

**МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕПЛОВЫХ ПРОЦЕССОВ В ТВЕРДОМ ТЕЛЕ ПОД ДЕЙСТВИЕМ
МОЩНЫХ ИМПУЛЬСНЫХ ПУЧКОВ ЗАРЯЖЕННЫХ ЧАСТИЦ: ФАКТОР ЗАВИСИМОСТИ
ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ОТ ТЕМПЕРАТУРЫ**

Р.П.Трунцева

Научный руководитель: профессор, д.ф-м.н. Г.А. Блейхер
Национальный исследовательский Томский политехнический университет,
Россия, г.Томск, пр. Ленина, 30, 634050
E-mail: rusenochka@gmail.com

**SIMULATUNG OF THERMAL PROCESSES IN SOLIDS UNDER HIGH-POWER PULSED BEAMS
OF CHARGED PARTICLES: FACTOR OF PHYSICAL PROPERTIES DEPENDENCE ON
TEMPERATURE**

R.P. Truntseva

Scientific Supervisor: Prof., Dr. G.A.Bleykher
Tomsk Polytechnic University, Russia, Tomsk, Lenin str., 30, 634050
E-mail: rusenochka@gmail.com

***Annotation.**The numerical model of heat processes in solids under the action of high-power pulsed beams of charged particles is presented. The role of physical properties dependences on temperature is analyzed. It is obtained that their accounting in calculations is particularly important in the range of low current density and for the substances with high heat conductivity coefficients.*

Воздействие мощных импульсных пучков заряженных частиц (МИП ЗЧ) является современным инструментом для модифицирования свойств поверхности и получения новых материалов. При этом тепловые и эрозионные процессы, стимулированные облучением веществ, часто оказываются основным источником модифицирования.

Для эффективного технологического использования МИП ЗЧ очень важно знать оптимальные параметры обработки и прогнозировать свойства веществ, которые они могут приобрести в результате облучения. Мы полагаем, что численное моделирование может быть одним из наиболее целесообразных способов решения подобных задач, так как оно позволяет исследовать быстропротекающие процессы, нет необходимости в создании дорогостоящего оборудования и т.п.

При создании и использовании численных моделей имеет место проблема точности результатов, получаемых с их помощью. Применительно к описанию тепловых процессов в твёрдом теле один из источников погрешности – данные о теплофизических свойствах веществ. В настоящее время довольно часто они принимаются в расчётах как зависящими от температуры (например, в работе [1]). Дело в том, что учёт зависимости свойств обрабатываемых материалов от температуры может весьма усложнить поиск решения. К тому же не всегда имеются их значения в необходимом температурном диапазоне, особенно если рассматриваются новые материалы с плохо изученными свойствами. Поэтому важно понимать, в каких случаях нельзя пренебрегать указанными зависимостями при построении численных моделей.

В связи с этим целью работы, результаты которой представляются в докладе, состояла в выявлении влияния учёта зависимости теплофизических свойств веществ от температуры на расчётные характеристики тепловых процессов при моделировании воздействия МИП ЗЧ на твёрдое тело.

Расчёты выполнялись с использованием математической модели тепловых процессов в твёрдом теле под действием МИП ЗЧ [1]. Её модификация, учитывающая зависимость теплофизических свойств облучаемой мишени от температуры, имеет следующий вид:

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

Начальные условия: $T(x, 0) = T_0$.

Здесь $T(x,t)$ - пространственно-временное распределение температуры (ось x перпендикулярна облучаемой поверхности); E_T - тепловая составляющая внутренней энергии вещества мишени; $W(x,t)$ - пространственно-временная функция энерговыделения при торможении частиц пучка в веществе; $\lambda(T)$ - коэффициент теплопроводности облучаемого вещества; $v(T_S)$ - скорость испарения, T_S - температура поверхности мишени.

Условия на границе раздела «конденсированная среда - газ» ($x=0$) можно выразить через уравнение Герца-Кнудсена [1]:

$$\lambda(T_S) \frac{\partial T}{\partial x} = v_f \rho \Delta H, \quad v(T_S) = (2\pi k T_S / m)^{-1/2} \frac{1}{\rho} (p_{sat}(T_S) - p^*),$$

где ρ - плотность вещества мишени, m - масса испаряемых частиц, ΔH - разность энтальпий между паровой и конденсированной фазами, k - постоянная Больцмана, $p_{sat}(T_S)$ - давление насыщенного пара при температуре T_S , p^* - гидростатическое давление на поверхность.

Поставленная краевая задача решалась конечно-разностным методом по явной схеме. Зависимости теплопроводности и теплоёмкости от температуры взяты из [2].

Вычисления проводились на примере пучка ионов углерода с начальной энергией частиц $E_0 = 300$ кэВ с длительностью импульса облучения $\tau = 100$ нс. В качестве облучаемых веществ были взяты металлы с различающимися теплофизическими свойствами (Cu, Al, Fe, Ag). Рассмотрены наиболее значимые характеристики для последствий теплового воздействия пучка на твёрдое тело: толщина расплавленного слоя, время существования жидкой фазы, количество испарившегося вещества. На рис. 1 и 2 показано отличие значений толщины испарившегося (рис. 1) и расплавленного (рис. 2) слоёв, рассчитанных без учёта и с учётом зависимостей коэффициента теплопроводности $\lambda(T)$ и удельной

теплоёмкости $c(T)$. Показателем отличия является величина $\Delta = \frac{|Z_{with} - Z_{without}|}{Z_{with}}$, где Z_{with} и $Z_{without}$ - значения толщины испарившегося (или расплавленного) слоя с учётом указанных зависимостей и без него соответственно.

Принятие во внимание в расчетах зависимостей теплопроводности и теплоемкости от температуры приводит к увеличению значения толщины испарившегося слоя. Причем наибольшая разница наблюдается при относительно невысоких плотностях тока (300...400 А/см²). В случае меди разница составляла величину 7...69%, железа - 1...4%, серебра - 5...42%, алюминия - 2...17%.

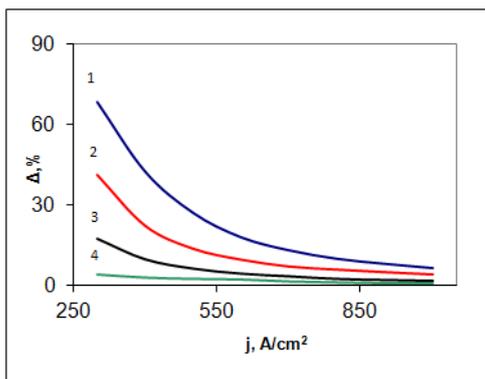


Рис. 1. Отличие значений толщины испарившегося слоя, рассчитанных без и с учетом зависимостей $\lambda(T)$ и $c(T)$ для -меди (1), серебра (2), алюминия (3), железа (4)

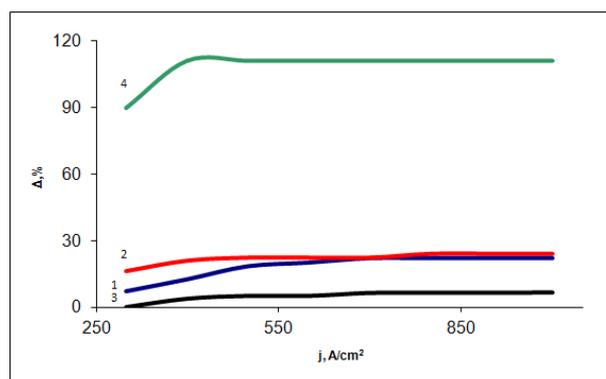


Рис. 2. Отличие значений толщины расплавленного слоя, рассчитанных без и с учетом зависимостей $\lambda(T)$ и $c(T)$ для -меди (1), серебра (2), алюминия (3), железа (4).

При расчетах толщины расплавленного слоя наблюдалось увеличение значений на всем рассматриваемом интервале. При увеличении плотности тока показатель отличия сначала возрастает, затем практически не меняется. Для меди отличие составляло 16%, для железа наблюдалось его уменьшение в 2 раза, для серебра - 16...24%, для алюминия - 4...7%. Учет зависимостей $\lambda(T)$ и $c(T)$ приводит к значениям ниже тех, которые получаются при постоянных теплофизических характеристиках. Наибольшая разница наблюдалась при высоких плотностях тока.

Наши расчёты показывают, что использование в расчётах зависимости теплофизических свойств веществ от температуры приводит к уменьшению значений времени существования жидкой фазы. Так, в случае меди оно составляет 51...37%, для железа – менее 18%, для серебра – 58...53%, для алюминия – 30...37%. Для всех элементов, кроме железа, наибольшее отличие наблюдалось при низких плотностях тока. В случае алюминия имеет место увеличение времени существования жидкой фазы.

Были выполнены расчёты указанных характеристик для других значений начальной энергии бомбардирующих частиц. Получено, что чем больше начальная энергия ионов, тем значительнее расхождение.

Таким образом, результаты расчётов показывают, что учёт зависимости теплофизических свойств веществ от температуры при моделировании тепловых и эрозионных процессов в твёрдом теле под действием МИП ЗЧ особенно важен в области невысоких плотностей тока и для веществ с большим коэффициентом теплопроводности (серебро, медь и др.). Это обусловлено существенной ролью теплопроводного стока из тонкой области торможения частиц пучка в веществе мишени.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Bleykher G.A., Krivobokov V.P. The regularities of solid surface erosion and coating deposition using high-power pulsed beams of charged particles // Nuclear Instrument and Methods in Physics Research. B. –2012. – 292. – P. 34–39.
2. Wang Z.G., Dufour Ch., Paumier E., Toulemonde M. The Se sensitivity of metals under swift-heavy-ion irradiation: a transient thermal process // Phys. Condens. Matter. – 1994. – 6. – P. 6733-6750.