

Исследование тепловых эффектов в металлах в рамках модели термического пика и модели кулоновского взрыва

И.В. Амирханов, И.В. Пузынин, Т.П. Пузынина, И. Сархадов
Лаборатория информационных технологий ОИЯИ, Дубна

При прохождении тяжелой заряженной частицы через вещество вблизи траектории возникают локальные перегревы, приводящие к генерации термоупругих напряжений, которые могут превышать прочность материала. Изменение температуры материала происходит не только за счет подвода тепла от внешних источников, но так же и за счет самого процесса деформации. При деформации возникают упругие и тепловые волны. Эти явления обычно исследуются в рамках теории термоупругости. Численным исследованием распространения термоупругих волн посвящены несколько работ [1-4]. В работах [1,2] численные моделирования термоупругих волн проведены в рамках традиционной модели термоупругости, которая состоит из уравнения теплопроводности и волнового уравнения для напряжения. Однако, ионы пучка значительную часть своей энергии теряют в электронном газе, а остальную в кристаллической решетке. В традиционной модели термоупругости это не учитывается, потому в работах [3,4] авторы для моделирования термоупругих эффектов использовали модифицированную модель термического пика. Однако, в этих работах после упрощающих предположений задачи решались в одномерном приближении.

В работе [5] поперечный размер пучка может принимать различные значения, в результате чего придется решать не одномерную пространственную задачу, а двумерную задачу в цилиндрических координатах с учетом угловой симметрии.

Для численного моделирования предлагаются разные численные схемы, из которых, проводя сравнительный анализ, выбирается оптимальная схема для численного моделирования. Как известно, явная разностная схема налагает на шаг интегрирования по времени жесткое ограничение, из-за которого интегрирование систем уравнений придется вести с очень мелким шагом. Тем не менее, в некоторых случаях даже для явной схемы, используя некоторые особенности системы уравнений, можно ослабить искомое условие устойчивости и шаг интегрирования взять на несколько порядков больше, что существенно экономит машинное время [6]. При ре-

шении системы уравнений термического пика методом переменных направлений, соблазнившись решать расщепленную систему уравнений одномерной прогонки взамен метода матричной прогонки, можно получить схему, в которой условие абсолютной устойчивости схемы будет нарушено. В работе [6] выбрана схема, использующая метод переменных направлений. Для решения полученной разностной схемы необходимо применять метод матричной прогонки. Схема будет абсолютно устойчивой.

В работе [7] для исследования тепловых процессов, возникающих в материалах под действием потоков заряженных частиц или одиночного иона высокой энергии, взамен модели термического пика предлагается модель кулоновского взрыва. В данной модели заложен механизм потери энергии иона. Согласно этой модели поток заряженных частиц или одиночный ион высокой энергии, двигаясь через вещество приводит в движение электронный газ и ионы кристаллической решетки. Тем самым в некоторых местах нарушается условие квазинейтральности, и в веществе возникают электромагнитные поля, которые тормозят движущие ионы. Таким образом, заряженные частицы, двигаясь в самосогласованном поле, теряют энергию на нагревание электронного газа и кристаллической решетки.

Заключение

В работе [5] проведено исследование термоупругих волн, возникающих в материалах под действием импульсных пучков ионов в рамках модифицированной модели термического пика. Решалась динамическая задача в трехмерной цилиндрической системе координат с учетом угловой симметрии. Исследована зависимость формы волны от способа действия пучка.

В работе [6] в рамках модифицированной модели термического пика проведено численное моделирование тепловых процессов, возникающих в материалах под действием импульсных пучков ионов. Модификация модели термического пика произведена путем учета фазовых переходов типов плавления, затвердевания и испарения материала образца. При численном моделировании особое внимание обращено на выбор численной

схемы. Проведен сравнительный анализ нескольких схем. Из них выбрана оптимальная схема, которая абсолютно устойчива и удобна при проведении численных экспериментов. Численное моделирование позволяет получить динамику профили температуры кристаллической решетки и ее динамику в любой точке образца, а также следить за динамикой размера и формы области проплава и кратера возникающие из-за фазовых переходов.

В работе [7] для описания тепловых процессов, возникающих в материалах под действием импульсных пучков заряженных частиц или одиночного иона, взамен модели термического пика предлагается модель кулоновского взрыва. Согласно этой модели изучаемые тепловые процессы описываются уравнениями переноса массы, импульса и энергии для электронного газа и кристаллической решетки, дополненными уравнениями состояния для этих сред и уравнениями Максвелла для электромагнитных полей, возникающих из-за нарушения условия квазинейтральности заряда внутри материала. Решая численно искомую самосогласованную систему уравнений, определяем динамику температур электронного газа и кристаллической решетки, а также динамику энергии иона.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, гранты 12-01- 00396-а, 11-01-00278-а.

Список литературы

- [1] Amirkhanov I. V., Zemlyanaya E. V., Puzynin I. V. et al. Numerical Simulation of the Thermoelastic Effects in Metals Irradiated by Pulsed Ion Beam. // JCSME.2002. Vol. 2, No 1s-2s. Pp. 213-224.
- [2] Амирханов И. В., Земляная Е. В., Пузынин И. В. и др. Численное моделирование влияния вязкости на распространение термоупругих волн в образце металла, облучаемого импульсными пучками ионов // Поверхность. 2004, № 10. С. 92-99.
- [3] Амирханов И. В., Пузынин И. В., Пузынина Т. П., Сархадов И. Исследование термоупругих эффектов в металлах в рамках модифицированной модели термического пика. // Вестник РУДН. Серия Математика. Информатика. Физика. № 2. 2013. С. 77-84.
- [4] Amirkhanov I. V., Didyk A. Yu., Muzafarov D. Z., Puzynin I. V., Puzynina T. P., Sarkar N. R., Sarkhadov I. and Sharipov Z. A. Model Description of Thermoelastic Stress in Materials under Bombardment by Heavy Ions. Journal of Surface Investigation. X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques, 2011, Vol. 5, No. 4, pp. 655-661.
- [5] Амирханов И. В., Пузынин И. В., Пузынина Т. П., Сархадов И. Численное моделирование термоупругих волн, возникающих в материалах под действием импульсных пучков ионов. Материалы Всероссийской конференции с международным участием "Информационно-телекоммуникационные технологии и математическое моделирование высокотехнологичных систем". Москва, Россия, Российский университет дружбы народов, 22-26 апреля 2013 г, стр. 161-163.
- [6] Амирханов И. В., Пузынин И. В., Пузынина Т. П., Сархадов И. О выборе численной схемы при моделировании тепловых процессов, возникающих в материалах под действием тяжелых ионов высоких энергий, в рамках модели термического пика. Материалы Всероссийской конференции с международным участием "Информационно-телекоммуникационные технологии и математическое моделирование высокотехнологичных систем". Москва, Россия, Российский университет дружбы народов, 22-26 апреля 2013 г, стр. 158-160.
- [7] Амирханов И. В., Пузынин И. В., Пузынина Т. П., Сархадов И. Моделирование тепловых процессов, возникающих процессов в материалах под действием заряженных частиц в рамках модели кулоновского взрыва. Материалы Всероссийской конференции с международным участием "Информационно-телекоммуникационные технологии и математическое моделирование высокотехнологичных систем". Москва, Россия, Российский университет дружбы народов, 22-26 апреля 2013 г, стр. 155-157.