодействующего с поверхностью железа (кривая 1 – суммарные линейные потери энергии иона, кривая 2 – электронные потери, 3 – ядерные потери).

Плотность железа выше, чем у алюминия (меньшее расстояние между соседними атомами решетки). Значит, и ион при продвижении через поверхность будет терять часть энергии при взаимодействии с ядрами большую, чем в алюминии. Соответственно, в данном случае линейные потери энергии иона в веществе мишени будут выше, чем для случая алюминия.

2.3. Зависимости теплофизических свойств вещества от температуры и влияние их учёта на результаты расчётов.

В настоящее время довольно часто в моделях тепловых процессов в твёрдом теле под действием мощных пучков заряженных частиц пренебрегают зависимостью теплофизических характеристик от температуры. Тем не менее не ясно: а) в каких случаях это пренебрежение правомерно и какую погрешность оно вносит в результаты расчетов тепловых и эрозионных процессов в веществе под действием МИП ЗЧ; б) нет ясности о влиянии температуры на интенсивность распыления.

Было изучено влияние учета зависимостей теплофизических свойств мишени от температуры на эрозионные характеристики при облучении мощными короткоимпульсными пучками ионов.

Проведен анализ аналитических представлений зависимостей теплопроводности и теплоемкости от температуры, который позволил нам выбрать наиболее подходящий способ их аппроксимации при компьютерном моделировании тепловых и эрозионных процессов.

На рис. 2.7 показана зависимость коэффициента теплопроводности от температуры для меди. На рис. 2.8 показана зависимость коэффициента удельной теплоёмкости от температуры для меди.

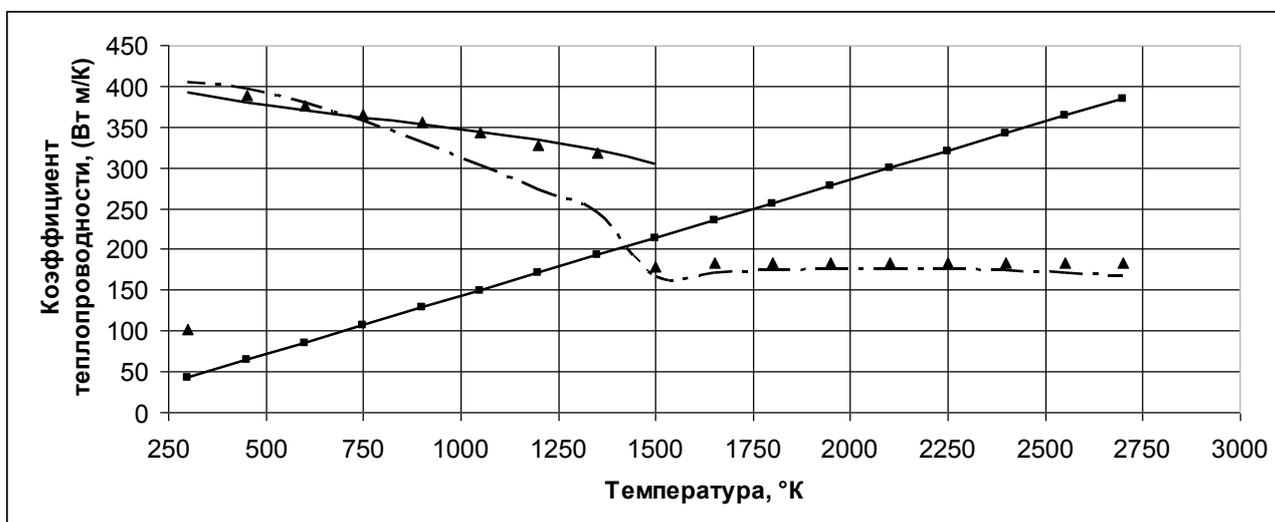


Рисунок 2.7. Зависимость коэффициента теплопроводности от температуры на примере меди (сплошная линия – аппроксимация полиномом [10], треугольные маркеры – аппроксимация табличных данных [12], штрихпунктирная линия – аппроксимация полиномом [11], сплошная линия с квадратными маркерами – закон Видемана-Франца).

Расчет производился на интервале температур от 300 до 3000 °K. Из рисунка 1 видим, что на интервале от 500 до 1300 °K табличным данным хорошо соответствует аппроксимация полиномом [10], однако 1300 °K является границей области применимости полинома в случае меди. Полином [11] имеет достаточно хорошее соответствие табличным данным, за исключением низких температур в интервале 850-1300 °K.

Для получения минимальной погрешности при вычислениях, в данном случае, целесообразно использовать полином [10] при температурах до 1500 °К, а при температурах выше 1500 °К – полином [11].

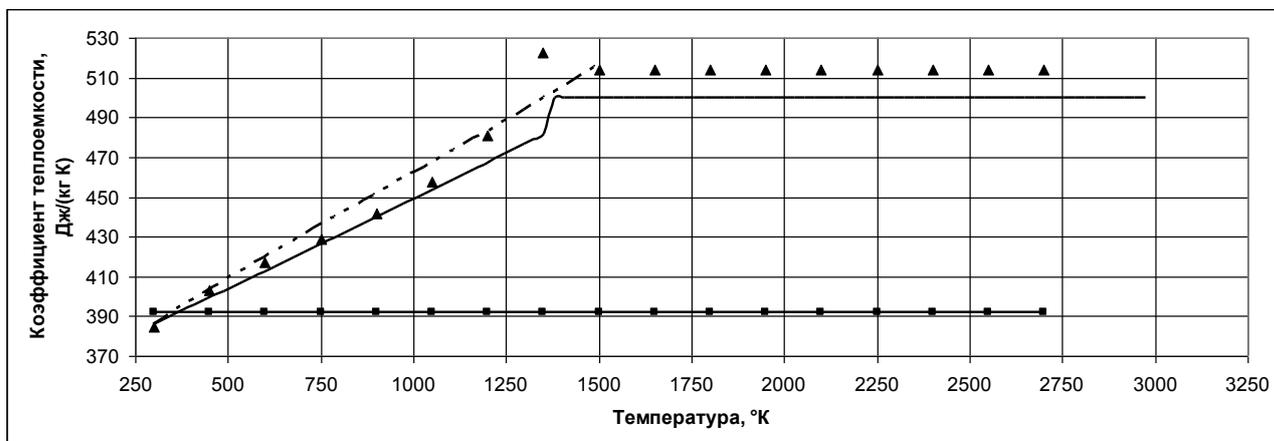


Рисунок 2.8. Зависимость коэффициента теплоемкости от температуры на примере меди (сплошная линия – аппроксимация полиномом [11], треугольные маркеры – аппроксимация табличных данных [12], штрихпунктирная линия – аппроксимация полиномом [10], сплошная линия с квадратными маркерами – закон Дюлонга-Пти).

На рисунке 2.7 видим, что в случае меди аппроксимация теплопроводности полиномом [10] применимо только до 1500 °К, в то время, как полином [11] можно использовать на всем промежутке. Однако последний указанный выше полином на всем интервале температур дает несколько заниженные значения коэффициента теплоемкости. Тем не менее, поскольку вычисления производятся для высоких температур, было принято решение использовать полиномы [11], ввиду их малых погрешностей. Кроме того, для каждого образца в источнике [11] в среднем три уравнения, рассматривающие интервалы до точек температур плавления и испарения. Также была проведена проверка важности использования полиномов [10] на участке до 1500 °К. Установлено, что при использовании при расчетах комбинации полиномов [10,11] и только полиномов [11] разница в значениях необходимых величин не превышает пяти процентов.

При проведении расчетов с включением данных полиномиальных зависимостей установлено, что при воздействии на металлы мощных субмикросекундных ионных пучков длительностью 100 нс в области небольших плотностей тока расхождение оказывается существенно больше, чем в диапазоне высоких плотностей тока. Для металлов с высокими коэффициентами теплопроводности (серебро, медь и др.) при моделировании тепловых и эрозионных процессов под действием субмикросекундных пучков ионов углерода необходимо учитывать изменение теплопроводности и теплоемкости от температуры. Для таких веществ, как железо, пренебрежение зависимостью теплофизических характеристик от температуры оказывается оправданным.

При исследовании испарения было установлено, что пренебрежение возможно в случае железа. В остальных же случаях важно учитывать зависимости теплопроводности и теплоемкости от температуры. Установлено, что в случае испарения, и в случае плавления, наибольшие отличия от данных, полученных без учета зависимостей, наблюдаются в области низких плотностей токов.

Во всех рассмотренных вариантах наблюдалось наибольшее различие значений при относительно низких плотностях тока, когда разогрев поверхности хотя и превышает температуру плавления, но не слишком сильно.

В целом, наибольшие расхождения в расчёте толщины испарившегося слоя наблюдаются в металлах, обладающих более высокими значениями коэффициентов теплопроводности и при более высоких значениях начальной энергии ионов. Это обусловлено более значительной ролью теплопроводного стока из области энергосвечения частиц пучка в веществе мишени [18].

2.4. Описание компьютерной программы, с помощью которой производится расчет тепловых процессов и эрозии поверхности металлов под действием мощных импульсных ионных пучков.

Расчет тепловых процессов и эрозии поверхности металлов под действием мощных импульсных ионных пучков осуществлялся по программе «TERM_ENERGY», разработанной на кафедре экспериментальной физики НИ ТПУ. Внешний вид программы представлен на рисунке 2.9.

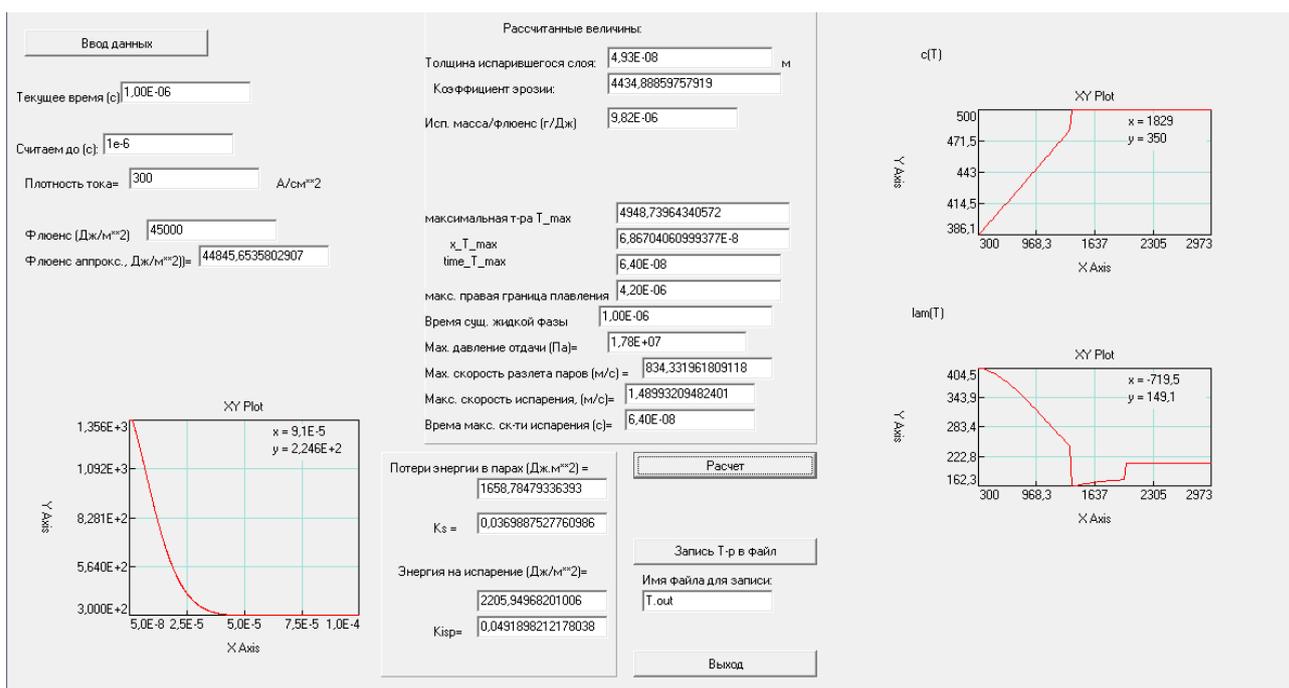


Рисунок 2.9. Внешний вид программы «TERM_ENERGY».

Данная программа реализует двухфазную модель испарения, описывающую эволюцию тепловых и эрозионных процессов. В расчетах используется функция энерговыделения, расчёт которой описан выше.

При решении уравнения теплопроводности реализуется метод конечных разностей по явной схеме. Рассмотрим его подробнее.

Уравнение, описывающее распределение тепловой составляющей энергии при облучении мишени мощным импульсным пучком заряженных частиц, в одномерном случае выглядит следующим образом:

$$\frac{\partial E_T}{\partial t} - v(T) \frac{\partial E_T(x, t)}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \lambda(T) \frac{\partial T}{\partial x} + W(x, t), \quad (2.8)$$

граничные условия для задачи показаны в пункте 1.3 (формулы 1.4,1.5,1.12). Начальные условия выглядят следующим образом:

$$T(x,0) = 300K \quad (2.9)$$

$$\left. \frac{\partial T}{\partial x} \right|_{x=0} = \left. \frac{\partial T}{\partial x} \right|_{x=BACK} = 0 \quad (2.10)$$

Численная методика решения задачи является следующей. В области изменения переменных вводят пространственно-временную сетку. Все производные, входящие в уравнение и в граничные условия, заменяют разностями значений функции в центрах ячеек этой сетки. Получающиеся при этом алгебраические уравнения называют разностной схемой. Решая полученную алгебраическую систему, находят приближенное решение в узлах сетки.

На рисунке 2.10 представлен вид сетки, используемый в нашем случае. Вычисления энергий производим на слоях по времени и на пространственных ячейках. В каждой точке, отмеченной крестом, производится расчет. Шаг по времени равен τ , шаг по пространственной координате - h .

Расчет производится при условии, что в начальный момент нам известна температура мишени. На каждом шаге по времени (т.е. на k -слое) нам необходимо дополнительно вычислять плотность мощности энерговыделения в каждой пространственной расчётной точке, скорость испарения на поверхности и коэффициенты теплопроводности и теплоемкости в каждой пространственной расчётной ячейке по температуре в ней в данный момент времени. Шаблон для построения расчётной схемы показан на рисунке 2.11.

Поскольку мы производим вычисления не в узлах сетки, а в середине ячеек, то индекс их обозначения изменяется от нуля до $n-1$. Для вычисления значений от $i=1$ до $i=n-2$ на каждом слое используется следующая формула:

$$\frac{E_i^{k+1} - E_i^k}{\Delta t} - v^k \frac{E_{i+1}^k - E_{i-1}^k}{2h} = \frac{1}{h} \left[\bar{\lambda}(T_i) \frac{T_{i+1}^k - T_i^k}{h} - \bar{\lambda}(T_{i-1}) \frac{T_i^k - T_{i-1}^k}{h} \right] + W_i^{k+1/2}. \quad (2.11)$$

Здесь и далее верхний индекс обозначает слой по времени, а нижний индекс – ячейку по пространственной координате. v^k – скорость испарения на k -слое.

На границах сетки, то есть при $i=0$ и $i=n-1$ используются следующие формулы:

$$\frac{E_0^{k+1} - E_0^k}{\Delta t} - v^k \frac{E_1^k - E_{-1}^k}{2h} = \left[\frac{1}{h} \bar{\lambda}(T_0) \frac{T_1^k - T_0^k}{h} - v^k(T_0) \rho \Delta H \right] + W_0^{k+1/2}, \quad (2.12)$$

Здесь E_{-1} – виртуальная ячейка, вводимая для вычислений на границах интервала:

$$E_{-1} = C_0(T^k) \rho \left[T_0^k - \frac{h v^k \rho \Delta H}{\bar{\lambda}(T_0^k)} \right] \quad (2.13)$$

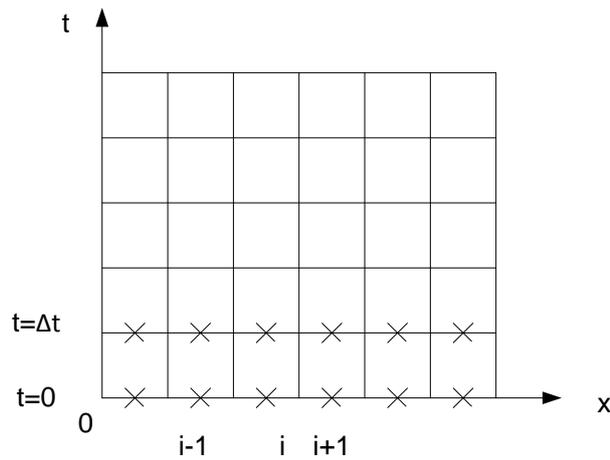


Рисунок 2.10. Вид сетки для аппроксимации производных.

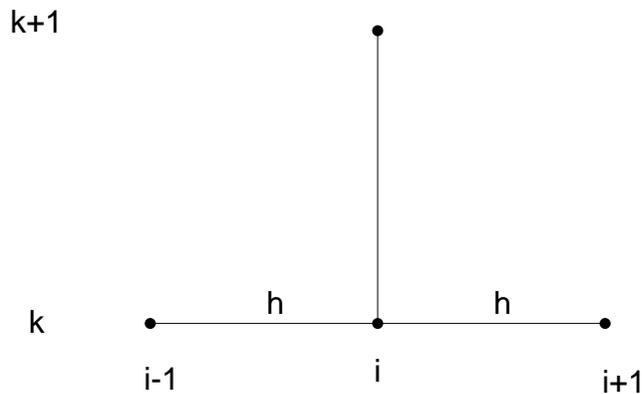


Рисунок 2.11. Шаблон для конечно-разностной схемы.

$$\frac{E_{n-1}^{k+1} - E_{n-1}^k}{\Delta t} - v^k \frac{E_{n-1}^k - E_{n-2}^k}{2h} = \frac{1}{h} \left[-\bar{\lambda}_i \frac{T_{n-1}^k - T_{n-2}^k}{h} \right] + W_{n-1}^{k+1/2}. \quad (2.14)$$

Здесь под обозначением теплопроводности понимаем $\bar{\lambda}_i^k = \lambda \left(\frac{T_{i+1}^k - T_i^k}{2} \right)$.

Ввиду того, что данная схема является явной, при задании шагов по времени и пространственной координате следует учесть условие устойчивости, которое является следующим:

$$\Delta \tau \leq \min_{i=0..n-1} \left(\frac{h^2}{2 \frac{\bar{\lambda}(T_i)}{C(T_i)\rho}} \right). \quad (2.15)$$

Скорость испарения рассчитывается по следующей формуле:

$$v(T_s) = (2\pi k_B T_s / m)^{-1/2} \frac{1}{\rho} (p_s(T_s) - \bar{p}). \quad (2.16)$$

Здесь k_B – постоянная Больцмана, m – масса атома испаряющегося вещества, $p_s(T_s)$, – давление насыщенного пара при температуре T_s на поверхности, \bar{T}, \bar{p} – температура и давление паров перед поверхностью. В нашем случае $\bar{T} = T_0, \bar{p} = p_0$. Разность энтальпий рассчитывается как:

$$\Delta H = L_0 + \frac{5}{2} nk\bar{T} - 3nkT_s, \quad (2.17)$$

где L_0 – удельная теплота сублимации при 0 К.

Время наблюдения (количество слоев) задается по необходимости. По формулам (2.11)-(2.14) рассчитываем тепловую составляющую внутренней энергии на k -м слое. Температура рассчитывается из системы, приведенной в (1.3). По полученным температурам рассчитываются теплопроводность и теплоемкость на данном слое.

Для вычисления нужных нам характеристик на $k+1$ слое необходимо произвести следующие действия:

1. Вычислить $W_i^{k+1/2}$ - объёмную мощность энерговыделения.
2. Рассчитать E_i^{k+1} ($i=0..n-1$) по известным v^k, λ^k, T^k, E^k и значениям функции энерговыделения, рассчитанным в пункте 1.
3. Рассчитать T_i^{k+1} и C_i^{k+1} по E_i^{k+1} из формулы (1.3).
4. Рассчитываем $p_s(T_s), \bar{T}, \bar{p}$.

5. По рассчитанным в пункте 3 значениям температуры рассчитываем $\bar{\lambda}^{k+1}, \nu^{k+1}$.

По данной схеме можно достаточно точно рассчитать величины, характеризующие процессы, протекающие в веществе под воздействием МИП ЗЧ.

5 Финансовый менеджмент

Предполагаемый конечный продукт: программное обеспечение для моделирования эксперимента обработки поверхности материала импульсным ионным и лазерным излучениями.

Целевой рынок: лаборатории и предприятия, занимающиеся обработкой и модификацией поверхности материалов.

5.1. SWOT-анализ.

Для того чтобы приступить к оценке коммерциализации проекта, а также расчету бюджет необходимо провести SWOT-анализ. SWOT – Strengths (сильные стороны), Weaknesses (слабые стороны), Opportunities (возможности) и Threats (угрозы) – представляет собой комплексный анализ научно-исследовательского проекта. SWOT-анализ применяют для исследования внешней и внутренней среды проекта. Проведем оценку сильных и слабых сторон проекта, анализ представлен в таблице 1.

Таблица 1 – SWOT-анализ научно-исследовательского проекта

	Сильные стороны научно-исследовательского проекта:	Слабые стороны научно-исследовательского проекта:
	С1.Возможность экономии средств, которые пошли бы на проведение эксперимента.	Сл1.Возможность изучать только импульсные режимы излучения.
	С2.Большая скорость вычислений.	Сл2.Ограничение в виде допустимых интервалов энергии.
	С3.Гибкость системы ввода параметров излучения.	Сл3.Изучение поведения только поверхностного

	<p>С4.Возможность проводить моделирование для большого количества материалов.</p> <p>С5.Не нужен специально обученный персонал для работы с программой.</p>	<p>слоя мишени.</p> <p>Сл4.Работа проводится только в рамках прилагаемой базы данных (по материалам, параметрам излучения и т.д.)</p> <p>Сл5.Невозможность сторонних модификаций программ, необходимо связываться с разработчиком.</p> <p>Слб. Риск сбоя программы при использовании в недопустимой области параметров излучения.</p>
<p>Возможности:</p> <p>В1.Реализация в промышленных масштабах.</p> <p>В2.Использование оборудования НИ ТПУ, НПФ «Микран», НПЦ «Полюс», «НИИПП» для совершенствования базы данных.</p> <p>В3.Возможность реализации продукта в крупных закрытых предприятиях (к примеру</p>	<p>Универсальность программного комплекса дает возможность его продвижения на крупные предприятия, дальнейшего его совершенствования.</p> <p>Возрастающая популярность модификации поверхности материалов дает возможность использовать данный комплекс в промышленном масштабе.</p> <p>Как правило, разработка ПО такого типа заканчивается в рамках</p>	<p>Охват не всех типов излучения, и режимов, может затруднить продвижение продукта на рынок.</p>

<p>РФЯЦ-ВНИИЭФ).</p> <p>В4.Сотрудничество с лабораториями НИ ТПУ для совершенствования продукта (модели, границы применимости и т.д.)</p> <p>В5.Увеличение спроса технологии обработки и модификации поверхности импульсным ионным и лазерным излучением.</p>	<p>подразделения или лаборатории, значит, практическое отсутствие конкурентов.</p>	
<p>Угрозы:</p> <p>У1.Отсутствие спроса на программное обеспечение.</p> <p>У2.Ограниченное применение продукта.</p> <p>У3.Задержки финансирования со стороны университета.</p> <p>У4.Появление сильных конкурентов.</p> <p>У5.Скачкообразное развитие технологий, приводящее к ненужности продукта.</p>	<p>При появлении конкурента с большей базой данных, с программным обеспечением, охватывающим более широкий круг видов излучений продвижение продукта на рынок станет невозможным. В случае обнаружения такой программы возможно прекращение попыток внедрения продукта на рынок, так как необходимо дорабатывать продукт.</p>	<p>Отсутствие финансирования проекта может затруднить его продвижение на промышленный уровень.</p>

В представленной таблице перечислены все возможности и сильные стороны проекта, которые в дальнейшем помогут осуществить его. Но также у

проекта есть свои слабые стороны и угрозы. Данная таблица позволяет оценить готовность работы, а также предпринять меры по устранению некоторых угроз и слабых сторон.

5.2. Инициация проекта.

Группа процессов инициации состоит из процессов, выполняющихся для определения нового проекта или новой фазы существующего. В рамках процессов инициации определяются изначальные цели и содержание и фиксируются изначальные финансовые ресурсы. Определяются внутренние и внешние заинтересованные стороны проекта, которые будут взаимодействовать, а также влиять на общий результат научного проекта. Данная информация закрепляется в уставе проекта.

Ниже, в таблицах 2, 3, 4, представлены все необходимые данные, которые входят в устав проекта.

Таблица 2 - Заинтересованные стороны проекта

Заинтересованные стороны проекта	Ожидания заинтересованных сторон
НИ ТПУ, кафедра экспериментальной физики	Разработанное программное обеспечение для моделирования эксперимента модификации и обработки поверхности материала импульсным ионным и лазерным излучениями.

Таблица 3 – Цели и результат проекта

Цель проекта:	Разработка программного обеспечения для моделирования эксперимента модификации и обработки поверхности материала импульсным ионным и лазерным излучениями.
Ожидаемые результаты проекта:	<ul style="list-style-type: none"> - готовый программный комплекс для моделирования эксперимента; - быстрота вычислений; - возможность работы с рядом веществ.

Критерии приемки результата проекта:	Соответствие расчетных значений данным, полученным в проведенных ранее лабораторией экспериментов.
Требования к результату проекта:	Требование:
	корректность значений, получаемых в расчетах;
	быстрота расчетов;
	необходима база данных, содержащая в себе зависимость теплофизических характеристик вещества мишени от температуры, зависимость линейных потерь энергии ионного пучка в глубине поверхности материала, вид функции энерговыделения.

Также в устав проекта входят и организационные вопросы. Необходимо определить, кто будет входить в рабочую группу данного проекта, какова будет роль каждого участника в данном проекте, а также прописать функции, выполняемые каждым из участников и их трудозатраты в проекте. Данные по этому вопросу представлены в таблице 4.

Таблица 4 – Рабочая группа проекта

№ п/п	ФИО, основное место работы, должность	Роль в проекте	Функции	Трудо-затраты, час.
1	Блейхер Галина Алексеевна, д.ф.м.н., старший научный сотрудник (профессор) кафедры экспериментальной физики, ФТИ, НИ ГПУ	Руководитель	Координация деятельности проекта	424

2	Трунцева Руслана Павловна, студент-магистр, кафедра экспериментальной физики, ФТИ, НИ ТПУ	Исполнитель	Выполнение исследовательской работы	848
ИТОГО:				1272

В данном разделе были выделены заинтересованные в проекте организации, установлены цели и ожидаемые результаты. Была определена рабочая группа проекта, что в дальнейшем необходимо для расчета бюджета.

5.4. Ограничения проекта.

У любого проекта есть ограничения, т.е факторы, которые могут послужить ограничением степени свободы исполнителей, а так же «границы проекта» - параметры проекта или его продукта, которые не будут реализованных в рамках данного проекта. Ограничения данного проекта представлены в таблице 5.

Таблица 5 – Ограничения проекта

Фактор	Ограничения/ допущения
Бюджет проекта	250000
Источник финансирования	НИ ТПУ
Сроки проекта:	10.09.14 - 10.06.16
Дата утверждения плана управления проектом	10.09.14
Дата завершения проекта	10.06.16

При достаточном количестве времени есть все возможности максимально полно выполнить поставленные цели. При преждевременном

завершении проекта есть возможность дополнительного совершенствования продукта.

5.5. План проекта.

В рамках планирования научного проекта построен календарный график проекта, данные представлены в таблицах 6,7.

Таблица 6 – Календарный план проекта

Код работы	Название	Длительность, дни	Дата начала работ	Дата окончания работ	Состав участников
1	Составление и утверждение технического задания	7	03.11	11.11	руководитель
2	Подбор и изучение материалов по теме	22	11.11	10.12	исполнитель (магистрант), руководитель (консультант)
3	Проведение патентных исследований	3	10.12	14.12	исполнитель, руководитель
4	Выбор направления исследований	2	14.12	16.12	исполнитель, руководитель
5	Календарное планирование работ по теме	2	16.12	18.12	исполнитель, руководитель
6	Проведение теоретических расчетов и обоснований	9	21.12	31.12	исполнитель
7	Построение модели и проведение вычислений	25	11.01	12.02	исполнитель

8	Сопоставление результатов расчетов с ранее полученными данными	7	12.02	22.02	исполнитель
9	Оценка эффективности полученных результатов	2	22.02	24.02	исполнитель, руководитель
10	Определение целесообразности проведения ОКР	1	24.02	25.02	исполнитель, руководитель
11	Составление модели	4	26.02	02.03	исполнитель
12	Оценка эффективности вычислений и их применения	3	03.03	07.03	руководитель
13	Составление программы	7	07.03	15.03	исполнитель, руководитель
14	Проведение испытаний	4	15.03	18.03	исполнитель, руководитель
15	Оформление отчета	18	18.03	12.04	исполнитель
ИТОГО:		116	03.11	12.04	

Таблица 3 - Календарный план-график проведения НИОКР по теме

№ раб	Вид работ	Исполнители	T_{ki}	Продолжительность работ															
				ноябрь			декабрь			январь		февраль			март			апрель	
				1	2	3	1	2	3	2	3	1	2	3	1	2	3	1	2
1	Составление и утверждение технического задания	Руководитель темы	7	■															
2	Подбор и изучение материалов по теме	Инженер, руководитель	22		■	■	■												
3	Проведение патентных исследований	Инженер, руководитель	3					■											
4	Выбор направления исследований	Инженер, руководитель	2					■											
5	Календарное планирование работ по теме	Инженер, руководитель	2					■											
6	Проведение теоретических расчетов и обоснований	Инженер	9						■										
7	Построение модели и проведение вычислений	Инженер	25							■	■	■							
8	Сопоставление результатов расчетов с ранее полученными данными	Инженер	7										■						
9	Оценка эффективности полученных результатов	Инженер, руководитель	2											■					
10	Определение целесообразности проведения ОКР	Инженер, руководитель	1												■				
11	составление модели	Инженер	4													■			

Составление календарного плана необходимо для осуществления контроля реализации проекта, а также для того чтобы распределить ответственность за ту или иную работу.

5.6. Бюджет научно-исследовательского проекта

Для коммерциализации разрабатываемой технологии необходимо рассчитать бюджет научного исследования (проекта). В процессе формирования бюджета, планируемые затраты группировались по статьям, все данные представлены в таблице 4.

Таблица 4- Группировка затрат по статьям

Статьи										
В ид ра бо т	Сырье, матери алы (за вычетом возврат ных отходов ,), покупн ые изделия и полуфаб рикаты	Спец. оборудо вание для научных (экспери менталь ных) работ	Основна я заработн ая плата	Дополни тельная заработн ая плата	Отчисле ния на социаль ные нужды	Нау чны е и про изво дств енн ые ком анд ировки	Оплата работ, выполняе мых сторонни ми организац иями и предприят иями	Проч ие прям ые расх оды	Накладн ые расходы	Итого плановая себестоимо сть
1	0	0	76074,61	9128,95	25561,07	0	0	0	68162,85	237685,99
2	1210	0	24467,9	2936,15	8221,22	0	0	0	21923,24	

Ниже представлены все необходимые расчеты, которые были сведены в таблицу 4.

Расчет стоимости материальных затрат производится по действующим прейскурантам или договорным ценам. В стоимость материальных затрат включают транспортно-заготовительные расходы (3 – 5 % от цены). В эту же статью включаются затраты на оформление документации (канцелярские

принадлежности, тиражирование материалов). Результаты по данной статье представлены в таблице 12.

Таблица 5 - Сырье, материалы, комплектующие изделия и покупные полуфабрикаты

Наименование	Марка, размер	Кол-во	Цена за единицу, руб.	Сумма, руб.
Бумага	SVETOCOPY A4, 80г/м ²	2	225	450
Электроэнергия	кВт/ч	254,76	2,93	746,5
Всего за материалы				1196,5
Транспортно-заготовительные расходы (3-5%)				13,5
Итого по статье С _м				1210

Данный раздел также включает в себя одну из основных составляющих бюджета проекта – заработная плата исполнителя и руководителя.

Величина расходов по заработной плате определяется исходя из трудоемкости выполняемых работ и действующей системы оплаты труда.

В состав основной заработной платы включается премия, выплачиваемая ежемесячно из фонда заработной платы (размер определяется Положением об оплате труда).

Статья включает основную заработную плату работников, непосредственно занятых выполнением проекта, (включая премии, доплаты) и дополнительную заработную плату.

$$C_{зп} = Z_{осн} + Z_{доп} = 100542,5 + 12065,1 = 112607,6, \quad (5.1)$$

где $Z_{осн}$ – основная заработная плата; $Z_{доп}$ – дополнительная заработная плата.

Основная заработная плата ($Z_{осн}$) руководителя (лаборанта, инженера) рассчитывается по следующей формуле:

$$Z_{осн} = Z_{дн} \cdot T_{раб}, \quad (5.2)$$

где $Z_{осн}$ – основная заработная плата одного работника; $T_{раб}$ – продолжительность работ, выполняемых научно-техническим работником, раб. дн. (см. календарный план проекта); $Z_{дн}$ – среднедневная заработная плата работника, руб.

Среднедневная заработная плата рассчитывается по формуле:

$$Z_{дн} = \frac{Z_{м} \cdot M}{F_{д}}, \quad (5.3)$$

где $Z_{м}$ – месячный должностной оклад работника, руб.; M – количество месяцев работы без отпуска в течение года: при отпуске в 24 раб. дня $M = 11,2$ месяца, 5-дневная неделя; $F_{д}$ – действительный годовой фонд рабочего времени научно-технического персонала, раб. дней (таблица 6).

Таблица 6- Баланс рабочего времени

Показатели рабочего времени	Руководитель	Студент
Число дней в году	365	365
Количество нерабочих – выходные/праздничные дни	119	119
Потери рабочего времени: – отпуск – пропуски по случаю болезни	24 0	0 0
Действительный годовой фонд рабочего времени	218	246

Месячный должностной оклад работника:

$$Z_{м} = Z_{тс} \cdot (1 + k_{пр} + k_{д}) \cdot k_{р}, \quad (5.4)$$

где $Z_{тс}$ – заработная плата по тарифной ставке; $k_{пр}$ – премиальный коэффициент, равный 0,3 (т.е. 30% от $Z_{тс}$); $k_{д}$ – коэффициент доплат и надбавок составляет примерно 0,2 – 0,5; $k_{р}$ – районный коэффициент, равный 1,3 (для Томска). Для руководителя была взята заработная плата старшего научного сотрудника из документов сайта ТПУ, планово-финансового отдела.

Тарифная заработная плата $Z_{тс}$ находится из тарифной сетки, принятой на данном предприятии. Расчёт основной заработной платы приведён в таблице 7.

Таблица 7- Расчёт основной заработной платы

Исполнители	Z_m , руб	$Z_{дн}$, руб.	T_p , раб. дн.	$Z_{осн}$, руб.
Руководитель	27938,51	1435,37	53	76074,61
Студент	6240	230,83	106	24467,9
ИТОГО				100542,51

Рассчитаем дополнительную заработную плату. В данную статью включается сумма выплат, предусмотренных законодательством о труде, например, оплата очередных и дополнительных отпусков; оплата времени, связанного с выполнением государственных и общественных обязанностей; выплата вознаграждения за выслугу лет и т.п. (в среднем – 12 % от суммы основной заработной платы).

Дополнительная заработная плата рассчитывается исходя из 10-15% от основной заработной платы, работников, непосредственно участвующих в выполнении темы:

$$Z_{доп} = K_{доп} \cdot Z_{осн}, \quad (5.5)$$

где $Z_{доп}$ – дополнительная заработная плата, руб.; $k_{доп}$ – коэффициент дополнительной зарплаты; $Z_{осн}$ – основная заработная плата, руб.

Отчисления на социальные нужды. Статья включает в себя отчисления во внебюджетные фонды.

$$C_{внеб} = K_{внеб} \cdot (Z_{осн} + Z_{доп}), \quad (5.6)$$

где $k_{внеб} = 30,1$. Это коэффициент отчислений на уплату во внебюджетные фонды (пенсионный фонд, фонд обязательного медицинского страхования и пр.).

Накладные расходы. В эту статью включаются затраты на управление и хозяйственное обслуживание, которые могут быть отнесены непосредственно на конкретную тему. Кроме того, сюда относятся расходы по содержанию, эксплуатации и ремонту оборудования, производственного инструмента и инвентаря, зданий, сооружений и др. В расчетах эти расходы принимаются в размере 70 - 90 % от суммы основной заработной платы научно-производственного персонала данной научно-технической организации.

Накладные расходы составляют 80-100 % от суммы основной и дополнительной заработной платы, работников, непосредственно участвующих в выполнении темы.

Расчет накладных расходов ведется по следующей формуле:

$$C_{\text{накл}} = K_{\text{накл}} \cdot (Z_{\text{осн}} + Z_{\text{доп}}), \quad (5.7)$$

где $k_{\text{накл}}$ – коэффициент накладных расходов.

На основании полученных данных по отдельным статьям затрат в таблице 4 приводится плановая себестоимость.

Данный раздел позволил оценить себестоимость проекта, подсчитать необходимый бюджет. На основе полученных данных можно отметить, проект не утяжелен стоимостью какого-либо оборудования, что означает дешевизну. Другими словами, проект не требует больших финансовых затрат, что упрощает его реализацию.

В данном разделе были определены слабые и сильные стороны проекта, заинтересованные стороны и бюджет. Составлен устав проекта, и выявлены его ограничения. Разработан календарный план и подсчитаны основные статьи расходов. Установлено, что по времени проект рассчитан на умеренную нагрузку, финансирование полностью покрывает выявленные статьи расходов, для работы необходимо два человека. Проект не требует больших финансовых затрат, что облегчает его реализацию.

Список публикаций студента

1. R.P.Truntseva, Influence of thermophysical properties of the solid dependence from temperature on the thermal characteristics and erosion under the action of high-power pulsed ion beams, Методология проектирования молодежного научно-инновационного пространства как основа подготовки современного инженера: Сборник научных трудов Международной молодежной научной школы. Россия, Томск, 02-04 апреля 2014 г., с. 190-194.
2. Р.П. Трунцева, Моделирование тепловых процессов в твердом теле под действием мощных импульсных пучков заряженных частиц: фактор зависимости от температуры, Перспективы развития фундаментальных наук: Сборник научных трудов XII Международной конференция студентов и молодых ученых, Россия, Томск, 21–24 апреля 2015 г., с. 260-262.
3. R.P. Truntseva, Simulating of thermal processes in solids under high-power pulsed ion beams: factor of physical properties dependence on temperature, German-Russian young scientists conference-workshop “Understanding of entrepreneurship as essential part of university study and research – current situation and perspectives”, Russia, Tomsk, 19-20 April 2015.