

ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИЕ ПРОЦЕССЫ В ТВЕРДОМ ТЕЛЕ ПРИ ВОЗДЕЙСТВИИ МОЩНЫХ ИМПУЛЬСНЫХ ПУЧКОВ ЗАРЯЖЕННЫХ ЧАСТИЦ

В данной статье представлен обзор работ по теоретическому исследованию процессов диссипации энергии мощных импульсных пучков заряженных частиц и стимулированному облучением переносу атомов в приповерхностных слоях твердого тела, выполненных в НИИ ядерной физики ТПУ за последние пятнадцать лет. Дано математическое описание тепловых, термомеханических, эрозионных процессов, явлений миграции атомов, приведены результаты исследования основных закономерностей их протекания.

1. Введение

Взаимодействие мощных импульсных пучков заряженных частиц (ИПЗЧ) с твердым телом активно исследуется на протяжении последних трех десятилетий. Первые публикации на эту тему появились практически сразу после создания импульсных ускорителей и привлекли внимание тем, что в них было показано, что при переходе от непрерывного к высокointенсивному импульсному режиму облучения происходит качественное изменение природы радиационно-стимулированных процессов. Особенно это заметно для микро- и наносекундных пучков. Это обстоятельство помимо чисто научных задач породило значительные надежды по поводу технологического применения импульсных ускорителей заряженных частиц для модификации физико-химических свойств материалов и изделий.

Одна из наиболее важных задач в разработке радиационных технологий – прогноз изменения структурно-фазового состояния облученной поверхности. Оно в свою очередь зависит как от физических параметров вещества, так и от интенсивности источника излучения. В работе [3], видимо, впервые было показано, что в основе модифицирующего воздействия ИПЗЧ на твердое тело лежат тепловые процессы. В «технологическом» диапазоне интенсивностей ($10^6 - 10^9 \text{ Вт/см}^2$) твердое тело при облучении распыляется, плавится, испаряется, в нем образуются термомеханические напряжения, усиливается миграция атомов и т.д. Его особенностью является одновременное присутствие нескольких фаз. Это усложняет задачу, делает ее нелинейной и препятствует получению аналитического решения даже в простейших случаях.

Отличительной особенностью фазовых превращений в твердом теле, вызванных воздействием ИПЗЧ микро- или наносекундного диапазона, является их быстротечность и сильная зависимость от условий облучения. Попытки экспериментально исследовать эти быстропротекающие процессы редко бывают успешными, так как эксперименты *in situ* обычно очень сложны в техническом отношении. Поэтому самый доступный метод исследования в данном случае – компьютерное моделирование.

Цель данной работы – изложить основные результаты и методику компьютерного моделирования фазовых превращений, эрозии, образования и релаксации термомеханических напряжений, переноса атомов в конденсированной фазе в металлах под действием импульсных (преимущественно наносекундных) пучков заряженных частиц. Изложение будет основано главным образом на работах, выполненных в НИИ ядерной физики при Томском политехническом университете.

2. Моделирование процессов диссипации энергии ИПЗЧ в твердом теле

В общем случае диссипация энергии ИПЗЧ в среде при воздействии на нее потоков излучения описывается весьма сложной для решения системой уравнений сплошной среды совместно с уравнениями состояния вещества. Однако решение в полном виде требуется не всегда. При невысоких мощностях ввода энергии некоторыми связями термодинамических параметров генерируемых в веществе процессов можно пренебречь из-за их незначительности. Поэтому существует возможность упростить систему расчетов без заметных потерь точности вычислений. С этой целью в процессе создания математических моделей диссипации энергии излучения в твердом теле импульсные пучки представляются целесообразным разделить на две группы: умеренной интенсивности и высокointенсивные.

2.1. ИПЗЧ умеренной интенсивности

Воздействие пучков умеренной интенсивности характеризуется следующими признаками: 1) генерируемые вследствие высокоскоростного разогрева волны давлений весьма слабы, связанные с ним деформации вещества не выходят за пределы упругости; 2) небольшие возмущения плотности распространяются со звуковой скоростью и выравниваются гораздо быстрее, чем температура; 3) испарение носит поверхностный характер. Эти особенности позволяют упростить задачу математического моделирования процессов диссипации энергии такого пучка.

2.1.1. Расчет температурных полей

Поскольку термомеханические процессы слабо влияют на эволюцию температурных полей, задача расчета поля температур и определения фазового состояния вещества может быть решена отдельно от термомеханической, с использованием уравнения теплопроводности.

Отметим некоторые важные обстоятельства, которые влияют на постановку задачи о распространении тепла:

- 1) если диаметр пучка существенно превышает длину пробега налетающих частиц в конденсированных средах, а зоны релаксации энергии при торможении частиц перекрываются, так как плотность тока велика, можно использовать одномерное приближение;
- 2) расчет параметров всех теплофизических процессов в металлических мишениях производится по ионной температуре, так как характерное время передачи энергии от электронной к ионной подсистеме в металлах составляет величину $\sim 10^{-12}$ с [1], которая существенно меньше характерных времен рассматриваемых процессов;
- 3) конечноюю скорость распространения тепла, как правило, пренебрегают. Справедливость этого допущения вытекает из результатов, приведенных А.В.Лыковым [2].

Для расчета эволюции температурного поля, как правило, используют задачу Стефана, одномерный вариант которой предполагает следующее уравнение теплопроводности [3]:

$$C_p(x)\rho(x) \frac{\partial T(x,t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \lambda(x) \frac{\partial T(x,t)}{\partial x} + W(x,t), \quad 0 < x < x_b. \quad (1)$$

Здесь x - пространственная координата, t - время, λ - коэффициент теплопроводности, C_p - удельная теплоемкость, ρ - плотность, T - температура, W - удельная мощность энерговыделения, x_b - координата задней стенки мишени.

Начальные и граничные условия имеют вид:

$$T(x,0) = T_0, \quad \frac{\partial T(0,t)}{\partial x} = \frac{\partial T(x_b,t)}{\partial x} = 0. \quad (2)$$

На границе раздела фаз "жидкость - твердое тело" с координатой Z_m должно обеспечиваться условие равенства потоков тепла с учетом сго потерь на фазовые превращения:

$$\lambda \frac{\partial T(z_m - 0,t)}{\partial x} - \lambda \frac{\partial T(z_m + 0,t)}{\partial x} = q_m \rho \frac{\partial Z_m}{\partial t}, \quad (3)$$

где q_m - удельная теплота плавления. Скорость движения фазовой границы Z_m определяется потоком тепла, поглощаемым или выделяемым из-за объемной теплоты фазового перехода $q_m \rho$.

Кроме соотношения (3) на межфазной границе задается еще одно условие, связанное с кинетикой фазового перехода. Обычно принимается, что на границе раздела фаз температура непрерывна и равна равновесной температуре перехода T_m , которую во многих случаях можно считать постоянной величиной. Изменение T_m может быть обусловлено, например, изменением внешнего давления или вязкостью свойств вещества вдоль направления распространения фронта перехода.

Решение задачи Стефана позволило исследовать эволюцию температурных полей в металлических мишениях при облучении нано- и микросекундными ионными и электронными пучками мощностью до 10^9 Вт/см². Построены поля скоростей нагрева и охлаждения, получены зависимости толщины расплавленного слоя и времени существования жидкой фазы от параметров пучков.

Уравнение теплопроводности с учетом плавления и с соответствующими граничными условиями на поверхности может быть использовано для расчета температур в конденсированной фазе в задаче исследования кинетики поверхностного испарения. Данная задача рассмотрена в п. 2.2.

При наращивании мощности излучения изменение плотности, в особенности вблизи поверхности, становится значительным. Расчет температур на основе уравнения теплопроводности, предполагающей плотность конденсированного вещества постоянной, может приводить к большим погрешностям.

ствам. В этом случае следует использовать систему уравнений сплошной среды с включением в уравнение сохранения энергии члена, описывающего поток энергии за счет теплопроводности.

2.1.2. Испарение

На моделировании процесса испарения твердого тела при воздействии мощных ИПЗЧ следует остановиться особо. Анализ литературных данных показал, что ему уделяется наибольшее внимание. Этот факт обусловлен, по-видимому, как сложностью описания данного явления, так и его большой практической значимостью. Данная задача всесторонне решалась для мощного лазерного облучения (например, в [4-20]). Модель воздействия пучков заряженных частиц базируется на аналогичных представлениях.

Процесс испарения меняет свой характер в зависимости от интенсивности облучающих потоков и формы функции энерговыделения в приповерхностной области вещества.

Механизмы испарения атомов условно можно разделить на 2 группы:

1. Тепловой активационный механизм испарения имеет место, когда в приповерхностной области облучаемой мишени тепловая энергия молекул в среднем меньше теплоты испарения, однако отдельные молекулы в результате флуктуаций могут приобретать такую энергию и улетать. Между скоростью фронта испарения V_F и температурой поверхности T существует зависимость, описываемая выражением Аррениуса [4]:

$$V_F \approx av \exp\left(-\frac{L_0 A}{RT}\right), \quad \frac{RT}{A} \ll L_0, \quad (4)$$

где a - постоянная решетки, v - собственная частота колебаний молекул ($av \approx c_s$ - скорость звука), L_0 - теплота испарения при $T=0K$, R - универсальная газовая постоянная, A - атомный вес вещества. Эта формула пригодна лишь для случая испарения в вакууме.

2. Безактивационный механизм реализуется, когда средняя энергия молекул в приповерхностной области облучаемого вещества больше теплоты испарения. Молекулы испаряются безусловно, а скорость процесса испарения лимитируется взаимодействием испаряющихся молекул.

В дальнейшем кинетика испарения определяется взаимодействием молекул пара. В методологических целях, при построении моделей испарения мы рассмотрели 2 крайних случая.

1. Скорость фронта испарения V_F мала, что характерно для ярко выраженного активационного механизма испарения, но может происходить и при безактивационном в случае поверхностных источниках энерговыделения умеренной мощности. Испаряющиеся молекулы в силу своей малой плотности быстро разлетаются на такое расстояние, при котором их взаимодействие утрачивается. Все вещество можно разделить на две четко выраженные фазы - паровую и конденсированную. Данная задача решается с помощью уравнения теплопроводности с соответствующими условиями на границе раздела конденсированной и паровой фаз.

2. Скорость фронта испарения V_F велика, поэтому молекулы не могут быстро удалиться друг от друга. Четкой межфазной границы нет, а имеется плавный переход от нормальной плотности до нуля. Поскольку в течение этого перехода молекулы продолжают взаимодействовать, нужно решать систему уравнений сплошной среды совместно с уравнениями состояния.

В нашей терминологии испарение в первом случае является поверхностным, а во втором - объемным. Соответственно модели для описания испарения первого типа будем называть двухфазными, а второго - гидродинамическими.

В этом пункте рассмотрена двухфазная модель испарения. Гидродинамическая модель описана в разделе 3.

При моделировании поверхностного испарения на границе раздела паровой и конденсированной фаз формулируются соотношения, определяющие температурные условия и динамику фазового перехода. В настоящее время имеется два подхода для задания этих соотношений: модель с изотермическим скачком [5,19,20] и модель с кнудсеновским слоем [4,7,19-22].

Согласно модели с изотермическим скачком температура пара вблизи границы раздела фаз равна температуре конденсированной поверхности, причем испарение происходит при температуре кипения и давлении насыщенного пара. Такое описание соответствует равновесному состоянию вещества. В режиме развитого испарения, видимо, неверно считать фазовый переход равновесным, значит, нелогично использовать модель с изотермическим скачком.

В своих расчетах мы использовали модель с кнудсеновским слоем. Она предполагает, что частицы, испускаемые нагретой поверхностью, имеют максвелловское распределение по скоростям в телес-

ном углу 2π с температурой поверхности T и плотностью числа частиц n_n , равной плотности насыщенного пара при этой температуре. Все течение газа распадается на две характерные области. В первой, прилегающей к поверхности и имеющей длину, равную по порядку величины некоторым длинам свободного пробега, в результате столкновения частиц устанавливается новое состояние газа, которое характеризуется новой, теперь уже изотропной, функцией их распределения по скоростям с новыми температурой \bar{T} и плотностью числа частиц \bar{n} . Эта область называется кнудсеновским слоем. Для описания процессов установления значений этих параметров привлекают кинетическое уравнение Больцмана, решение которого дает соотношения [4]:

$$\bar{T} = 0,65T, \quad (5)$$

$$\bar{\rho} = 0,31\rho_n, \quad (6)$$

$$\rho_n = \left[\frac{mk\theta_0^2}{2\pi h^2 T} \right]^{3/2} \exp\left(-\frac{\lambda_1}{kT} - 1\right), \quad (7)$$

где ρ_n - плотность насыщенного пара, которую определяют как функцию температуры поверхности T для эйнштейновской модели твердого тела, θ_0 - дебаевская температура, λ_1 - энергия связи кристаллической решетки, k - постоянная Больцмана, h - постоянная Планка.

В некоторых работах исследуется дальнейшее движение газа. Для этого в систему решаемых уравнений включают уравнения газодинамики (например, [7, 8, 19, 20, 22]). Однако, если испарение имеет неравновесный характер, что происходит в условиях, близких к вакууму, и при этом газодинамические характеристики пара не представляют интереса, полагают число Маха M равным единице ($M = \bar{u}/\bar{c}$ на внешней стороне кнудсеновского слоя, где \bar{u} - массовая скорость газа, \bar{c} - местная скорость звука в газе), соответственно $\bar{u} = \bar{c}$ (например, [4, 5, 11]).

Температура поверхности, как уже отмечалось, находится из решения уравнения теплопроводности в конденсированной фазе.

Распространение тепла в конденсированной среде описывается уравнением теплопроводности в виде ([4, 7, 20]):

$$\rho C_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} - V_F \frac{\partial T}{\partial x} \right) = \frac{\partial}{\partial x} \lambda \frac{\partial T}{\partial x} + W(x, t). \quad (8)$$

В этой постановке начало координат связывают с подвижной передней поверхностью.

На границе раздела конденсированная среда - газ ($x=0$) должны выполняться законы сохранения массы, импульса и энергии:

$$\rho V_F = \bar{\rho}(V_F - \bar{u}), \quad (9)$$

$$P + \rho V_F^2 = \bar{P} + \bar{\rho}(\bar{V}_F - \bar{u})^2, \quad (10)$$

$$-\lambda \frac{\partial T}{\partial x} = V_F \rho (L_0 + \frac{R}{\mu} [\frac{5}{2} \bar{T} - 3T]). \quad (11)$$

Здесь $\bar{\rho}$, \bar{u} , \bar{P} , \bar{T} - плотность, массовая скорость, давление и температура паров на границе разрыва ($\bar{u} < 0$), L_0 - теплота сублимации вещества мишени при нулевой температуре, R - универсальная газовая постоянная, μ - молярная масса вещества мишени.

Уравнение энергии (11) записано для фазового перехода по модели неравновесного кнудсеновского слоя.

Если исходить из того, что испарение имеет неравновесный характер и происходит в условиях, близких к вакууму, а пар представляет собой идеальный газ, то справедливы следующие недостающие соотношения:

$$P = \frac{\bar{\rho}}{\mu} R \bar{T}, \quad (12)$$

$$\bar{u} = \bar{c} = (5k\bar{T}/3m)^{1/2}, \quad (13)$$

$$M = 1. \quad (14)$$

Необходимо выработать критерий оценки параметров излучения, по которому можно определить тип наиболее вероятного механизма испарения.

В работах Мажукина В.И. и др. [7, 19] указывается, что испарение носит качественно различный характер в зависимости от относительного распределения давления P и температуры T в облучаемом

веществе. Если P оказывается больше критической величины P_{kp} , для перехода жидкость - пар, то испарение описывается газодинамическими уравнениями с непрерывным уравнением состояния. При $P < P_{kp}$ может существовать резкая граница раздела фаз, на которой кроме законов сохранения потоков массы, импульса и энергии необходимо сформулировать дополнительные соотношения, определяющие динамику фазового перехода. То есть, способ моделирования испарения зависит от того, в какую область диаграммы состояния вещества преимущественно попадают его термодинамические характеристики в исследуемом диапазоне параметров излучения. В работе Анисимова С.И. и др. [4] пользуются иным подходом при выборе способа расчета испарения. Они предполагают, что испарение может протекать по двум механизмам: тепловому и гидродинамическому. В первом случае кинетическая энергия движения атомов значительно меньше теплоты испарения, во втором - в слое твердого вещества ионы в течение короткого времени получают энергию, намного большую теплоты испарения материала.

Нам представляется, что последний подход с некоторыми оговорками более оправдан. По сути, кинетика испарения всегда имеет в своей основе газодинамические процессы, однако в ряде случаев взаимодействием атомов пара между собой и с поверхностью конденсированной фазы можно пренебречь и тем самым существенно упростить расчетные модели.

В работе [23] представлен оценочный критерий, по которому можно определить тип кинетики испарения. В качестве критерия берется значение скорости продвижения границы V_F , на которой тепловая энергия вещества равна энергии сублимации L_0 (скорость фронта перегретой фазы). Будем считать, что взаимодействием молекул можно пренебречь при плотности $\rho \leq 0,01\rho_0$, где ρ_0 - плотность конденсированного вещества при нормальных условиях; $L_0 \sim 10^6$ Дж/кг для большинства материалов; средняя скорость молекул в направлении, перпендикулярном поверхности, $V_{mol} \cong \sqrt{2L_0} \sim 10^3$ м/с; средняя плотность паров вблизи поверхности равна $\rho_0 \frac{V_F}{V_{mol}}$, что справедливо при испарении в вакуум. Так как

$$\frac{\rho}{\rho_0} = \frac{V_F}{V_{mol}}, \quad (15)$$

получаем $V_F = 10$ м/с. При $V_F \leq 10$ м/с испарение является поверхностным и описывается двухфазными моделями. При $V_F > 10$ м/с оно приобретает объемный характер и рассчитывается в рамках гидродинамической модели.

Заметим, что модели, основанные на решении уравнений сплошной среды с использованием широкодиапазонных уравнений состояния, без специальных граничных условий "не чувствуют" активационный механизм испарения.

2.1.3. Расчет термомеханических напряжений

При облучении ИПЗЧ умеренной интенсивности изменения массовой плотности вещества невелики, они способны вызывать лишь упругие деформации. Поэтому образование и распространение волн термомеханических напряжений вполне корректно описывать в рамках линейной теории упругости. Согласно этой теории между тензорами напряжений и деформаций устанавливается линейная связь, которая определяется законом Гука [25]. Распространение волн термомеханических напряжений описывается уравнением термоупругих колебаний [26].

В своих расчетах мы пользовались одномерным приближением в направлении, нормальному к поверхности мишени, которое является корректным при следующих допущениях:

- а) пучок падает нормально к поверхности;
- б) его диаметр и характерные размеры изменения интенсивности излучения в радиальном направлении намного больше толщины образца;
- в) ширина образца много больше его толщины, так что основной эффект в поле динамических напряжений будут вносить волны, отражаемые от передней и задней поверхностей.

В этом случае задача о распространении термомеханических напряжений $\sigma(x, t)$ сводится к решению системы уравнений теплопроводности (1) и термоупругости:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left[c_s^2(x) \frac{\partial \sigma(x, t)}{\partial x} \right] \frac{\partial^2 \sigma(x, t)}{\partial t^2} = \Gamma C_p \rho \frac{\partial^2 T(x, t)}{\partial t^2}. \quad (16)$$

Здесь Γ - коэффициент Грюнайзена.

$$\sigma(x,0)=0, \quad (17)$$

$$\sigma(0,t)=-P_{ext}, \quad (18)$$

$$\sigma(x_e,t)=0 \quad (19)$$

- условие свободной поверхности при отсутствии внешнего давления.

При воздействии излучения, способного вызвать интенсивное испарение с поверхности, необходимо на лицевой поверхности конденсированной фазы задавать давление паров P_{ext} . Оно может быть рассчитано с помощью двухфазной модели испарения (5)-(14).

Модель расчета напряжений в рамках линейной теории упругости предполагает линейную связь между тензорами напряжений и деформаций. При напряжениях, превышающих предел упругости материала, эта связь нарушается. Область линейной зависимости можно определить по изотерме холдного сжатия вещества $P_x(\rho)$. При выходе за эти пределы задачу об образовании и распространении напряжений следует решать в рамках теории движения сплошной среды.

2.2. Высокоинтенсивные ИПЗЧ

С увеличением интенсивности излучения в веществе а) возникают пластические деформации, б) плотность в конденсированной фазе заметно меняется, в) испарение приобретает ярко выраженный объемный характер. Следовательно, тепловые, термомеханические и эрозионные процессы необходимо рассматривать в совокупности, в рамках теории движения сплошной среды.

В научной литературе разработан ряд методов решения системы уравнений сплошной среды.

Воздействие на вещество пучков заряженных частиц со сверхмощными потоками энергии ($J \geq 10^{14} \text{ Вт}/\text{см}^2$ для электронов и $J \geq 10^{12} \text{ Вт}/\text{см}^2$ для ионов) рассматривалось в задачах, связанных с ионным термоядерным синтезом и изучением поведения материалов в надкритической области (например, [27-29]). Исследователей интересовала, главным образом, кинетика образования и разлета плазмы, а также генерация ударных волн в конденсированной фазе. Использованные ими методы Годунова [30] и "крупных частиц" Белоцерковского [31], разработанный для мощного лазерного воздействия, предполагают решение системы уравнений в форме Эйлера и позволяют корректно рассчитывать большие деформации вещества. Однако они неустойчивы для случаев менее интенсивного движения вещества, а также не позволяют определять положение границы между паровой и конденсированной фазами. Метод "крупных частиц" допускает лишенное физического смысла перетекание вещества из конденсированной области в паро-плазменную, что допустимо в решении газодинамических задач, но не может быть корректным при рассмотрении менее интенсивных процессов движения вещества.

Использованный в [32] метод решения уравнений сплошной среды в форме Лагранжа устраниет неустойчивость расчетов, позволяет рассчитывать термодинамические параметры в многослойных мишениях, однако не обладает достаточной точностью при больших деформациях вещества, каковой, в частности, является эрозия.

Предлагаемый нами метод решения уравнений сплошной среды в форме Эйлера [23] устраниет вышеуказанные недостатки. Применялся одномерный вариант уравнений в предположении, что диаметр пучка и ширина образца много больше его толщины:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + u \frac{\partial (\rho u)}{\partial x} = 0, \quad (20)$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} = - \frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial x}, \quad (21)$$

$$\frac{\partial E}{\partial t} + u \frac{\partial E}{\partial x} = - \frac{1}{\rho} P \frac{\partial u}{\partial x} + W. \quad (22)$$

Использовались широкодиапазонные уравнения состояния вещества [33].

Решение осуществлялось методом "крупных частиц" по схеме расщепления [31] с некоторыми существенными модификациями, имеющими целью повысить устойчивость вычислений и не допустить присущего газодинамическим задачам лишенного физического смысла растекания конденсированного вещества. Координатная сетка была сделана подвижной (растягивающаяся и сжимающаяся) с тем, чтобы скорость границ конденсированной фазы относительно сетки равнялась нулю.

Фазовая принадлежность вещества определялась сравнением его тепловой энергии $E_T(\rho, T)$ с энергией сублимации $L(\rho)$, зависящей от плотности:

$$L(\rho) = L(\rho_0) - E_x(\rho_0), \text{ (для } \rho < \rho_0\text{)} \quad (23)$$

где $E_x(\rho)$ - "холодная" составляющая внутренней энергии вещества.

Величина L представляет собой энергию, которую нужно затратить, чтобы развести все атомы единицы массы вещества в бесконечность.

Границей конденсированной фазы считалась линия раздела между областями с $E_T(\rho, T) \geq L(\rho)$ и $E_T(\rho, T) \leq L(\rho)$.

Если вещество находится в сжатом состоянии ($\rho > \rho_0$), то критерием его перехода в пар будет условие достижения температуры выше или равной критической.

В момент начала импульса облучения $t=0$ конденсированное вещество занимало лишь часть центральных ячеек сетки, в остальных ячейках задавалась малая фоновая плотность ($\sim 10^{-5}$ кг/м³). Сетка выбиралась достаточно большой для того, чтобы задаваемые граничные условия (фоновое давление) не могли существенно повлиять на расчет процессов испарения и разлета паров. Вещество, покинувшее координатную сетку, считалось безвозвратно испарившимся.

Таким образом, предлагаемая модификация известного метода "крупных частиц" позволяет рассчитать положение конденсированной поверхности мишени, при этом не допускается лишенное физического смысла перетекание вещества через нее. Данный метод является надежным инструментом для расчета процесса объемного испарения. На его основе получены результаты, опубликованные в [23,24]. Двумерный вариант разработанного метода дает возможность рассчитывать гидродинамическое перемешивание вещества мишени [34].

2.3. Результаты расчетов

Для разработки технологий модификации поверхности материалов под действием ИПЗЧ очень важно иметь представление о пространственно-временной конфигурации полей температур, скоростях нагрева и охлаждения приповерхностных слоев мишени, глубине проплавления, времени существования жидкой фазы, количестве испаряющегося вещества, а также об интенсивности развивающихся при этом термомеханических процессов. Знание зависимостей этих характеристик от параметров пучка предоставит возможность определять оптимальные параметры облучения.

В этой работе мы приводим результаты расчетов вышеуказанных характеристик для случая воздействия на металлы нано- и микросекундных пучков заряженных частиц с начальной энергией $E_0=0,1..2$ МэВ в диапазоне мощности $J=10^7..10^{10}$ Вт/см² при ионном и $10^8..10^{12}$ Вт/см² при электронном облучении.

ИПЗЧ с указанными параметрами выбраны по той причине, что они зарекомендовали себя как перспективное средство в технологиях модификации поверхности материалов (например, [35-39]), при этом достигнуты значительные успехи в их генерации [40], предоставляющие возможность внедрения в промышленность. Однако до настоящего времени не выявлены основные закономерности диссиляции энергии этих ИПЗЧ в веществе, что весьма затрудняет их эффективное применение.

С точки зрения компьютерного моделирования данный диапазон параметров охватывает пучки как умеренной, так и высокой интенсивности. Поэтому для определения зависимости тепловых, термомеханических и эрозионных процессов от параметров пучков необходимо использовать все вышеописанные модели с учетом условий их корректного применения.

2.3.1. Пространственно-временная функция энерговыделения

В основе наших расчетов лежат данные о пространственно-временном распределении мощности энерговыделения $W(x, t)$. Исследования показали, что в нано- и микросекундном режимах облучения закономерности протекания тепловых и термомеханических процессов в твердом теле определяются мощностью ввода энергии, длительностью импульса облучения, а также пространственной формой функции энерговыделения.

При определении функции энерговыделения для пучков заряженных частиц исследуемого диапазона мощности можно не учитывать эффект коллективного взаимодействия частиц пучка [41]. Если допустить, что спектр частиц неизменен на протяжении импульса, временное и пространственное распределения функции энерговыделения можно считать независимыми:

$$W(x, t) = \frac{1}{e} \cdot Q(x) \cdot j(t), \quad (24)$$

где e - заряд электрона, $j(t)$ - временное распределение плотности тока в импульсе, $Q(x)$ - пространственное распределение потерь энергии при прохождении одной частицы через вещество (удельные потери энергии).

Форма импульса тока $j(t)$ в общем случае зависит от вида ускорителя, режима его работы и параметров пучка. Однако для расчетов вполне удовлетворительно подходит треугольная аппроксимация $j(t)$ вида:

$$j(t) = \begin{cases} j \cdot \frac{t}{t_{\max}}, & 0 \leq t < t_{\max}, \\ j \cdot \frac{t - \tau}{t_{\max} - \tau}, & t_{\max} \leq t \leq \tau, \\ 0, & t > \tau. \end{cases} \quad (25)$$

Здесь j - максимальное значение плотности тока в импульсе, τ - длительность импульса, t_{\max} - положение его максимума. Заметим, что при данной аппроксимации общая выделенная энергия не зависит от t_{\max} .

Для модельных расчетов пучки предполагались монохроматическими. В общем случае спектральное распределение реальных пучков может быть легко учтено, однако во многих случаях расчет по средней энергии пучка является хорошей аппроксимацией.

Вычисление пространственного распределения энергии $Q(x)$ для ионов производилось по модели Брайса [42]. В рассматриваемом диапазоне энергий (0,1-2 МэВ) необходимо учитывать как ядерное, так и электронное торможение. Величины ядерных и электронных тормозных способностей для углерода и более тяжелых ионов рассчитывались в рамках теории Линхарда-Шарфа-Шиогта [43]. Для легких ионов не существует надежной аналитической аппроксимации электронной тормозной способности, поэтому при расчете потерь энергии протонами были использованы экспериментально полученные табличные значения электронных тормозных способностей [44].

Пространственная составляющая энерговыделения $Q(x)$ при прохождении электронов через вещество рассчитывалась методом аналитической аппроксимации Макарова [45].

Результаты расчетов профилей $Q(x)$ приведены на рис. 1.

2.3.2. Температурные поля

Характерные конфигурации полей температур при воздействии потоков умеренной интенсивности представлены на рис. 2 для ионного и на рис. 3 для электронного облучения. Наибольший разогрев мишени в момент прекращения облучения находится в области максимума энерговыделения. При электронном воздействии профили температур в конце импульса ($t=\tau$) повторяют форму функции энерговыделения частицы. В случае же облучения ионами углерода теплопроводность размывает ее в течение импульса. После прекращения облучения происходит быстрое остывание поверхностных и нагревание глубинных слоев.

Интенсивность тепловых процессов для $t>\tau$ определяется складывающимися к моменту окончания импульса градиентами температурных полей. Самые высокие градиенты характерны для облучения тяжелыми и средними ионами ($\sim 10^8$ К/м), а при электронном облучении они самые низкие ($\sim 5 \cdot 10^6$

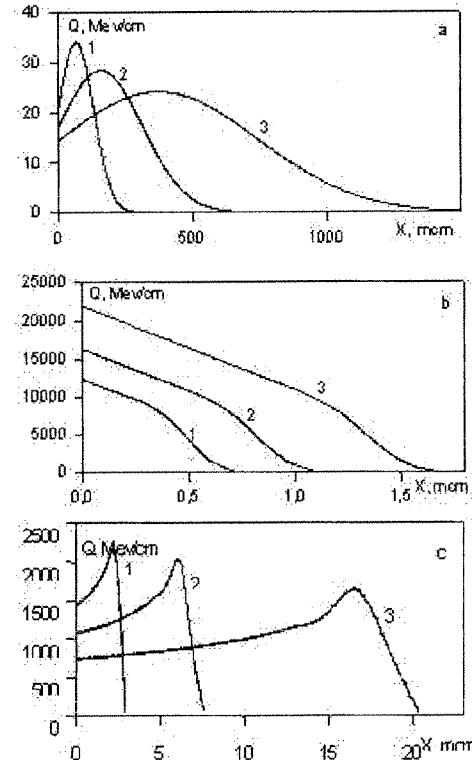


Рис. 1. Удельные потери энергии в меди при прохождении электрона (а), иона углерода (б) и протона (в) с начальной энергией: 1 - 0,5 МэВ, 2 - 1 МэВ, 3 - 2 МэВ.

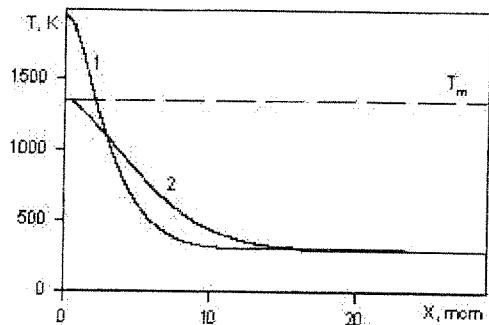


Рис. 2. Профили температур в медном образце, облучаемом пучком ионов углерода с начальной энергией 1 МэВ, плотностью тока 50 A/cm^2 , длительностью импульса 100 нс в моменты времени: 1 - 100 нс (максимальное проплавление); 2 - 210 нс (полное затвердевание)

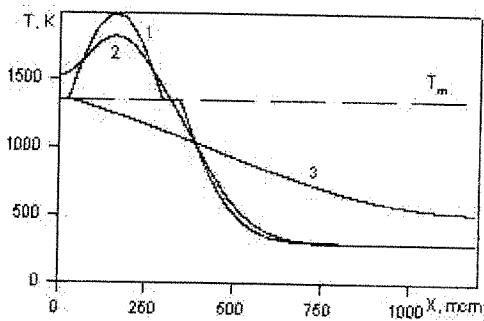


Рис. 3. Распределение температур в медном образце при воздействии наносекундного электронного пучка ($\tau = 100 \text{ нс}$) с начальной энергией электронов 1 МэВ и плотностью тока 6 kA/cm^2 в моменты времени: 1 - 100 нс; 2 - $2.8 \cdot 10^{-5} \text{ с}$ (наибольшее проплавление); 3 - $1.65 \cdot 10^{-3} \text{ с}$ (полное затвердевание).

К/м). Поэтому и скорости охлаждения имеют наибольшие значения при ионном ($10^9..10^{10} \text{ K/с}$ (рис. 4)) облучении. Они возникают в тонком слое порядка единиц микрометров сразу же после окончания импульса. В случае же электронов предельные значения скорости охлаждения лежат в интервале $10^6..10^8 \text{ K/с}$.

На рис. 5 приведена зависимость скорости охлаждения расплава от начальной энергии частиц при облучении электронным пучком. Видно, что с ростом энергии она падает, так как увеличивается размер зоны энерговыделения, что ведет к уменьшению градиентов температур. По этой же причине величины скоростей охлаждения при электронном облучении примерно на 2 порядка ниже, чем при ионном с теми же начальными энергиями частиц.

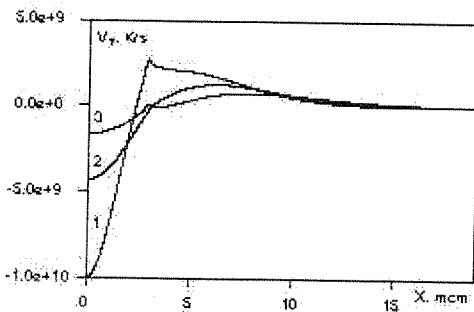


Рис. 4. Профиль скоростей изменения температуры в медном образце при его облучении пучком ионов углерода с энергией 1 МэВ, плотностью тока 40 A/cm^2 и длительностью импульса 100 нс, где 1 - 120 нс; 2 - 150 нс; 3 - 200 нс.

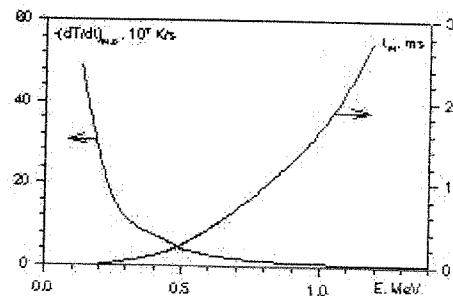


Рис. 5. Зависимости максимальной скорости охлаждения и времени существования жидкой фазы в медном образце от начальной энергии электронов. Плотность тока в пучке выбиралась такой, чтобы $\left[\frac{\partial E}{\partial x} \right]_{\max} \cdot j = 1.7 \cdot 10^{11} \text{ Bt/cm}^3$. Длительность импульса во всех случаях равна 10^{-7} с . Максимальный разогрев также во всех случаях одинаков.

На рис. 6-9 приведены результаты по плавлению и испарению. Они получены, главным образом, из решения уравнений (1)-(14).

При электронном облучении плавление начинается на некоторой глубине, в области максимального энерговыделения (рис. 6). Причем существуют такие режимы облучения, при которых проплавление не доходит до поверхности, она остается твердой. Время существования жидкой фазы составляет единицы миллисекунд и растет с ростом начальной энергии частиц, так как размер зоны энерговыделения тоже возрастает. По этой же причине при ионном облучении размер расплавленного слоя

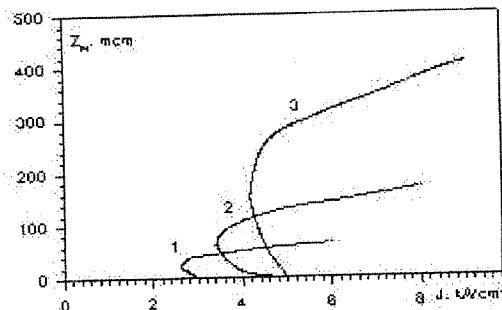


Рис. 6. Зависимость положения границ проплавления в медной мишени от плотности тока при различных начальных энергиях электронного пучка (1 - 0,25 МэВ; 2 - 0,5 МэВ; 3 - 1 МэВ).

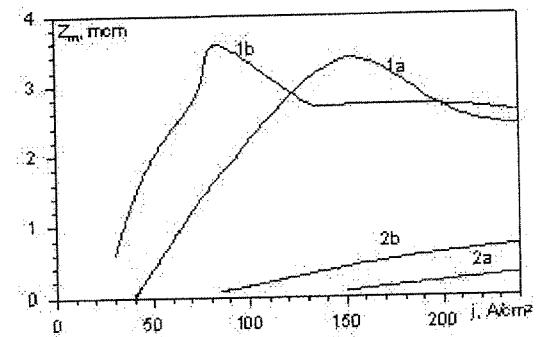


Рис. 7. Зависимость толщины расплавленного (1) и испарившегося (2) слоя от плотности тока при облучении медного образца пучком ионов углерода с длительностью импульса 120 нс и начальной энергией частиц: а - 0,5 МэВ; б - 1 МэВ.

(рис. 7, кривые 1а и 1б) примерно на 2 порядка, а время существования расплава на 4 порядка ниже, чем при электронном с теми же начальными энергиями частиц.

Зависимость толщины расплавленного слоя от плотности тока имеет сложный характер. С ростом плотности тока она испытывает насыщение (рис. 6) и даже спад (рис. 7, кривые 1а и 1б), так как энергия пучка уносится парами мишени.

Для ионного облучения с начальной энергией частиц в интервале 0,1..2 МэВ процесс теплопроводности заметно сказывается на распределении температурных полей в течение импульса. Поэтому наблюдается ярко выраженная зависимость глубины проплавления и толщины испарившегося слоя от длительности импульса пучка (рис. 8).

В рассматриваемом диапазоне интенсивностей излучения испарение при электронном облучении (рис. 9) сначала является поверхностным (кривая 1), а затем по мере роста плотности тока приобретает объемный характер (кривая 2). Кривая 1 рассчитана по двухфазной модели испарения, корректной для ИПЗЧ умеренной интенсивности. Однако с ростом плотности тока j (на рис. 9 для $j > 17 \text{ kA/cm}^2$) модель перестает работать, так как, во-первых, меняется механизм испарения, а во-вторых, в результате термомеханических процессов плотность конденсированного вещества вблизи поверхности претерпевает значительные изменения. Например, при облучении электронным пучком с $E_0=0,5$ МэВ и $j=50 \text{ kA/cm}^2$ в момент окончания импульса ($\tau=100 \text{ нс}$) плотность конденсированного вещества вблизи поверхности уменьшается почти в 2 раза (рис. 13). Расчет температур на основе уравнения теплопроводности, предполагающий плотность конденсированного вещества постоянной, приводит к большим погрешностям (рис. 10). Поэтому при больших j необходимо использовать гидродинамическую модель испарения (кривая 2 на рис. 9).

Резкий скачок количества испарившегося вещества Z_e на кривой 2 рис. 9 при $j=17 \text{ kA/cm}^2$ объясняется двумя факторами: тем, что профиль удельных потерь энергии электронов в веществе имеет максимум в глубине образца, и тем, что в расчетах не принимался во внимание активационный тсп-

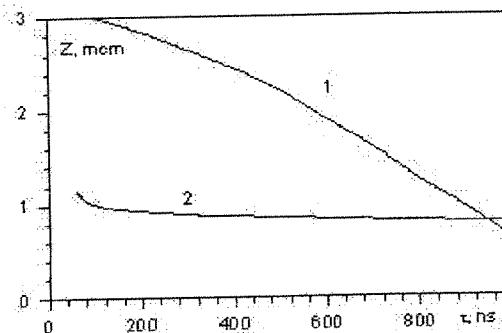


Рис. 8. Зависимость толщины расплавленного (1) и испарившегося (2) слоя от длительности импульса при облучении медного образца пучком ионов углерода. Начальная энергия частиц E_0 и флюенс Φ постоянны ($E_0 = 1 \text{ МэВ}, 1 - \Phi = 7,5 \text{ Дж/см}^2, 2 - \Phi = 30 \text{ Дж/см}^2$).

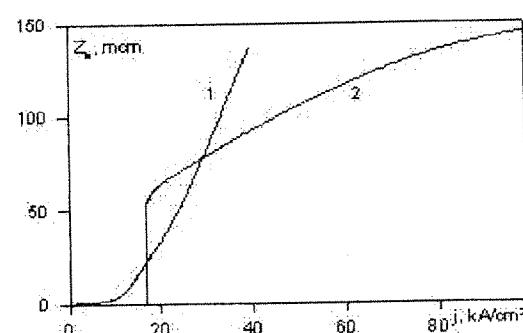


Рис. 9. Зависимость толщины испарившегося слоя медного образца от плотности тока электронного пучка с начальной энергией 0,5 МэВ, длительностью импульса 100 нс. Кривая 1 посчитана по двухфазной модели испарения, 2 - по гидродинамической.

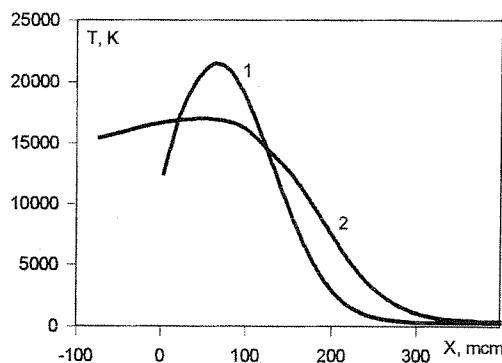


Рис. 10. Профили температур в конденсированной фазе медной мишени в момент окончания импульса электронного облучения (100 нс) с начальной энергией частиц 0,5 МэВ и плотностью тока в пучке 50 kA/cm^2 , посчитанные по различным моделям: 1 - уравнение теплопроводности с двухфазной моделью испарения; 2 - решение системы уравнений сплошной среды.

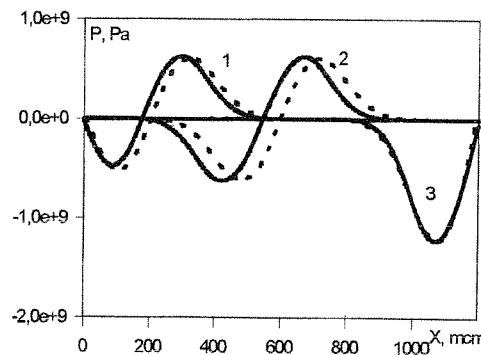


Рис. 11. Профили давлений в медном образце толщиной 1,2 мм при облучении электронным пучком с начальной энергией 0,5 МэВ, плотностью тока 800 A/cm^2 , длительностью импульса 100 нс в моменты времени: 1 - 100 нс; 2 - 200 нс; 3 - 375 нс. Расчет произведен по гидродинамической модели (сплошная линия) и уравнению упругости (пунктир).

ловой механизм испарения. Данный механизм заметен при малых плотностях тока пучка, но при больших j на фоне бурно развивающегося испарения в гидродинамическом режиме он становится несущественным. Насыщение зависимости $Z_e(j)$ вызвано экранировкой конденсированной фазы образца параметрами.

При ионном облучении в данном диапазоне параметров испарение является поверхностным и рассчитывается по двухфазной модели (рис. 7, кривые 2а, 2б).

При воздействии протонов с энергией $E_0 < 1$ МэВ испарение остается поверхностным, как и в случае тяжелых и средних ионов, но при $E_0 > 1$ МэВ его характер сходен с рассмотренным случаем электронного воздействия.

2.3.3 Термомеханические процессы

Форма и интенсивность волн сжатия и разрежения, образующихся в результате термоудара, сложным образом зависят от функции энерговыделения. При мгновенном вводе энергии волна сжатия повторяет форму $Q(x)$. Однако в реальности временная развертка мощности ввода энергии является куполообразной [40], поэтому движущаяся волна сжатия в общем случае есть суперпозиция упругих и пластических деформаций, имеющих разные механизмы реализации и скорости распространения. В

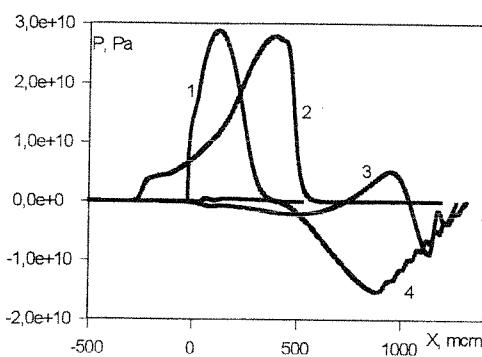


Рис. 12. Профили давлений в медном образце толщиной 1,2 мм при воздействии импульсного электронного пучка с начальной энергией частиц 0,5 МэВ, плотностью тока 50 kA/cm^2 , длительностью импульса 100 нс в моменты времени: 1 - 50 нс; 2 - 100 нс; 3 - 300 нс; 4 - 430 нс.

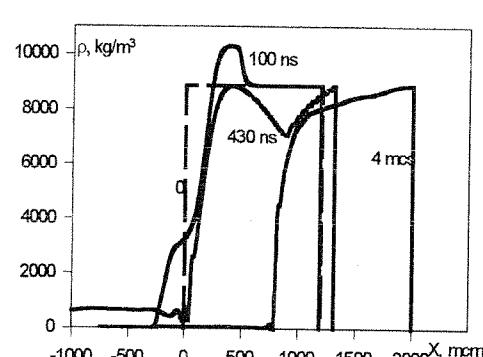


Рис. 13. Профили плотности в медном образце толщиной 1,2 мм при воздействии импульсного электронного пучка с начальной энергией частиц 0,5 МэВ, плотностью тока 50 kA/cm^2 , длительностью импульса 100 нс.

некотором диапазоне невысоких мощностей облучения движение вещества мишени является исключительно упругим. Наращивание мощности приводит к появлению пластических течений, а также к возникновению ударно-волновых явлений.

На рис. 11 представлена эволюция давлений в медном образце толщиной 1,2 мм при таких параметрах облучения электронным пучком, когда имеют место только упругие механические процессы ($E_0=0,5$ МэВ, $j=800$ А/см², $t=100$ нс). В данном случае испарение с поверхности отсутствует (см. рис. 9). Вглубь образца движется не только волна сжатия, но следом за ней идет волна разрежения, которая образовалась в результате разгрузки передней поверхности (кривые 1 и 2 на рис. 11) и имеет амплитуду, равную амплитуде волны первичного сжатия P_+ . Первичная волна сжатия, достигая задней стенки, отражается от нее. Сформировавшаяся таким образом волна разрежения тоже имеет амплитуду P_+ . При наложении волн разрежения, движущихся навстречу друг другу, формируется разрежение с амплитудой $2P_+$. Кривая 3 - это профиль P , являющийся результатом интерференции волн разрежения. Для данных параметров излучения результаты расчетов по гидродинамической модели и уравнению упругости совпадают. Но при $j>1000$ А/см² (для тех же E_0 и t) в веществе появляются пластические течения и ударные волны, а это значит, что для расчета термомеханических процессов можно использовать только гидродинамическую модель.

Рассмотрим эволюцию термомеханических процессов в том же медном образце при облучении электронным пучком с плотностью тока $j=50$ кА/см² (для $E_0=0,5$ МэВ и $t=100$ нс). Изменения давления и плотности для этого случая приведены на рис. 12, 13. Данный режим облучения характеризуется тем, что он создает интенсивное испарение на поверхности образца, которое имеет объемный характер (см. рис. 9). Пары давят на переднюю стенку мишени, препятствуя разгрузке. Поэтому к концу облучения волна разрежения от передней поверхности так и не появилась (кривая 2 на рис. 12). К кон-

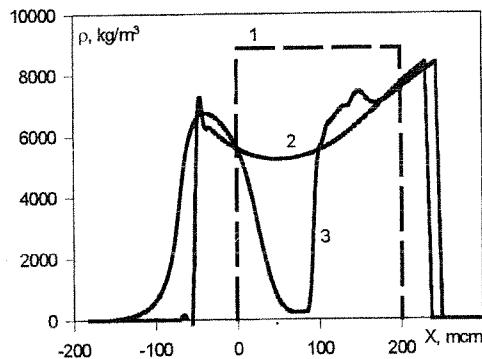


Рис. 14. Профили плотности в медном образце толщиной 200 мкм при его облучении электронным пучком с начальной энергией частиц 0,5 МэВ, плотностью тока 15 кА/см², длительностью импульса 100 нс в моменты времени: 1 - до облучения, 2 - 100 нс; 3 - 200 нс.

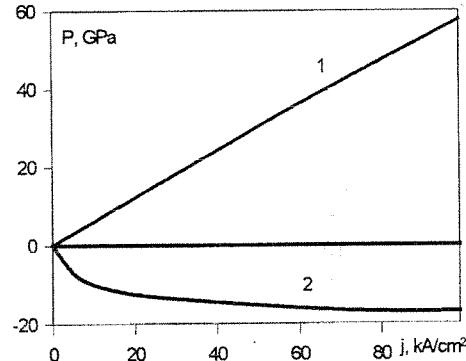


Рис. 15. Зависимость давлений максимального сжатия (1) и разрежения (2) в медном образце от плотности тока электронного пучка с начальной энергией частиц 0,5 МэВ, длительностью импульса 100 нс.

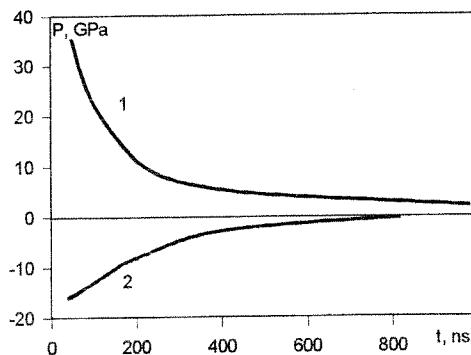


Рис. 16. Зависимость давлений максимального сжатия (1) и разрежения (2) в медном образце от длительности импульса при облучении электронным пучком с начальной энергией частиц 0,5 МэВ и флюенсом 10^7 Дж/м².

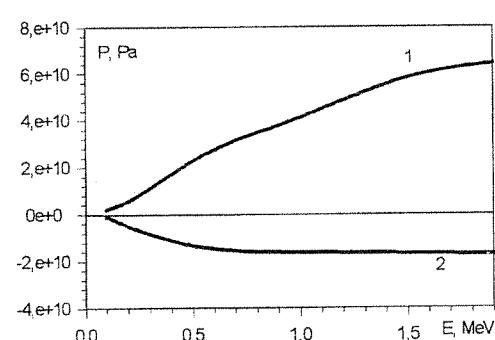


Рис. 17. Зависимость давлений наибольшего сжатия (1) и разрежения (2) в медном образце от начальной энергии электронов в пучке длительностью 100 нс при условии $jE_0/R_p = 10^{12}$ Вт/см³ (R_p - пробег электронов в веществе).

ней стенке образца движется фронт ударной волны с амплитудой $2,5 \cdot 10^{10}$ Па, что соответствует сжатию вещества в 1,13 раза (рис. 13). После прекращения облучения интенсивное испарение с поверхности продолжается. По мере разлета паров их давление на переднюю стенку ослабевает, что приводит к ее разгрузке (кривая 3 на рис. 12). Амплитуда волны разрежения гораздо меньше амплитуды первичной волны сжатия, потому что, во-первых, пары давят на переднюю стенку мишени, и, во-вторых, движение вещества не является упругим. Заметим, что при еще больших интенсивностях облучения ($j > 75$ кА/см²) она вообще не образуется, и в глубь вещества распространяется однополярный импульс. Волна разрежения от задней поверхности также будет иметь амплитуду, меньшую, чем P_+ . Через 430 нс происходит наложение волн разрежения, идущих от передней и задней поверхностей (кривая 4 на рис. 12). В этот момент создается наибольшая опасность для сплошности образца. В данном случае нарушения сплошности не произошло, однако следует иметь в виду, что в расчетах кристаллическая структура вещества предполагалась идеальной, и динамический предел прочности определялся изотермами сжатия-разрежения. В реальных материалах динамический предел прочности может быть гораздо ниже (к сожалению, значения динамических пределов прочности в наносекундном режиме нагружения в научной литературе представлены очень слабо). Кроме этого, обнаружено, что стойкость образцов к механическому разрушению зависит от их толщины. Если толщина образца меньше длины пробега частиц в веществе, то максимальные растягивающие напряжения возникают в области сильного радиационного разогрева. А для нарушения сплошности, т.е. разрыва межатомных связей, нагретого вещества требуется затратить меньше энергии, чем холодного. Например, при облучении медного образца толщиной 0,2 мм нарушение сплошности наблюдается уже при $j=15$ кА/см² ($E_0=0,5$ МэВ, $t=100$ нс, рис. 14), в то время, как образец толщиной 1,2 мм сохраняет целостность и при $j=50$ кА/см² (рис. 13).

Зависимости наибольших давлений сжатия (P_+) и разрежения (P_-) от плотности тока, длительности импульса и начальной энергии частиц при электронном облучении медного образца приведены на рис. 15-17. Насыщение зависимостей амплитуды волны разрежения связано с испарением и достижением минимума изотермы.

С уменьшением начальной энергии частиц уменьшаются и наибольшие давления сжатия и разрежения, так как размер зоны энерговыделения сокращается. По этой же причине амплитуды волн давлений, генерируемых при ионном облучении, примерно на 2 порядка ниже, чем при электронном с теми же начальными энергиями частиц.

Таким образом, компьютерное моделирование показало, что ИПЗЧ в исследованном диапазоне параметров с точки зрения воздействия на металлы могут быть как умеренными, так и высокоинтенсивными. Переход от умеренной к высокой интенсивности лежит в диапазоне $10^8..10^9$ Вт/см² в случае ионов и $10^9..10^{10}$ Вт/см² в случае электронов. Выявлено, что особенности тепловых и термомеханических процессов в наносекундном режиме облучения определяются пространственно-временной функцией энерговыделения излучения в веществе мишени. Следовательно, области применения расчетных моделей по мощности излучения зависят от начальной энергии частиц E_0 , длительности импульса t , сорта частиц и конечно же свойств самой мишени.

3. Исследование механизмов интенсивного переноса атомов в веществе, облучаемом мощными наносекундными пучками заряженных частиц

Если в изучении фундаментальных вопросов диссипации энергии мощных импульсных излучений в веществе достигнут некоторый прогресс, то уровень понимания физики процессов переноса вещества значительно ниже. Нет ясности даже в том, какие именно механизмы ответственны за интенсивную миграцию атомов в конденсированной фазе.

Были проведены эксперименты по облучению тонкопленочных металлических образцов мощным пучком ионов углерода с энергией $E_0 = 0,5$ МэВ и длительностью импульса на полувысоте $t = 200$ нс [49-50]. Концентрационные профили снимались методом масс-спектрометрии вторичных ионов. Резкое падение профиля концентрации материала пленки в необлученном образце (рис. 18, кривая 1) свидетельствует о хорошем качестве подготовки образцов и проведения анализа. Для облученных образцов зафиксирована значительная глубина проникновения атомов пленки в подложку (рис. 18, 19). Приняв за длительность диффузионных процессов время существования на поверхности образцов жидкой фазы, рассчитанное по описанной выше методике, мы определили эффективные коэффициенты диффузии, которые оказались равны $10^{-2}..10^{-4}$ см²/с, что на несколько порядков превышает значения коэффициентов диффузии в жидких металлах. Столь интенсивный перенос не может быть

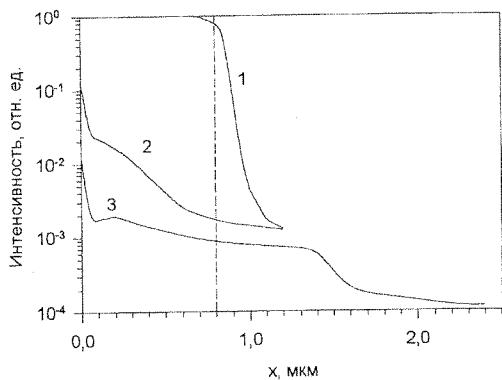


Рис. 18. Снятые методом ВИМС концентрационные профили Al в Nb: 1 - необлученный образец 0,8 мкм Al/Nb; 2 - после облучения пучком ионов углерода с плотностью тока 150 А/см²; 3 - после 5 импульсов облучения с плотностью тока 120 А/см². Пунктиром показана исходная толщина пленки.

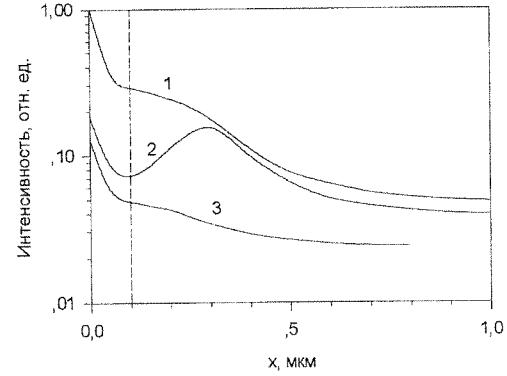


Рис. 19. Снятые методом ВИМС концентрационные профили Ag в Cu после облучения пленки толщиной 0,1 мкм (показано пунктиром) пучком ионов углерода с плотностью тока: 1 - 80 А/см²; 2 - 80 А/см², 5 импульсов; 3 - 170 А/см².

объяснен и баллистическими процессами в силу малости ($\leq 10^{14}$ ионов/см²) флюенса импульсного пучка.

Эффект высокоинтенсивного массопереноса при мощном импульсном ионном облучении был зафиксирован и другими авторами, например, в [51]. Он наблюдался также при импульсном электронном [51, 52] и лазерном воздействиях.

Объяснение этого результата является принципиально важным моментом в изучении механизмов миграции атомов в конденсированной фазе.

3.1. Диффузионные процессы

Импульсное ионное воздействие порождает в образце мощные неравновесные поля температур и давлений, градиенты которых, в соответствии с нашими расчетами, достигают 10⁹ К/м и 10¹⁴ Па/м. В этих условиях могут стать значительными обычно пренебрегаемые термо- и бародиффузионные потоки

$$j_T = -ND \frac{k_T}{T} \nabla T, \quad j_P = -ND \frac{k_P}{T} \nabla P. \quad (26)$$

Здесь N - ядерная плотность вещества, D - коэффициент диффузии, T - температура, P - давление, k_T и k_P - соответственно термо- и бародиффузионные отношения. Теории термо- и бародиффузии [54; 55, стр. 140] дают для k_T и k_P следующие приближенные выражения:

$$k_T \approx \frac{\Omega^* C}{kT}, \quad k_P \approx \frac{\Delta V}{kT} PC, \quad (27)$$

где Ω^* - теплота переноса диффузанта, C - его концентрация, ΔV - разность атомных объемов диффузанта и матрицы, k - постоянная Больцмана. Оценки показывают, что в условиях облучения наносекундным ионным пучком потоки $j_C = -ND\nabla C$, j_T и j_P соотносятся как 1:1:10⁻².

В связи с этим нами было проведено более детальное изучение диффузии под действием градиента температуры, для чего термодиффузионное уравнение

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \nabla \left[D \left(\nabla C + \frac{k_T}{T} \nabla T \right) \right] \quad (28)$$

решалось совместно с задачей Стефана. Расчеты проводились для условий экспериментов до момента полного затвердевания образца. Результаты для одного из режимов облучения приведены на рис. 20, 21. Видно, что учет термодиффузии дает существенную добавку в общий диффузионный поток и позволяет сблизить расчетный и экспериментальный профили. Однако полного их совпадения не удалось достичь, зарегистрированный в экспериментах перенос был более интенсивным.

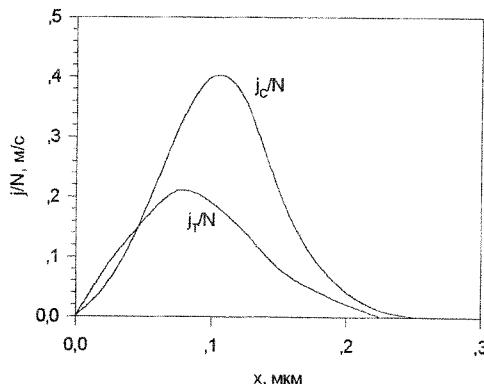


Рис. 20. Диффузионный j_c и термодиффузионный j_t потоки вещества при облучении системы 0,1 мкм Ag/Cu ионами углерода с энергией 0,5 МэВ и плотностью тока 80 А/см² в момент времени $t=80$ нс.

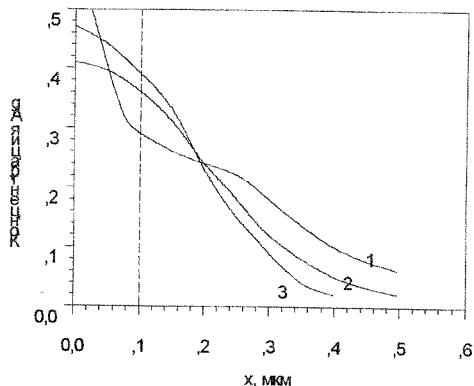


Рис. 21. Профиль концентрации Ag в Cu в момент полного затвердевания ($t=50$ нс): 1 - эксперимент; 2 - расчет с $Q^*=5$ эВ; 3 - расчет без учета термодиффузионного потока.

3.2. Изменение энергии активации диффузии в волнах термомеханических напряжений

Как было показано выше, воздействие мощных наносекундных пучков порождает в твердом теле интенсивные термомеханические процессы, в результате которых вещество в течение микро- и даже миллисекунд имеет плотность ρ , отличающуюся от нормальной ρ_0 на единицы-десятки процентов. Изменение плотности должно повлечь за собой изменение диффузионных характеристик материала. В настоящей работе предпринято теоретическое изучение поведения коэффициента диффузии жидкого металла в условиях неравновесной плотности.

Для этого было выполнено молекулярно-динамическое моделирование диффузионных процессов на примере самодиффузии алюминия.

Использовался потенциал межатомного взаимодействия, полученный на основе метода псевдо-потенциала с использованием форм-факторов Хейне-Абаренкова-Анималу. Расчетный кристаллит имел форму куба и состоял из $N=2048$ подвижных атомов. На всех гранях задавались периодические граничные условия. Температурная зависимость постоянной ГЦК решетки алюминия в диапазоне температур 1000—2500 К определялась выражением

$$a(T) = a(T_m) \sqrt[3]{1 + \beta(T - T_m)}, \quad (29)$$

где $T_m=934$ К - температура плавления, $\beta=0,113 \cdot 10^{-3}$ 1/К - коэффициент объемного расширения. Величина постоянной решетки при температуре плавления $a(T_m)$ для используемого потенциала была рассчитана с использованием метода искусственного демпфирования и составила 0,42456 нм, что соответствует плотности вещества $\rho_0(T_m)=2,362$ г/см³. Для задания температуры T каждому атому приписывалась скорость в соответствии с распределением Максвелла. Затем решались уравнения движения атомов до момента установления статистического равновесия между потенциальной и кинетической энергиями системы ($\sim 10^{-13}$ с). Только после этого начинался расчет диффузионных характеристик.

В процессе моделирования рассчитывалось среднеквадратичное смещение атомов

$$\langle R^2 \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (R_i(t) - R_0(0))^2, \quad (30)$$

где $R_i(t)$ - положение i -го атома в момент времени t . Приблизительно через 10^{-12} с зависимость $\langle R^2(t) \rangle$ становится линейной, что позволяет вычислить коэффициент диффузии D по формуле

$$D = \langle R^2 \rangle / 6t. \quad (31)$$

Для проверки модели вычисления производились сначала для равновесной плотности жидкого алюминия. Полученные значения коэффициента самодиффузии жидкого алюминия (см. рис. 22 и таб-

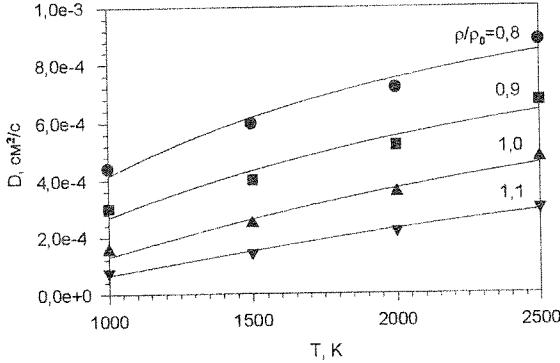


Таблица 1

| ρ/ρ_0 | $D_0, \text{см}^2/\text{с}$ | $E_a, \text{эВ}$ |
|---------------|-----------------------------|------------------|
| 0,8 | $1,36 \cdot 10^{-3}$ | 0,102 |
| 0,9 | $1,13 \cdot 10^{-3}$ | 0,125 |
| 1,0 | $1,05 \cdot 10^{-3}$ | 0,180 |
| 1,1 | $7,76 \cdot 10^{-4}$ | 0,213 |

Рис. 22. Зависимости коэффициента самодиффузии жидкого алюминия от температуры и плотности. Точки - расчет методом молекуларной динамики, сплошная линия - аппроксимация выражением Аррениуса.

лицу 1) хорошо соответствуют экспериментальным данным [56], что свидетельствует о корректности разработанной модели.

Результаты вычисления коэффициента диффузии при различных температурах и плотностях алюминия приведены на рис. 22. Звездочками обозначены точки, полученные в результате молекуларно-динамического моделирования, сплошными линиями - полученная с использованием метода наименьших квадратов аппроксимация выражением Аррениуса

$$D(T) = D_0 \exp\left(-\frac{E_a}{kT}\right), \quad (32)$$

где D_0 - предэкспоненциальный множитель, E_a - энергия активации диффузии (см. таблицу 1).

Таким образом, факты свидетельствуют, что уменьшение плотности облучаемого образца в результате термомеханических процессов приводит к существенному усилению диффузионной подвижности атомов, главным образом за счет уменьшения энергии активации диффузии. Поскольку вещество на поверхности в течение микро- и миллисекунд находится в разреженном состоянии [24], рассмотренный механизм может дать ощутимый вклад в усиление диффузионного и термодиффузионного потоков, пропорциональных значению коэффициента диффузии.

3.3. Сегрегация во фронте затвердевания

Известно [57, 58], что при направленной кристаллизации жидкого раствора имеет место перераспределение концентрационного профиля его компонентов. Соотношение концентраций некоторой примеси в твердой (C_s) и жидкой (C_L) фазах вблизи фронта затвердевания $z_m(t)$ (рис. 23, 24) определяется выражением

$$k_c = \frac{C_s(z_m)}{C_L(z_m)}. \quad (33)$$

Величина k_c , называемая коэффициентом сегрегации, численно равна отношению пределов растворимости примеси в твердом и жидкоком состоянии.

Выражение (33) можно использовать в качестве граничного условия при решении уравнения переноса вещества, например, уравнения диффузии, однако целесообразно сначала оценить влияние механизма сегрегации во фронте затвердевания на концентрационный профиль при облучении металлических образцов мощными импульсными пучками заряженных частиц.

Пусть, для определенности, $k_c < 1$. Поскольку твердая фаза, образующаяся за фронтом, обеднена примесью, расплав будет обогащаться ею, особенно в области, близкой к границе раздела фаз. Окончательный профиль распределения концентрации $C_s(x)$ определится кинетикой перемешивания раствора в результате диффузионных или гидродинамических процессов, точнее, соотношением между интенсивностью перемешивания и скоростью фронта затвердевания.

Рассмотрим два предельных случая. Для простоты считаем, что в момент достижения максимальной глубины проплавления z_{max} концентрация примеси в расплаве постоянна и равна C_0 . Фронт начинает двигаться к поверхности.

1. Скорость движения фронта мала по сравнению с интенсивностью перемешивания, распределение примеси в расплаве остается равномерным в течение всего времени затвердевания (рис. 23). В точке z_{max} концентрация примеси в твердой фазе составит $C_s(z_{max})=k_c C_0$. По мере продвижения

фронта расплава будет обогащаться примесью, и C_L , а, следовательно, и $C_S = k_c C_L$, будут непрерывно расти.

2. Фронт движется быстро, и отклонение концентрации примеси в жидкой фазе от C_0 наблюдается лишь в тонком прилегающем к границе раздела фаз слое толщиной δ_c (рис. 24). Как и в предыдущем случае, сначала $C_S(z_{max}) = k_c C_0$. Поскольку перемешивание отсутствует, концентрация примеси в пограничном слое расплава начнет быстро повышаться и скоро (в точке $z_m \approx z_{max} - \delta_c$) достигнет величины $C_L = C_0/k_c$, а $C_S(z_m)$ сравняется с C_0 . После этого процесс стабилизируется, и почти до самой поверхности сегрегации примеси не происходит. Лишь при $z_m < \delta_c$, когда объем зоны перемешивания сравняется с объемом всего расплава, мы снова будем наблюдать рост C_L и C_S .

Таким образом, на результирующем профиле $C_S(x)$ будут наблюдаться отклонения от C_0 лишь в точке максимального проплавления и у поверхности. Ширина этих флюктуаций примерно равна δ_c , а направление (минимум или максимум) зависит от величины k_c . Если $k_c < 1$, мы увидим пик на поверхности и провал в глубине, если

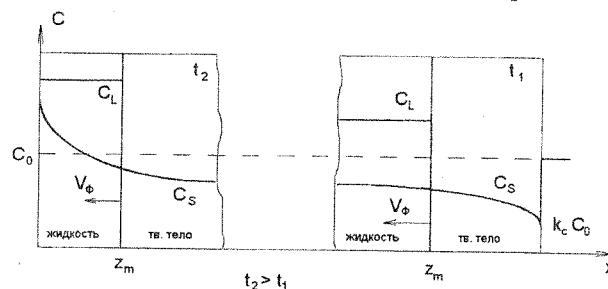


Рис. 23. Кинетика сегрегации во фронте затвердевания при полном перемешивании расплава.

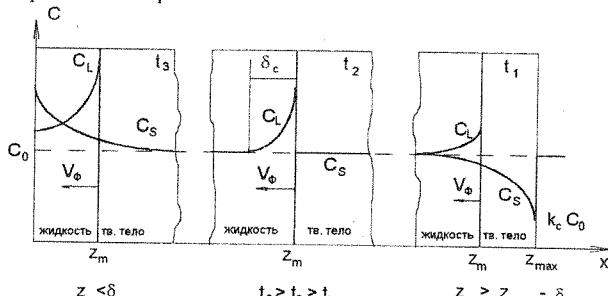


Рис. 24. Кинетика сегрегации во фронте затвердевания при слабом перемешивании расплава.

$k_c > 1$ - наоборот. Рассмотренный выше случай полного перемешивания, если положить ширину зоны перемешивания δ_c равной z_m .

Если начальное распределение примеси в расплаве неравномерно, то в случае слабого перемешивания сегрегация также не приведет к существенному изменению концентрационного профиля. Смещения профиля концентрации по координате не превысят δ_c .

Оценим значение δ_c при кристаллизации поверхностного слоя образцов, облученных мощными импульсными пучками ионов или электронов. Расчеты температурных полей в мишениях ([3,23,24], см. также выше) показали, что для облучения железной мишени пучком углерода с энергией 0,5 МэВ средняя скорость затвердевания V_ϕ составляет 5 м/с, а электронами с энергией 1 МэВ - на порядок ниже, 0,5 м/с. Примем, что перемешивание примеси в расплаве осуществляется диффузионным механизмом с коэффициентом диффузии D , равным (в соответствии с измеренным в описанных выше экспериментах) 10^3 см²/с. В системе координат y , связанной с движущейся границей фаз, уравнение диффузии запишется следующим образом:

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} - V_\phi \frac{\partial}{\partial y} \right) C_L(y) = D \frac{\partial^2 C_L(y)}{\partial y^2}. \quad (34)$$

В стационарном режиме приходим к обыкновенному дифференциальному уравнению

$$D \frac{d^2 C_L(y)}{dy^2} - V_\phi \frac{dC_L(y)}{dy} = 0, \quad (35)$$

имеющему при граничных условиях $C_L(0) = C_0/k_c$, $C_L(\infty) = C_0$ решение

$$C_L(y) = C_0 + \left(\frac{C_0}{k_c} - C_0 \right) \exp \left(- \frac{V_\phi}{D} y \right). \quad (36)$$

Отсюда характерная ширина диффузионного профиля

$$\delta_c \approx \frac{D}{V_\phi}. \quad (37)$$

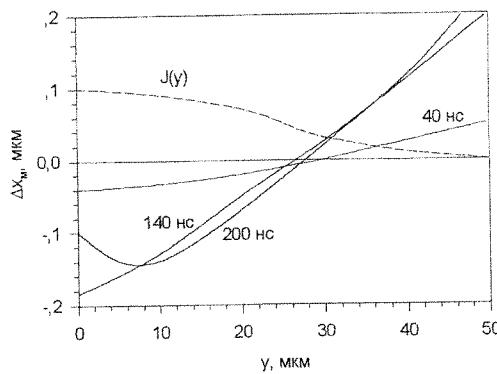


Рис. 25. Смещения маркеров на глубине $x_0=10$ мкм в железном образце толщиной 1 мм, облучаемом электронами с $E=0,9$ МэВ, $J=10$ кА/см², в различные моменты времени. Пунктиром показано распределение мощности энерговыделения по поверхности образца ($\sigma_J=30$ мкм, $d_J=100$ мкм).

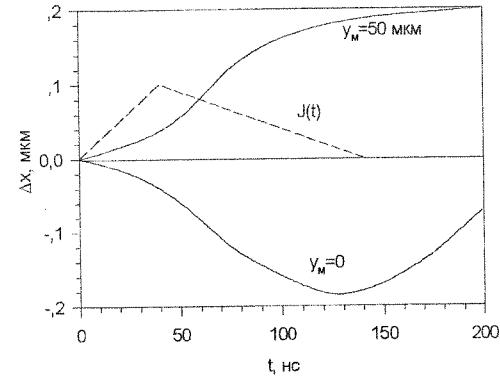


Рис. 26. Эволюция смещений маркеров для того же режима облучения. Пунктиром показана форма импульса тока электронов.

Подставляя значения, получаем, что при ионном облучении $\delta_c \approx 0,01$ мкм, а при электронном - 0,1 мкм.

Подтверждением того, что данный механизм сегрегации действительно имеет место при обработке тонкопленочных металлических мицелей мощным импульсным ионным пучком, может служить наличие на ряде экспериментально полученных концентрационных профилей (рис. 18, 19) резких максимумов у поверхности. Ширина таких выбросов близка к рассчитанной нами ширине зоны перемешивания δ_c . Однако на глубине влияние сегрегации на профиль диффузанта при ионном облучении незначительно.

Похожие пики наблюдались и при наносекундном лазерном облучении, например, [59].

Таким образом, в случае малой длительности облучения (десятки-сотни наносекунд) и небольшой глубины прогрева образца, когда скорость процесса рекристаллизации велика, сегрегация не приводит к заметному перераспределению примеси в образце. Эффект сегрегации может несколько изменить форму концентрационного профиля примеси, но не способен (по крайней мере при однократном облучении) объяснить проникновение примеси вглубь. Это явление более существенно для электронного облучения, так как здесь образец прогревается достаточно глубоко и скорость фронта на порядок меньше, чем в случае использования лазерного или ионного пучков.

3.4. Гидродинамическое перемешивание

Еще одной причиной усиления миграции атомов под действием мощных импульсных пучков заряженных частиц может быть перемешивание вещества в расплавленном поверхностном слое в гидродинамическом режиме. Причиной такого перемешивания может стать тонкая структура мощности энерговыделения вдоль поверхности образца в результате либо филаментации пучка, на существование которой указывается в ряде публикаций [60, 61], либо преимущественного протекания тока по пикам шероховатости образца. В обоих случаях характерный размер неоднородностей энерговыделения d_J составляет десятки микрометров. На небольшом участке поверхности можно пренебречь макронеоднородностью плотности тока пучка и представить распределение плотности тока вдоль поверхности образца в виде периодической функции, например

$$J(y, t) = J(t) \left(1 + \cos \left(\frac{2\pi y}{d_J} \right) \right), \quad (38)$$

где $J(t)$ - средняя по поверхности плотность тока.

Для исследования этого процесса нами была численно решена двумерная система уравнений сплошной среды для случая облучения железной мишени мощным электронным пучком с $E_0 = 0,9$ МэВ, J в максимуме импульса 10 кА/см², $\tau = 70$ нс (на грани испарения). Была разработана схема решения уравнений в эйлеровом виде, позволяющая отслеживать движущуюся поверхность конденсирующейся фазы. Использовались уравнения состояния вещества [62]. В приповерхностный слой образца были введены точечные маркеры, имитирующие частицы пленки. Отслеживались рассчитываемые

через массовые единицы (для устранения эффектов изменения плотности) смещения маркеров по глубине

$$\Delta x_m(t) = \frac{1}{\rho_0} \int_{x_s(y_m, t)}^{x_m(t)} \rho(x, y_m, t) dx - x_m(0), \quad (39)$$

где x_m, y_m - координаты маркера, x_s - координата поверхности, ρ - плотность и ρ_0 - исходная плотность образца.

Были получены следующие результаты. В образце развивались давления до 10^9 Па. Скорости вещества в направлении x достигали 10^2 - 10^3 м/с, в направлении y - 0,1-1 м/с. Было обнаружено, что в приповерхностных слоях толщиной в десятки микрометров величина смещений маркеров пропорциональна глубине их залегания x_m и локальному градиенту плотности тока $dJ/dy \sim d_J^{-1}$. На рис. 25, 26 приведена эволюция смещений маркеров, расположенных на исходной глубине $x_m(0) = 10$ мкм для случая $d_J = 100$ мкм. Видно, что к моменту $t = 200$ нс смещения составили десятые доли микрометров. Несмотря на то, что смещение маркера с $y_m = 0$ при $t > 150$ нс имеет тенденцию к уменьшению из-за разгрузки энергетически насыщенной области вблизи поверхности, движение маркеров не является простым колебательным процессом. Анализ поля скоростей в зоне вычислений $0 \leq x \leq 1$ мм, $0 \leq y \leq d_J/2$ показал наличие неценулевого момента импульса. Естественно предположить, что данное вихревое движение за время существования на поверхности образца жидкой фазы и затухания волн давления (единицы миллисекунд) способно привести к существенному перемешиванию поверхностных слоев. К сожалению, довести процесс моделирования до этого момента не позволяют неустойчивости вычислительного процесса, присущие эйлеровым схемам решения уравнений сплошной среды. Применение же лагранжевых схем для расчета перемешивания жидкости неприемлемо.

4. Заключение

Выполненная работа позволяет сделать некоторые весьма важные выводы.

При моделировании процессов диссипации энергии ИПЗЧ умеренной интенсивности нет нужды решать сложную систему уравнений сплошной среды. Корректные результаты эволюции температурных полей можно получить из решения уравнения теплопроводности с учетом фазовых переходов, распространение термомеханических напряжений моделируется уравнением термоупругости. Так как испарение является поверхностным, оно может быть описано двухфазной моделью.

При воздействии высокointенсивных пучков первостепенную роль играют процессы, связанные с возмущением плотности. Испарение, как правило, приобретает объемный характер. Поэтому диссиацию энергии в твердом теле необходимо рассматривать в рамках теории движения сплошной среды совместно с уравнениями состояния. Описанные в данной работе методы позволяют получать корректные и устойчивые результаты в широком диапазоне интенсивностей ИПЗЧ.

С помощью разработанных моделей были получены не только закономерности протекания тепловых, термомеханических и эрозионных процессов в твердых телах в наносекундном режиме их облучения, но и найдены оптимальные параметры облучения в некоторых радиационных технологиях модификации поверхности материалов. Например, выполнены расчеты параметров для сверхбыстрой закалки и аморфизации металлов [3, 23-24]. Показано, что наиболее эффективными для этих целей являются ионные пучки наносекундной длительности мощностью не выше 10^8 Вт/см². Была предложена технология микрорельефной обработки диэлектриков, в частности, кварца [46]. Выявлено, что наиболее подходит для этой цели протонные пучки с энергией до 2 МэВ и длительностью импульса в десятки наносекунд. Необходимая мощность излучения зависит от многих параметров и должна быть точно рассчитана для каждого конкретного случая. Для наносекундных электронных пучков умеренной интенсивности найдено применение в технологиях, связанных с диффузионным внедрением атомов покрытия в подложку [47], которые весьма перспективны в электронике (для создания примесных слоев) и машиностроении (для усиления адгезии нанесенных покрытий).

Кроме того, на основе моделей диссипации энергии были получены изложенные здесь результаты, объясняющие аномально высокий перенос атомов в образцах, облучаемых ИПЗЧ. Определены основные каналы интенсивного переноса атомов: диффузия и термодиффузия в расплавленном поверхностном слое образца, находящемся в деформированном состоянии вследствие термомеханических нагрузок, а также перемешивание этого слоя в гидродинамическом режиме. Некоторое влияние на форму концентрационного профиля примеси оказывает явление сегрегации компонентов расплава при его направленной кристаллизации. Заметим, что динамика перечисленных процессов определяет-

ся не столько типом частиц излучения, сколько создаваемым ими пространственно-временным распределением мощности энерговыделения в твердом теле.

Однако следует признать, что в силу высокой сложности явления интенсивного переноса атомов в твердом теле при воздействии ИПЗЧ исследованы гораздо слабее процессов диссипации энергии пучка. Для получения надежных количественных математических моделей переноса атомов требуются дальнейшие длительные исследования.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Блатт Ф. Теория подвижности электронов в твердых телах. - М.: Физматгиз, 1963, 244 с.
2. Лыков А. В. Тепломассообмен. Справочник. - М: Энергия, 1978, 479 с.
3. Асаинов О.Х., Кривобоков В.П., Лигачев А.Е., Сапульская Г.А. Термовые процессы при обработке поверхности металлов сильноточными наносекундными пучками ионов. // Физика и химия обработки материалов.- 1987.- №2.- с.53-59.
4. Анисимов С.И., Имас Я.А., Романов Г.С., Ходыко Ю.В. Действие излучения большой мощности на металлы. - М.: Наука, 1970, 272 с.
5. Арутюнян Р.В., Баранов В.Ю., Большов Л.А., Малюта Д.Д., Себрант А.Ю. Воздействие лазерного излучения на материалы. - М.: Наука, 1989, 368 с.
6. Рэди Дж. Лазерная обработка материалов. - М.: Машиностроение, 1975, 321 с.
7. Мажукин В.И., Самохин А.А. Математическое моделирование фазовых переходов и образования плазмы под действием лазерного излучения на поглощающие конденсированные среды. // В сб.: Математическое моделирование: нелинейные дифференциальные уравнения математической физики.- 1988.- с. 191-244.
8. Бергельсон В.И., Голубь А.П., Немчинов И.В., Попов С.П. Образование плазмы в слое паров, возникших под действием ОКГ на твердое тело. // Квантовая электроника.- 1973.- 4(16).- с.20-27.
9. Белоцерковский О.М., Давыдов Ю.М., Кутасов С.А. Численное моделирование взаимодействия лазерного излучения с веществом методом крупных частиц. - М.: вычислительный центр АН СССР, 1984, 53 с.
10. Афанасьев Ю.В., Крохин О.Н. Высокотемпературные и плазменные явления, возникающие при взаимодействии мощного лазерного излучения с веществом. - В кн.: Физика высоких плотностей энергий. Под ред. Кальдиролы П., Кнопфеля Г., М.: Мир, 1974, с. 311-352.
11. Рыкалин Н.Н., Углов А.А. Процессы объемного парообразования при воздействии луча лазера на металлы. // Теплофизика высоких температур.- 1971.- т.9.- №3.- с.575-581.
12. Батанов В.А., Бункин Ф.В., Прохоров А.М., Федоров В.Б. Испарение металлических мишеней мощным оптическим излучением. // ЖЭТФ.- 1972.- т.63.- вып. 2(8).- с. 586-608.
13. Мажукин В.И., Углов А.А., Четверушкин Б.Н. Низкотемпературная лазерная плазма вблизи металлических поверхностей в газах высокого давления. // Квантовая электроника.- 1983.- т.10.- вып. 4.- с. 679-701.
14. Давыдов Ю.М., Кутасов С.А., Переходов Г.В., Рагозин Е.Н., Чирков В.А. Исследование взаимодействия лазерного излучения с плоскими сплошными преградами из различных материалов. // Физика плазмы.- 1986.- т.12(1).- с.23-26.
15. Галиев Ш.У., Жураховский С.В., Титаренко С.И. Математическое моделирование воздействия термооптического импульса на материалы. // АН УССР.- Институт проблем прочности.- Препринт.- Киев.- 1986.- 39 с.
16. Анисимов С.И., Кравченко В.А., Сагдеев Р.З. О лазерном моделировании высокоскоростного удара. // Письма в ЖТФ.- 1985.- 11.- №21.- с. 1293-1296.
17. Мажукин В.И., Пестрякова Г.А. Математическое моделирование процессов поверхностного испарения лазерным излучением. // Доклад АН СССР.- 1984.- 278.- №4.- с. 843-848.
18. Мажукин В.И., Пестрякова Г.А. Алгоритм численного решения задачи поверхностного испарения вещества лазерным излучением. // Журнал вычислительной математики и математической физики.- 1985.- т. 25.- №11.- с.1697-1709.
19. Мажукин В.И., Пестрякова Г.А. Численный анализ влияния эрозионной лазерной плазмы на процесс поверхностного испарения. // Известия АН СССР.- серия физическая.- 1985.- т.49.- №4.- с. 783-790.
20. Зубов В.И., Кривцов В.М., Наумова И.Н., Шмыглевский Ю.Д. О численном сравнении различных моделей испарения металла. // Журнал вычислительной математики и математической физики.- 1986.- т.26.- №11.- с.1740-1743.
21. Найт Ч. Дж. Нестационарное испарение в переходном режиме с поверхности в вакуум. // Аэрокосмическая техника.- 1983.- №2.- с.83-89.
22. Галиев Ш.У., Жураховский С.В., Титаренко С.И., Иващенко К.Б. Численное исследование влияния поверхностного испарения на формирование волн напряжений. // Проблемы прочности.- 1988.- №11.- с.94-100.
23. Кривобоков В.П., Пащенко О.В., Сапульская Г.А. Компьютерное моделирование эрозии и термо-механических процессов в твердом теле, облучаемом мощными наносекундными пучками заряженных частиц // Известия ВУЗов. Физика.- 1993.- №12.- с. 37-41.
24. Блейхер Г.А., Кривобоков В.П. Пащенко О.В. Диссипация энергии мощных импульсных пучков заряженных частиц в твердом теле. Термовые процессы. // Известия ВУЗов.- Физика.- 1997.- № 2.- с. 67-89.
25. Боли Б., Уэйнер Дж. Теория температурных напряжений. - М.: Мир, 1964.
26. Зельдович Я.Б., Райзер Ю.П. Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений. - М.: Наука, 1968, 686 с.
27. Аккерман А.Ф., Бушман А.В., Демидов Б.А., Ивкин М.В., Ни А.Л., Петров В.А., Рудаков Л.И., Фортов В.Е. Исследование динамики ударных волн, возбуждаемых сильноточным релятивистским электронным пучком в алюминиевых мишенях. // ЖЭТФ.- 1985.- т.89.- вып. 3(9).- с. 852-860.
28. Аккерман А.Ф., Демидов Б.А., Ни А.Л., Рудаков Л.И., Фортов В.Е. Применение сильноточных релятивистских электронных пучков в динамической физике высоких температур и давлений. // Препринт ОИХФ.- Черноголовка.- 1986.- 60 с.
29. Лешкевич С.Л., Скворцов В.А., Фортов В.Е. Импульсное разрушение металлической пластины протонным пучком. // Письма в ЖТФ.- 1989.- т.15.- вып. 22.- с. 39-43.
30. Годунов С.К., Забродин А.В., Иванов М.Я. Численное решение многомерных задач газовой динамики. - М.: Наука, 1976
31. Белоцерковский О.М., Давыдов Ю.М. Метод "крупных частиц" для задач газовой динамики. // в сб.: Численные методы механики сплошной среды. - Новосибирск.- 1970.- т.1.- №3.- с. 3-23.

32. Вальчук В.В., Халиков С.В., Яловец А.П. Моделирование воздействия интенсивных потоков заряженных частиц на слоистые мишени // Математическое моделирование.- 1992.- т.4.- №10.- с.111-123.
33. Колгатин С.Н.. Хачатурянц А.В. Интерполяционные уравнения состояния металлов. // Термофизика высоких температур.- 1982.- т.20.- №3.- с.447-451.
34. Кривобоков В.П., Пащенко О.В., Сапульская Г.А. Исследование механизмов интенсивного переноса атомов в веществе, облучаемом мощными наносекундными пучками заряженных частиц // ЖТФ.- 1994.- т.64.- №5.- с.37-42.
35. Диденко А.Н., Асаинов О.Х., Кривобоков В.П., Лигачев А.Е., Сапульская Г.А. Особенности взаимодействия сильноточных наносекундных ионных пучков с поверхностью металлов. - В кн. "Физика электронных и атомных столкновений" (сборник научных трудов), Л.: ФТИ им. Иоффе, 1987, с. 188-198.
36. Asainov O.Kh., Krivobokov V.P., Sapul'skaya G.A. Formation of amorphous phase under the treatment of metal surface by high-current pulse ion beam. // Proc. Second Int. Conf. on Electron Beam Technologies, May 31 - June 4.- 1988.- Varna.- Bulgaria.- p. 740 - 744.
37. Итин В.И., Коваль Н.Н., Месяц Г.А., Ротштейн В.П., Чухланцева И.С. Поверхностное упрочнение сталей при воздействии интенсивного электронного пучка. // Физика и химия обработки материалов.- 1984.- №6.- с. 119-122.
38. Веригин А.А., Крючков Ю.Ю., Погребняк А.Д., Ремнев Г.Е., Рузимов Ш.М. Модификация структуры приповерхностного слоя вольфрама под действием мощного ионного пучка // Поверхность. Физика, химия, механика.- 1988.- №9.- с. 106-111.
39. Pogrebnyak A.D., Remnev G.E., Kukakin I.B., Ligachev A.E. Structural, physical and chemical changes induced in metals and alloys exposed to high power ion beams // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research.- 1989.- B36.- p. 286-305.
40. Диденко А.Н., Лигачев А.Е., Куракин И.Б. Воздействие пучков заряженных частиц на поверхность металлов и сплавов. - М.: Энергоатомиздат, 1987, 184 с.
41. Акерман А.Ф., Бушман А.В., Демидов Б.А., Завгородний С.Ф., Ивкин М.В., Ни А.Л., Петров В.А., Рудаков Л.И., Фортов В.Е. Влияние размера зоны поглощения энергии на характеристики ударных волн, возбуждаемых сильноточным электронным пучком в металлических мишенях // ЖЭТФ.- 1986.- т. 91.- вып. 5(11).- с. 1762-1765.
42. Brice D.K. Heavy particle range and energy deposition into solids // J. Nucl. Mat. - 1974.- v.53.- N1.- p. 213-219.
43. Lindhard J., Scharff M., Schiott H.E. Range concepts and heavy ion range. // Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. - Sels K.- 1963.- v.33.- N14.- p. 1-42.
44. Немец О.Ф., Гофман Ю.В. Справочник по ядерной физике. - Киев, "Наукова думка", 1975, 416 с.
45. Аброян И.А., Андронов А.Н., Титов А.И. Физические основы электронной и ионной технологий. - М.: "Высшая школа", 1984, 320 с.
46. Кривобоков В.П., Пащенко О.В., Сапульская Г.А., Степанов Б.П. Эрозия кварца под действием мощных наносекундных ионных пучков. // Физика и химия обработки материалов.- 1991.- №6.- с. 25-32.
47. Асаинов О.Х., Кривобоков В.П., Сапульская Г.А. Способ имплантации. Авторское свидетельство № 1549404, зарегистрировано 8.11.89.
48. Krivobokov V.P., Paschenko O.V. Features of diffusion processes in metals under the effect of nanosecond high-current ion beams. // In: "Second International Conference of Electron Beam Technologies. - May 31 - June 4, 1988.- Varna.- Bulgaria.- p. 796 - 801.
49. Валеев Т.И., Кривобоков В.П., Пащенко О.В. Механизмы массопереноса в твердом теле, облучаемом мощным импульсным ионным пучком. // Тезисы докладов Всесоюзной конференции "Ионно-лучевая модификация материалов". - Черноголовка.- 1987.- с.74.
50. Кривобоков В.П., Пащенко О.В., Сапульская Г.А. Исследование механизмов интенсивного переноса атомов в веществе, облучаемом мощными наносекундными пучками заряженных частиц. // Журнал технической физики.- 1994.- т. 64.- вып. 5.- с. 37-42.
51. Pogrebnyak A.D. Metastable states and structural phase changes in metals and alloys exposed to high power pulsed ion beams. // Phys.Stat.Sol.- 1990.- v.117a.- 17.- p.17-51.
52. Barbier D., Chemisky G., Grob J.J., Laugier A., Siffert P., Stuck R. Pulsed electron beam annealing of As and B implanted silicon. // Journal de physique.- 1983.- v.44.- 10.- p.209-214.
53. Bataglin G., Carnera A., Donna dalle Rose L.F., Mazzoldi P., d'Anna E., Leggiery G., Luches A. Pulsed electron beam irradiation of nickel single crystals with silver overlayers. // Thin Solid Films.- 1986.- v.145.- p.147-160.
54. Фогельсон Р.Л. Термодиффузия. // Деп. в ВИНИТИ рег.№ 1548-83.- Воронеж.- 1983.- 29 с.
55. Бокштейн Б.С. Диффузия в металлах. М.: "Металлургия", 1978, 248 с.
56. Вилсон Д.Р. Структура жидкых металлов и сплавов. - М.: "Металлургия", 1972, 248 с.
57. Пфанин В.Дж. Зонная плавка. М.: "Мир", 1970, 366 с.
58. Зам П.Р., Штурм И.С. Затвердевание. - В кн. "Космическое материаловедение" под ред. Фойербаха Б., Хамахера Г., Наумана Р.М.: "Мир", 1989, с.143-161.
59. Miotello A., Dona dalle Rose L.F. A simple mathematical and physical analysis of non-equilibrium segregation effects in a freezing liquid aluminium layer after a nanosecond pulse laser irradiation. // Rad. Eff.- 1981.- v.55.- 235-242.
60. Диденко А.Н., Исаков И.Ф., Лайскер И.А., Лигачев А.Е., Ремнев Г.Е., Тимошиников Ю.А. Формирование рельефа поверхности сплава Ni₃Fe под действием мощного импульсного пучка ионов. // Письма в ЖТФ. 1987.- т.13.- вып.9.- с.526-531.
61. Гордеев А.В., Рудаков Л.И. Электромагнитная неустойчивость потока заряженных частиц в плотной плазме.// ЖЭТФ.- 1982.- т.83.- вып.6(12).- с.2048-2055.
62. Жуков А.В. Термодинамически полные уравнения α - ϵ - γ -фаз железа. // Журнал прикладной математики и технической физики.- 1986.- N 5.- с.112-114.