

Численное моделирование термоупругих эффектов в материалах при их облучении импульсными пучками ионов

И.В. Амирханов¹, А.Ю. Дидык², Д.З. Музафаров¹, И.В. Пузынин¹, Т.П. Пузынина¹,
Н.Р. Саркар¹, И. Сархадов¹, З.А. Шарипов¹

¹E-mail: ibrohim@jinr.ru, Лаборатория информационных технологий, ОИЯИ, Дубна; ²Лаборатория ядерных реакций, ОИЯИ, Дубна

Введение

При прохождении тяжелой заряженной частицы через вещество вблизи траектории возникают локальные перегревы, приводящие к генерации термоупругих напряжений [1], которые могут превышать прочность материала. Изменение температуры материала происходит не только за счет подвода тепла от внешних источников, но также и за счет самого процесса деформации. При деформации возникают упругие и тепловые волны. Эти явления обычно исследуются в рамках теории термоупругости [2]. В модели термического пика тепловые эффекты описываются системой двух связанных уравнений для температур электронного газа и кристаллической решетки T_e, T_i :

$$C_e \frac{\partial T_e}{\partial t} = \nabla(\lambda_e \nabla T_e) - g(T_e - T_i) + A_e(\vec{r}, t), \quad (1)$$

$$C_i \frac{\partial T_i}{\partial t} = \nabla(\lambda_i \nabla T_i) + g(T_e - T_i) + A_i(\vec{r}, t), \quad (2)$$

где $C_\nu, \lambda_\nu, A_\nu$; $\nu = e, i$ – соответственно теплоемкости, теплопроводности и функции источников для электронного газа и кристаллической решетки, g – константа взаимодействия электронной подсистемы с решеткой.

Постановка задачи

В работах [3, 4], численно исследована эволюция термоупругих волн, возникающих в материалах под воздействием импульсного пучка ионов. В настоящей работе приведены уравнения термоупругости в рамках модели термического пика [5]:

$$\frac{\partial T_e}{\partial t} = k_e \frac{\partial^2 T_e}{\partial z^2} - g_e(T_e - T_i) + A_e(z, t), \quad (3)$$

$$(1 + T_i \bar{p}) \frac{\partial T_i}{\partial t} = -\bar{\beta} \frac{\partial \sigma}{\partial t} T_i + k_i \frac{\partial^2 T_i}{\partial z^2} + g_i(T_e - T_i) + A_i(z, t), \quad (4)$$

$$\frac{\partial^2 \sigma}{\partial t^2} = \bar{v}_s^2 \frac{\partial^2 \sigma}{\partial z^2} - \bar{\gamma} \frac{\partial^2 T_i}{\partial t^2}, \quad (5)$$

$$\sigma(z, 0) = 0, \quad \sigma_t(z, 0) = 0, \quad T_e(z, 0) = T_i(z, 0) = 1, \quad (6)$$

$$\sigma(z, t)|_{z=0,1} = 0, \quad \frac{\partial T_e}{\partial z} \Big|_{z=0,1} = \frac{\partial T_i}{\partial z} \Big|_{z=0,1} = 0. \quad (7)$$

Функции источников $A_e(z, t), A_i(z, t)$ задаем в следующем виде:

$$A_{e,i}(z, t) = b A_{0e,i} \mu_{e,i}(z) f(t),$$

$$A_{0e,i} = \frac{E_0 j_0 \tau}{T_0 l Z e C_{e,i}},$$

где как и в работе [3] параметры пучка следующие: $\tau = 3 \cdot 10^{-7}$ с, $E_0 = 300$ кэВ, $j_0 = 10^7$ А/м², $Z = 1$. Толщина образца $l = 10^{-5}$ м, глубина проникновения ионов $R_0 = 7 \cdot 10^{-7}$ м ($z_0 = 0,07$), b – определяется из условия нормировки [5].

Функции $f(t)$ и $\mu_{e,i}(z)$ задаем феноменологически (как и в предыдущих работах [3, 4])

$$f(t) = \frac{1 - e^{-\alpha_1 t}}{1 + e^{\alpha_2(t-t_0)}}, \quad \mu_{e,i}(z) = \frac{1}{1 + e^{\alpha_3(z-z_0)}}, \quad (8)$$

где константы α_1, α_2 соответственно определяют скорости включения и выключения источника при $t = 0$ и $t = t_0$, а α_3 – скорость потери энергии ионов пучка внутри мишени.

Обсуждение численных результатов

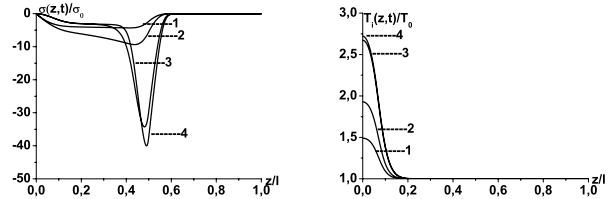


Рис.1. Профили волны термоупругого напряжения $\sigma(z, t)$ и температуры кристаллической решетки $T_i(z, t)$ в момент времени $t/\tau = 0,00335$, при разных значениях параметра α_1 (1) $\alpha_1 = 200$, 2) $\alpha_1 = 500$, 3) $\alpha_1 = 5000$, 4) $\alpha_1 = 10000$ и $\alpha_2 = 10000$, $\alpha_3 = 200$, $z_0 = 0,07$

Численным моделированием установлено, что форма волны зависит от скорости включения источника при $t = 0$ (α_1).

На рисунке 1 представлены решения задачи (3)-(8), в момент времени $t/\tau = 0,00335$, для различных значений параметра α_1 , при $g \neq 0$,

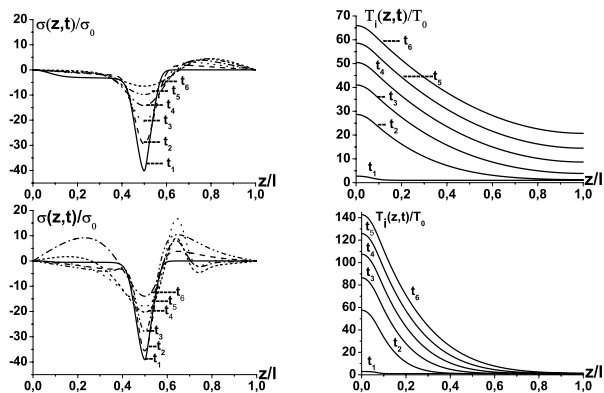


Рис. 2. Профили волны термоупругого напряжения $\sigma(z, t)$ и температуры кристаллической решетки $T_i(z, t)$ в разные моменты времени $t/\tau = t_i$, $i = 1, 2, \dots, 6$ ($t_1 = 0,00335$; $t_2 = 0,186545$; $t_3 = 0,368184$; $t_4 = 0,548357$; $t_5 = 0,727131$; $t_6 = 0,904564$) при наличии ($g > 0$) и отсутствии ($g = 0$) теплообмена между подсистемами и разных способах учета потери энергии иона

$A_e = 0$, $A_i \neq 0$. Из рисунка видно, что от скорости включения источника (т.е. от значения α_1) зависят форма волны и температура кристаллической решетки. В дальнейшем исследуется эволюция волны с параметром $\alpha_1 = 10000$. Формируемая волна движется от левой границы вправо, достигая границы, переворачивается (меняет свой знак), продолжает двигаться в обратном направлении к другой границе. Таким образом, волна будет все время крутиться против часовой стрелки. При малых временах форма волны практически не меняется.

Чтобы установить, как изменяется форма волны при больших значениях времени, но до момента выключения источника (т.е. при $t < 1$), выбираем фиксированные значения t_i ($i = 1, 2, \dots, 6$) таким образом, чтобы минимум амплитуды волны находился при $z = 0,5$ (середины образца см. рисунок 2) для трех различных способов выбора физических параметров, а именно: 1) $g \neq 0$, $A_e = 0$, $A_i \neq 0$; 2) $g \neq 0$, $A_e \neq 0$, $A_i = 0$; 3) $g = 0$, $A_e = 0$, $A_i \neq 0$.

Заметим, что выбор параметров в третий вариант эквивалентен решению системы двух уравнений термоупругости и мы получаем результаты совпадающие с результатами полученными в работе [3]. Численным моделированием, установлено, что профили напряжения и температуры кристаллической решетки в первых двух вариантах почти совпадают. Поэтому профили температуры кристаллической решетки и напряжения на рисунке 2 приведены только для первого и третьего варианта. Из рисунка 2 видно, что в первых двух вариантах температура T_i практически в два раза меньше, чем в третьем варианте. Кро-

ме этого абсолютное значение минимума термоупругой волны уменьшается и эволюция формы термоупругой волны в третьем варианте отличается от ее эволюций в первых двух вариантах.

Как уже отметили, при включении источника формируется термоупругая волна, которая движется против часовой стрелки. При выключении источника также формируется "новая" волна, которая движется по часовой стрелке. Таким образом при $t > t_0$ в образце движутся два типа волн сформированные в разные моменты времени.

Заключение

1. Под действием импульсных пучков ионов в образце формируются два типа термоупругих волн, одна из которых движется против часовой стрелки (волна включения), а другая по часовой стрелки (волна выключения). Формы этих волн зависят от скорости изменений тока в моментах включения (α_1) и выключения источника (α_2).

2. Электронный газ существенно влияет как на эволюцию термоупругих волн, так и на диффузию тепла в материалах.

3. Хотя параметр β имеет малое значение ($\beta \approx 7,36 \cdot 10^{-6}$), тем не менее, он оказывает существенное влияние на эволюцию формы термоупругих волн и пренебрегать им нельзя.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, гранты N 08-01-00800-а, N 09-01-00770-а.

Список литературы

- [1] Калиниченко А.И., Лазурик В.Т. ЖЭТФ, 1973, т.65. с.2364.
- [2] Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теория упругости, М.: Наука, 1987, Т.VII 248 с.
- [3] I.V. Amirkhanov, E.V. Zemlyanaya, I.V. Puzynin, T.P. Puzynina, I. Sarhadov. JCSME, Vol. 2, №1s-2s, 2002, p.213-224.
- [4] И.В. Амирханов, Е.В. Земляная, Т.П. Пузынина, И.В. Пузынин, Н.Р. Саркар, И. Сархадов. Журнал Поверхность, Рентгеновские, Синхротронные и нейтронные исследования. №10, 2004, с. 92-99.
- [5] И.В. Амирханов, А.Ю. Дидык, Д.З. Музафаров И.В. Пузынин, Т.П. Пузынина, Н.Р. Саркар, И.Сархадов, З.А. Шарипов. Препринт ОИЯИ P11-2009-138, Дубна, 2009.