

P11-2003-110

И. В. Амирханов, Е. В. Земляная, И. В. Пузынин,  
Т. П. Пузынина, Н. Р. Саркар, И. Сархадов\*

**ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ  
ИСПАРЕНИЯ МЕТАЛЛОВ ПОД ДЕЙСТВИЕМ  
ИМПУЛЬСНЫХ ИОННЫХ ПУЧКОВ**

Направлено на IV Национальную конференцию  
по применению рентгеновского, синхротронного излучений,  
нейтронов и электронов для исследования материалов (РСНЭ-2003),  
Москва, 17–22 ноября 2003 г.

---

\*Таджикский государственный национальный университет, Душанбе

# 1. Введение

Вопросам применения импульсных ускорителей заряженных частиц для модификации физико-химических свойств материалов посвящено значительное число работ (см., например, [1]-[11]). Однако проблемы требуют дальнейших исследований.

Особенностями фазовых превращений под действием интенсивных импульсных пучков является их быстротечность и сильная зависимость от условий облучения. В диапазоне интенсивностей  $10^6 - 10^9$  Вт/см<sup>2</sup> ( $\tau \geq 10^{-9}$ с) твердое тело при облучении плавится, испаряется, в нем образуются термомеханические напряжения и т.д. Одновременное присутствие нескольких фаз существенно усложняет задачу создания математической модели, делает ее нелинейной и препятствует получению аналитического решения даже в простейших случаях. Таким образом, компьютерное моделирование является важным методом исследования процессов, происходящих под действием импульсного излучения на поверхности и внутри облучаемого материала.

Основными каналами диссипации энергии мощного импульсного излучения являются теплопроводность, распространение термомеханических напряжений, фазовые переходы и эрозия вещества, что приводит к структурным изменениям в поверхностных слоях облучаемого материала, которые можно наблюдать в экспериментах (см., в частности, [12]).

Как показано в [13], особенности процессов диссипации энергии импульсных пучков умеренной интенсивности приводят к тому, что

1) возникновение и распространение волн термомеханических напряжений может быть описано волновым уравнением упругости,  
2) задача расчета эволюции температурных полей и определения фазового состояния вещества может решаться в приближении задачи Стефана,

3) испарение носит поверхностный характер с четко выраженной границей между паровой и конденсированной фазами.

В рамках указанных допущений в наших предыдущих работах [14] мы уже изучали влияние импульсного ионного источника на эволюцию термоупругих волн в образце железа, а также на процессы плавления и затвердевания в нем [15].

Целью настоящей работы является изучение процессов испарения на примере того же эксперимента [16], который моделировался нами в [14],[15]. В работе представлена постановка задачи, схема численного исследования и обсуждаются результаты расчетов температурных полей, межфазовой границы и других характеристик в зависимости от условий облучения ионным пучком.

## 2. Постановка задачи

В соответствии с [13] мы используем двухфазную модель испарения с кнудсеновским слоем на основе уравнения теплопроводности с подвижной границей:

$$\frac{\partial T}{\partial t} - v_{\Phi} \frac{\partial T}{\partial x} = k_0 \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + q(x, t), \quad (1)$$

где  $0 < x < 1 - \xi$ ,  $t > 0$ ,  $\xi$  – толщина испарившегося слоя. Из-за испарения образца левая граница образца движется со скоростью  $v_{\Phi} = d\xi/dt$ . Уравнение (1) написано в системе координат, связанной с движущейся границей.

Правая сторона образца теплоизолирована, поэтому граничное условие для этой границы следующее:

$$\left. \frac{\partial T}{\partial x} \right|_{x=1-\xi} = 0. \quad (2)$$

Испарение образца на передней поверхности образца ( $x = 0$ ) учитывается граничным условием

$$\left. \frac{\partial T}{\partial x} \right|_{x=0} = F(T_0), \quad (3)$$

где

$$F(T_0) = v_{\Phi} A_1 \left[ 1 + A_2 \left( \frac{5}{2} \bar{T} - 3T_0 \right) + A_3 \bar{u} (\bar{u}/2 + v_{\Phi}) + A_4 \left( \frac{P}{\bar{\rho}} - P_0 \right) \right] + A_5 (T_0^4 - 1);$$

$$\rho_{\text{н}} = \rho_1 \exp(-B/T_0) T_0^{-3/2}; \quad \rho_1 = \frac{m}{\rho_0} \left( \frac{mk\theta_0^2}{2\pi\hbar^2 T_k} \right)^{3/2} \exp(-1); \quad B = \frac{L_0 A}{RT_k}; \quad (4)$$

$$\bar{T} = 0,65T_0; \quad (5)$$

$$\bar{\rho} = 0,31\rho_{\text{н}}; \quad (6)$$

$$\bar{u} = u_0 \bar{T}^{1/2}; \quad u_0 = \sqrt{\frac{5RT_k \tau}{3A l_0}}; \quad (7)$$

$$v_{\Phi} = \frac{\bar{\rho} \bar{u}}{1 - \bar{\rho}}; \quad (8)$$

$$P = P_k \bar{\rho} \bar{T}; \quad P_k = \frac{\rho_0 T_k R}{A \sigma_0}; \quad (9)$$

$$P_0 = P + P^* \bar{u} v_{\Phi}; \quad P^* = \frac{\rho_0 l_0^2}{\sigma_0 \tau^2}. \quad (10)$$

К уравнению (1) с граничными условиями (2),(3) добавляется следующее начальное условие

$$T(x, 0) = T_k; 0 \leq x \leq 1; \xi(0) = 0. \quad (11)$$

С учетом начального условия (11) и  $v_\Phi = d\xi/dt$  для толщины слоя  $\xi$  в момент времени  $t$  можно записать:

$$\xi(t) = \xi(0) + \int_0^t v_\Phi(t) dt.$$

Все величины, входящие в задачу (1)-(11), переведены в безразмерные единицы. Здесь  $P = P/\sigma_0$ ,  $P_0 = P_0/\sigma_0$  ( $\sigma_0 = 2,2 \cdot 10^6$  Па) – давление паров металла на поверхности и давление отдачи к поверхности металла из-за испарения,  $T = T(x, t)/T_k$  ( $T_k = 293$  К) – температура,  $\rho_n = \rho_n/\rho_0$  – плотность насыщенных паров,  $x = x/l_0$  – расстояние от поверхности образца ( $l_0$  – толщина образца),  $T_0$  – температура поверхности образца,  $\theta_0$  – температура Дебая,  $m$  – масса атома металла, время  $t = t/\tau$  ( $\tau$  – время действия источника; при  $t = 1$  источник выключается),  $x_1 = R_0/l_0$  ( $R_0$  – длина свободного пробега ионов) – глубина проникновения ионов внутрь образца.

Безразмерные постоянные  $A_1, A_2, A_3, A_4, A_5, k_0$  определяются физическими свойствами образца и источника по формулам

$$A_1 = \frac{\rho_0 L_0 l_0^2}{\lambda_0 T_k \tau}, A_2 = \frac{RT_k}{AL_0}, A_3 = \frac{l_0^2}{\tau^2 L_0}, k_0 = \frac{\lambda_0 \tau}{c_0 \rho_0 l_0^2}, A_4 = \frac{\sigma_0}{\rho_0 L_0}, A_5 = \frac{\alpha l_0 T_k^3}{\lambda}, \quad (12)$$

где  $\rho_0$  – плотность,  $c_0$  – теплоемкость,  $\lambda_0$  – теплопроводность,  $L_0$  – удельная теплота парообразования,  $A$  – атомная масса металла,  $\alpha$  – универсальная постоянная Стефана – Больцмана,  $R$  – универсальная постоянная газов,  $k$  – постоянная Больцмана,  $\hbar = h/2\pi$ ,  $h$  – постоянная Планка ( $R = 8,31$  Дж/кгК,  $k = 1,38 \cdot 10^{-38}$  Дж/кг,  $h = 6,63 \cdot 10^{-34}$  Дж·с,  $\alpha = 5,67 \cdot 10^{-8}$  Вт/К<sup>4</sup>м<sup>2</sup>).

Функция  $q(x, t)$ , описывающая влияние пучка заряженных частиц на образец (функция источника), определяется выражением [14],[15]:

$$q(x, t) = q_0 \tilde{q}(x, t), \quad \tilde{q}(x, t) = q_1(x) q_2(t), \quad (13)$$

где

$$q_1(x) = \frac{1}{1 + e^{\mu_1(x - x_1)}}, \quad 0 \leq x \leq 1; \quad \mu_1 = 100 \quad (14)$$

$$q_2(t) = \frac{1 - e^{-\mu_3 t}}{1 + e^{\mu_2(t - 1)}}, \quad 0 < t < \infty; \quad \mu_2 = \mu_3 = 4000; \quad (15)$$

$$q_0 = \frac{E_0 j_{\max} \tau}{ZeR_0 c_0 \rho_0 T_0} \quad (16)$$

– безразмерная постоянная, которая выражает мощность теплового источника;  $E_0$ ,  $j_{\max}$ ,  $Ze$  – энергия, максимальная плотность тока и заряд ионов соответственно.

Как уже упоминалось, мы будем моделировать условия эксперимента [16] по облучению образца железа мощным импульсным пучком ионов углерода. Поэтому мы полагаем  $l_0 = 10^{-5}\text{м}$ ,  $\tau = 3 \cdot 10^{-7}\text{с}$  (время действия источника),  $R_0 = 7 \cdot 10^{-7}\text{м}$ . Остальные параметры задачи также выбираем для мишени из железа ( $\rho_0 = 7870\text{ кг/м}^3$ ,  $c_0 = 456\text{ Дж/кгК}$ ,  $\lambda_0 = 78,2\text{ Вт/мК}$ ,  $\theta_0 = 420\text{ К}$ ,  $m = 9,32 \cdot 10^{-26}\text{ кг}$ ,  $L_0 = 7,1 \cdot 10^6\text{ Дж/кг}$ ) и для ионного пучка углерода, для которого [3, 17]

$$E_0 = 250 \div 350\text{ кэВ}; j_{\max} = 10 \div 1000\text{ А/см}^2; Z = 1; e = 1,6 \cdot 10^{-19}\text{ Кл.}$$

Тогда постоянные  $\rho_1$ ,  $B$ ,  $u_0$ ,  $P_k$ ,  $P^*$ ,  $A_1$ ,  $A_2$ ,  $A_3$ ,  $A_4$ ,  $A_5$ ,  $k_0$  принимают следующие приближенные значения:

$$\rho_1 \simeq 5066,16; B \simeq 163,30; u_0 \simeq 8,076; P_k \simeq 155,54; P^* \simeq 3,97; k_0 \simeq 6,54 \cdot 10^{-2};$$

$$A_1 \simeq 812,90; A_2 \simeq 6,12 \cdot 10^{-3}; A_3 \simeq 1,56 \cdot 10^{-4}; A_4 \simeq 3,94 \cdot 10^{-5}; A_5 \simeq 1,83 \cdot 10^{-7}.$$

При этом интенсивность источника  $q_0$  меняется в пределах  $10 \lesssim q_0 \lesssim 1500$ . Глубина проникновения ионов в образец  $x_1$  составляет 0,07.

### 3. Метод численного решения

На каждом временном слое  $j$  введем равномерную прямоугольную сетку  $\{x_i = ih_x (i = 0, 1, \dots, m), t_j = jh_t (j = 0, 1, \dots, n)\}$ ;  $h_x$  и  $h_t$  – соответственно шаги по переменным  $x$  и  $t$  ( $h_x = (1 - \xi^j)/m$ ). Для решения уравнения (1) с граничными и начальным условиями (2)–(11) будем использовать следующую абсолютно устойчивую конечно-разностную схему аппроксимации  $O(h_t + h_x^2)$  [18]:

$$\frac{T_i^{j+1} - T_i^j}{h_t} - v_{\Phi}(T_0^{j+1}) \frac{T_{i+1}^{j+1} - T_{i-1}^{j+1}}{2h_x} = k_0 \frac{T_{i+1}^{j+1} - 2T_i^{j+1} + T_{i-1}^{j+1}}{2h_x^2} + q_i^{j+\frac{1}{2}}; \quad (17)$$

$$i = 1, 2, \dots, m - 1;$$

$$\frac{T_{m+1}^{j+1} - T_{m-1}^{j+1}}{2h_x} = 0; \quad i = m; \quad (18)$$

$$\rho_{\text{H}}^{j+1} = \rho_1 \exp(-B/T_0^{j+1}) (T_0^{j+1})^{-3/2}; \quad i = 0; \quad (19)$$

$$\bar{T}^{j+1} = 0,65T_0^{j+1}; \quad (20)$$

$$\bar{\rho}^{j+1} = 0,31\rho_{\text{H}}^{j+1}; \quad (21)$$

$$\bar{u}^{j+1} = u_0 \sqrt{T^{j+1}}; \quad (22)$$

$$v_{\Phi}(T_0^{j+1}) = \frac{\bar{\rho}^{j+1} \bar{u}^{j+1}}{1 - \bar{\rho}^{j+1}}; \quad (23)$$

$$P^{j+1} = P_k \bar{\rho}^{j+1} \bar{T}^{j+1}; \quad (24)$$

$$P_0^{j+1} = P^{j+1} + P^* \bar{u}^{j+1} v_{\Phi}(T_0^{j+1}); \quad (25)$$

$$\frac{T_1^{j+1} - T_{-1}^{j+1}}{2h_x} = F(T_0^{j+1}); \quad (26)$$

$$\xi^{j+1} = \xi^j + [v_{\Phi}(T_0^j) + v_{\Phi}(T_0^{j+1})] h_t / 2; \quad j = 0, 1, \dots, n; \quad (27)$$

$$T_i^0 = T_k; \quad i = 0, 1, \dots, m; \quad \xi^0 = 0, \quad (28)$$

где  $T_i^j = T(x_i, t_j)$ ,  $q_i^{j+1/2} = q(x_i, t_j + 0, 5h_t)$ .

На каждом  $j$ -м слое уравнение (17) представляет собой нелинейную граничную задачу, которая решается методом простых итераций.

Предположим, значение температуры на  $s$ -й итерации  $T_i^{j+1(s)}$  известно. При вычислении следующего  $(s+1)$ -го приближения будем брать в функции  $v_{\Phi}(T_0^{j+1})$  уравнения (17), а также в правой части выражения (26) значение температуры с предыдущей итерации:  $T_0^{j+1(s)}$ . В этом случае мы имеем линейную задачу относительно  $T_i^{j+1(s+1)}$ , которая решается методом прогонки. Таким образом, мы получаем следующую итерационную схему:

$$-a^s T_{i-1}^{j+1(s+1)} + b T_i^{j+1(s+1)} - c^s T_{i+1}^{j+1(s+1)} = f_i; \quad i = 1, 2, \dots, m; \quad (29)$$

$$b T_0^{j+1(s+1)} - (a^s + c^s) T_1^{j+1(s+1)} = f_0 - 2h_x a^s F(T_0^{j+1(s)}); \quad i = 0; \quad (30)$$

$$b T_m^{j+1(s+1)} - (a^s + c^s) T_{m-1}^{j+1(s+1)} = f_m; \quad i = 1, 2, \dots, m, \quad (31)$$

где

$$b = 1 + \frac{2k_0 h_t}{h_x^2}; \quad a^s = \frac{k_0 h_t}{h_x^2} - \frac{v_{\Phi}(T_0^{j+1(s)}) h_t}{2h_x}; \quad c^s = \frac{k_0 h_t}{h_x^2} + \frac{v_{\Phi}(T_0^{j+1(s)}) h_t}{2h_x}; \quad f_i = T_i^j + q_i^{j+\frac{1}{2}} h_t.$$

Итерационный процесс завершается при выполнении условия

$$|T_0^{j+1(s+1)} - T_0^{j+1(s)}| < \varepsilon,$$

где  $\varepsilon > 0$  – заранее заданное малое число. В качестве начального приближения на каждом слое  $j+1$  удобно брать значение температуры с предыдущего слоя  $j$  ( $T_i^{j+1(0)} = T_i^j$ ;  $i = 1, 2, \dots, m$ ). При этом для  $\varepsilon = 10^{-7}$  обычно требуется 4–5 итераций.

Для проверки точности представленной схемы проводился численный эксперимент на последовательности сгущающихся

сеток. В таблице приведены максимальные разности отклонений температуры  $T$  ( $\Delta_T$ ) при фиксированном шаге  $h_t = 10^{-5}$  и вдвое сгущающихся шагах  $h_x, h_x/2, h_x/4$  ( $h_x = 10^{-3}$ ) в соответствующих точках  $x_T$  в момент времени  $t = 1$  (момент выключения источника) и аналогичные результаты при фиксированном шаге  $h_x = 10^{-3}$  на вдвое сгущающихся шагах  $h_t, h_t/2, h_t/4$  ( $h_t = 4 \cdot 10^{-5}$ ) в точке  $x = 0,1$ .

$$\Delta T_h = \max |T_h(x, t) - T_{h/2}(x, t)|$$

$h$	$t_{T_h}$	$\Delta T_h$	$h$	$x_{T_h}$	$\Delta T_h$
$h_t$	0,12280	$4,12118 \cdot 10^{-4}$	$h_x$	0,03124	$8,4593 \cdot 10^{-5}$
$h_t/2$	0,12280	$2,06077 \cdot 10^{-4}$	$h_x/2$	0,03124	$2,1147 \cdot 10^{-9}$

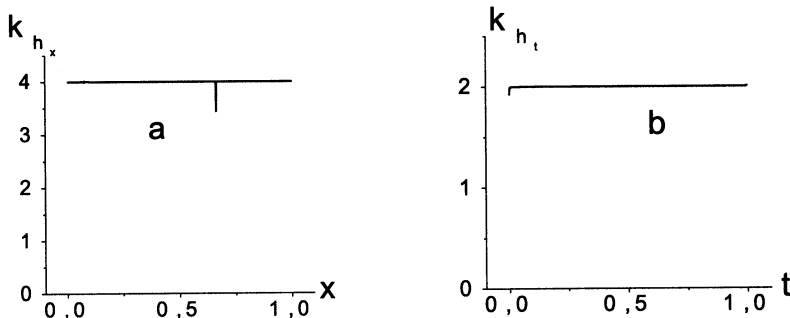


Рис. 1

Для подтверждения указанной выше точности аппроксимации на сгущающихся сетках проверялось выполнение правила Рунге для температуры  $T(x, t)$  по формуле

$$K_h = \frac{T_h - T_{h/2}}{T_{h/2} - T_{h/4}},$$

где  $h$  – начальный шаг вычисления температуры  $T$  для одной переменной при постоянном шаге по другой переменной. На рис.1 приведены графики изменения этих коэффициентов от соответствующей переменной при фиксированном шаге  $h_t = 10^{-5}$  и начальном шаге  $h_x = 10^{-3}$  для температуры  $T(x, t)$  (рис. 1(a)) в момент времени  $t = 1$  и при фиксированном шаге  $h_x = 10^{-3}$ , начальном шаге  $h_t = 4 \cdot 10^{-5}$  (рис. 1(b)) в точке  $x = 0,1$ . Как видно из рис. 1,  $K_{h_x} \simeq 4$ ,  $K_{h_t} \simeq 2$ , что соответствует теоретическому порядку аппроксимации  $O(h_x^2 + h_t)$ .

#### 4. Численный эксперимент и обсуждение его результатов

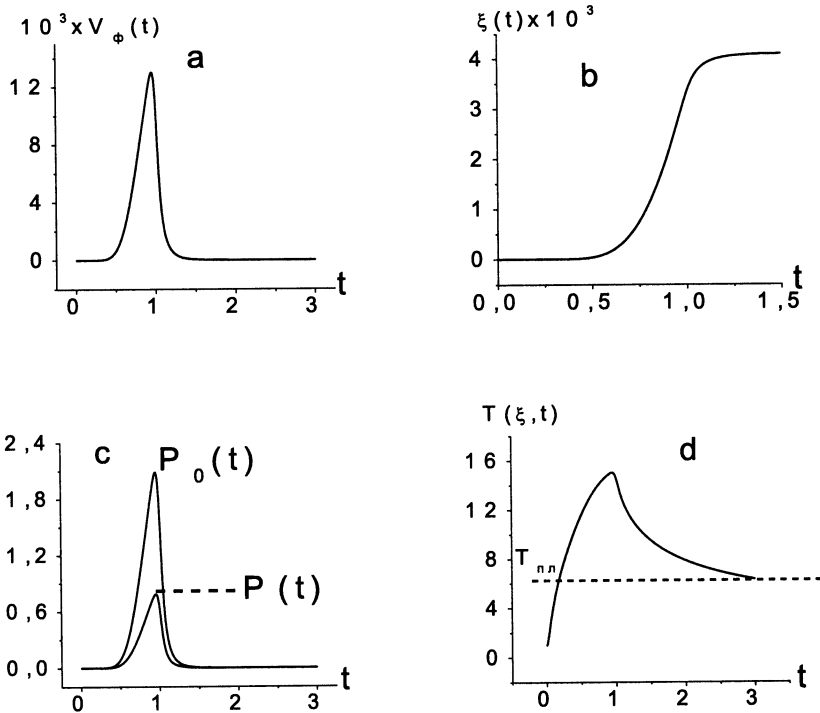


Рис. 2

Была исследована динамика изменения толщины слоя испарения  $\xi(t)$ , скорости испарения  $v_\phi = d\xi/dt$ , давления паров  $P(t)$  образца на поверхности, давления отдачи  $P_0(t)$  (давление, испытываемое поверхностью образца из-за испарения), а также температуры поверхности образца —  $T(\xi, t)$ . На рис.2 приведены графики зависимости этих величин от времени.

Видно, что до некоторого момента времени испарение образца практически отсутствует, хотя температура превышает температуру плавления образца (см. рис.2a,b,d). Во время действия источника скорость испарения  $v_\phi$  растет, а после выключения источника  $v_\phi$  уменьшается из-за уменьшения температуры поверхности образца. Отметим, что плавление начинается раньше испарения, но в настоящей работе мы это не



учитываем, т.к. изучаем только влияние испарения на профиль температуры. Давление отдачи  $P_0(t)$  в несколько раз превосходит давление паров вблизи границы  $P(t)$ . Это означает, что при исследовании распространения термоупругих волн необходимо учитывать влияние давления  $P_0(t)$  на профиль термоупругой волны напряжения с помощью граничного условия  $\sigma(0, t) = -P_0(t)$ .

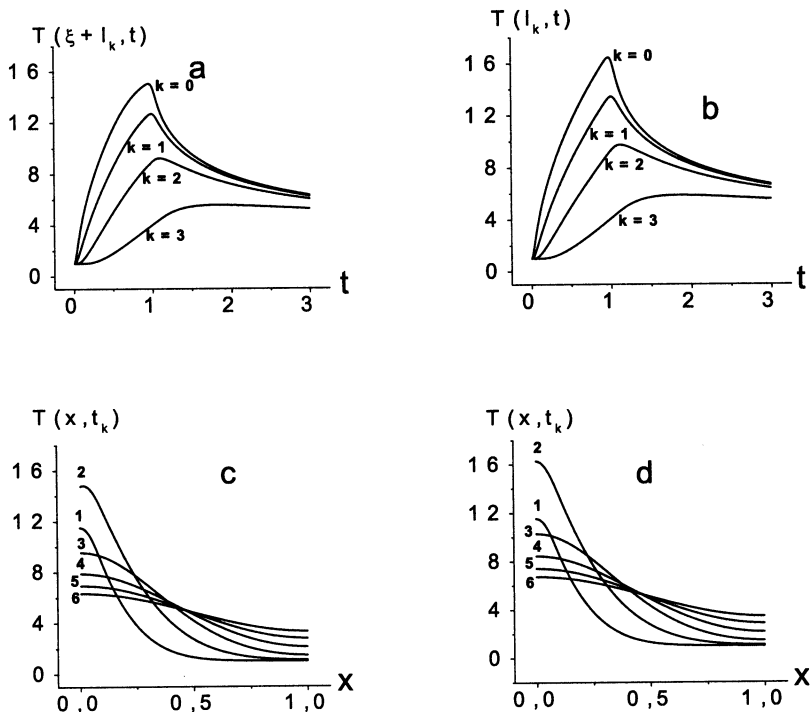


Рис. 3

Следует подчеркнуть, что скорость  $v_\Phi$  после умножения на величину  $\rho_0 l_0 / \tau$  выражает поток массы паров, испускаемой с поверхности образца. Таким образом, зная зависимость  $v_\Phi(t)$ , можно судить об изменении интенсивности испарения.

Отметим, что, согласно [13], используемая нами двухфазная модель испарения с кнудсеновским слоем справедлива в наших безразмерных величинах при соблюдении условия  $v_\Phi \leq 0,3$ . Из рис. 2а видно, что данное условие выполняется с запасом ( $v_\Phi^{max} = 0,012$ ).

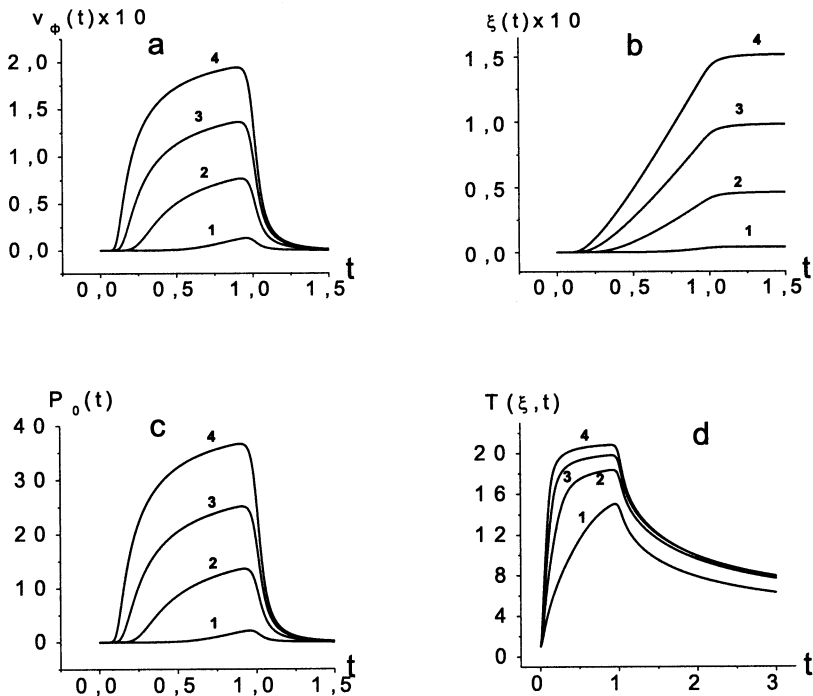


Рис. 4

Рассмотрим, как влияет учет испарения на профиль температуры и ее эволюцию на разных глубинах образца. Для этого построим указанные зависимости при отсутствии ( $v_\phi = 0$ ) и наличии испарения ( $v_\phi \neq 0$ ). На рис. 3а приведена временная зависимость температуры на глубинах  $l = 0,1k$ ;  $k = 0,1,2,3$  с учетом испарения образца. Аналогичные кривые построены на рис. 3б при отсутствии испарения. На рис. 3с, д приведены профили температур при  $t = 0,5k$ ;  $k = 1, \dots, 6$  с учетом и при отсутствии испарения.

Из рис. 3 видно, что из-за потери тепла на испарение температура на поверхности образца ниже, чем при отсутствии испарения.

Рис. 4 демонстрирует зависимость величин  $v_\phi(t)$ ,  $P_0(t)$ ,  $\xi(t)$ ,  $T(0, t)$  от интенсивности источника ( $q_0 = kq^*$ ;  $k = 1, 2, 3, 4$ ;  $q^* = 59,44$ ). На рис. 5 представлены максимальные значения толщины слоя испарения  $\xi^{max}$ , скорости движения границы испарения  $v_\phi^{max}$ , давления отдачи  $P_0^{max}$  и значения температуры  $T(\xi)^{max}$  на границе образца

с областью испарения в зависимости от интенсивности источника  $q_0/q^*$ . Видно, что с ростом интенсивности источника температура поверхности образца в какой-то момент времени перестает дальше расти. Выделяемое источником тепло при этом уходит на испарение и диффузию тепла. Из-за отличного от нуля значения производной температуры на границе  $x = 0$  температура должна достигать своего максимального значения не на границе, а внутри образца вблизи границы. Ниже мы увидим, что это действительно так.

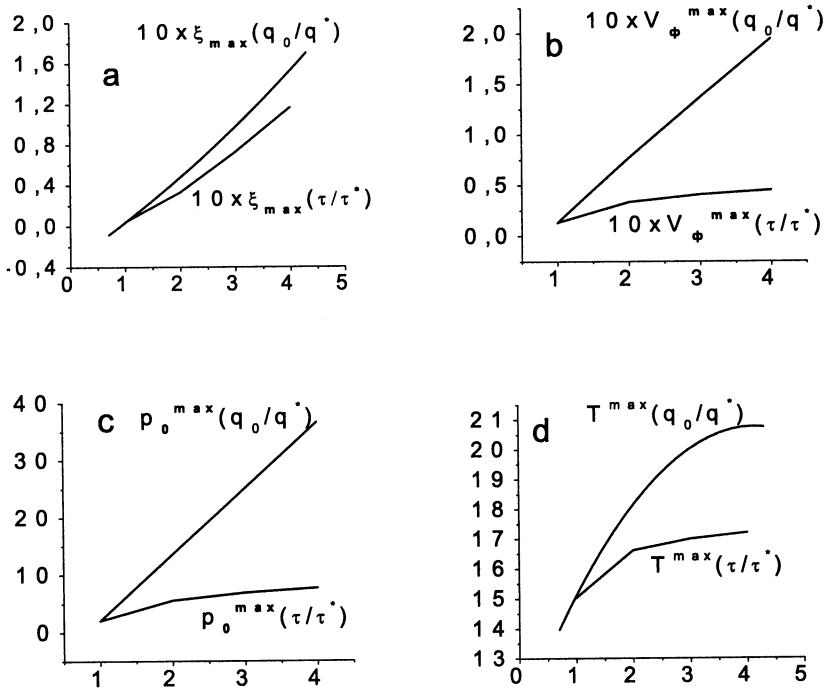


Рис. 5

Из рис.5 видно, что зависимости величин  $\xi^{max}$ ,  $\rho_0^{max}$ ,  $v_{\phi}^{max}$  от интенсивности источника  $q_0/q^*$  близки к линейным, в то время как зависимость максимума температуры на поверхности образца от интенсивности источника нелинейна и имеет тенденцию к насыщению (рис. 5d).

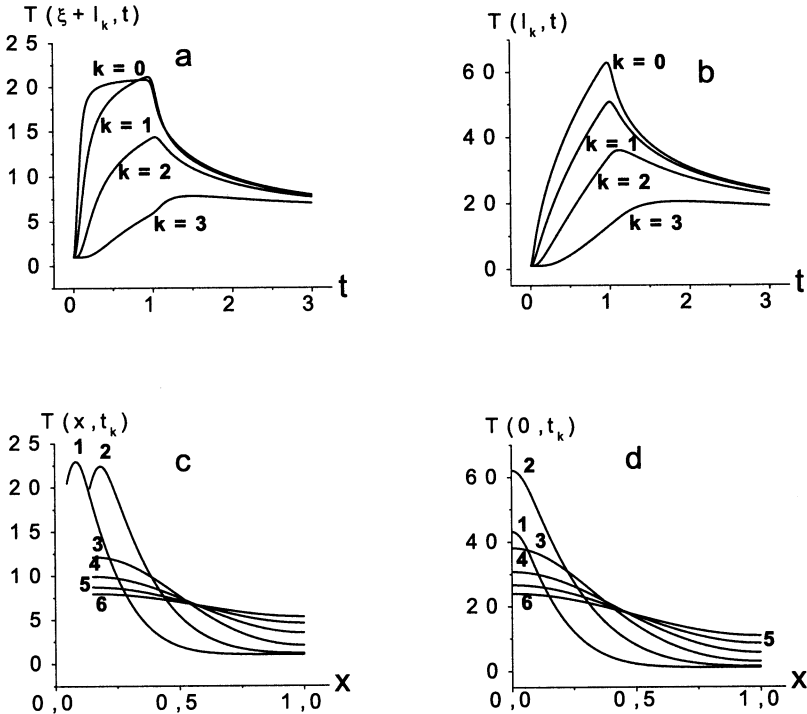


Рис. 6

При интенсивности  $q_0 = q^*$  из рис. 3 видно, что профили температуры при разных временах и зависимости температуры от времени на разных глубинах образца (рис. 3а,с) слабо отличаются от аналогичных картин при отсутствии испарения (рис. 3б,д). Однако при интенсивности  $q_0 = 4q^*$ , как показано на рис. 6, аналогичные картины сильно отличаются друг от друга. Из рис. 6а,б видно, что при отсутствии испарения температура поверхности образца достигает максимального значения  $\sim 60$  ( $\sim 18000$  K), а при учете испарения имеет максимум  $\sim 20$  ( $\sim 6000$  K). Таким образом, при больших интенсивностях источника испарением образца пренебрегать нельзя, так как на него расходуется значительная часть энергии источника. При этом граница образца перемещается на величину  $\xi(t)$ , и максимум температуры будет находиться не на поверхности образца, а внутри него (рис.6с). Это согласуется с аналогичными результатами, полученными в [13] для другого эксперимента (облучение медной мишени протонным импульсным пучком).

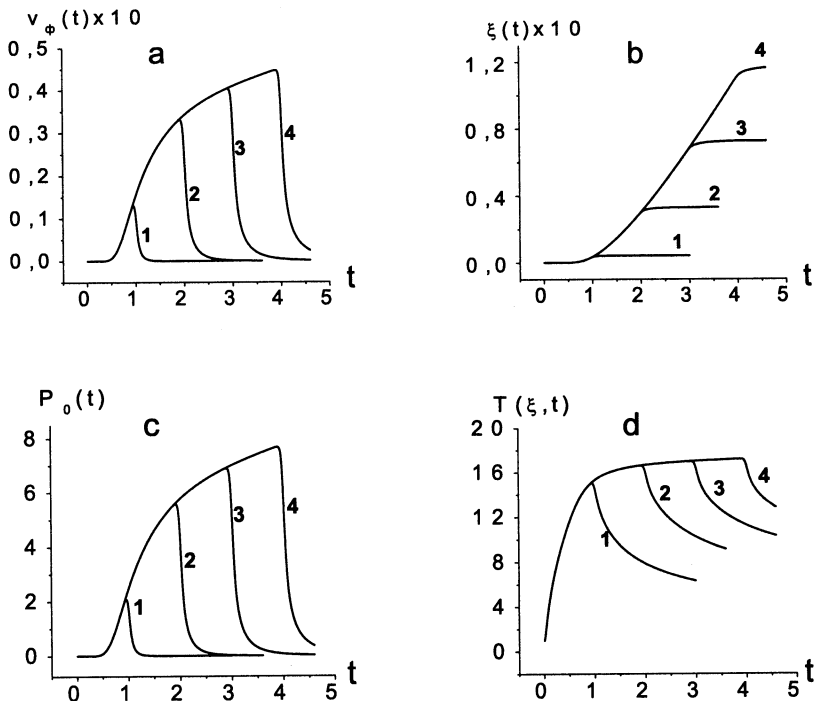


Рис. 7

Как известно, источник с интенсивностью  $q_0 = q^*$  и длительностью  $4\tau$  производит ту же энергию, что и источник с интенсивностью  $q_0 = 4q^*$  и длительностью  $\tau$ . Мощность второго источника в четыре раза больше мощности первого. Интересно проследить, как влияет мощность источника при одной и той же энергии на эволюцию толщины слоя испарения  $\xi(t)$ , скорость перемещения границы образца  $v_{\phi}(t)$ , давление отдачи  $P_0(t)$  и температуру поверхности  $T(\xi, t)$ . Эти характеристики представлены на рис. 7. В данном случае скорость испарения  $v_{\phi}$ , толщина  $\xi^{max}$ , температура  $T(\xi, t)$  и давление  $P_0$  меньше по сравнению со случаем, изображенным на рис. 6, которому соответствует большая мощность. При меньшей мощности источника часть выделяемого тепла успевает по диффузии проникнуть внутрь образца; часть затрачивается на испарение, так что для повышения температуры поверхности образца не хватает дополнительного тепла.

Поэтому температура на поверхности образца не увеличивается, а стабилизируется.

Максимальные значения величин  $\xi(t)$ ,  $v_{\Phi}(t)$ ,  $P_0(t)$ ,  $T(\xi, t)$  при увеличении времени действия источника меньше увеличиваются по сравнению со случаем большей его интенсивности (рис.5), т.е. одна и та же энергия источника по-разному расходуется на испарение и диффузию тепла в зависимости от мощности. На рис.8 приведены те же кривые, что и на рис. 6а,с, но для источника с временем действия  $\tau = 4\tau^*$ .

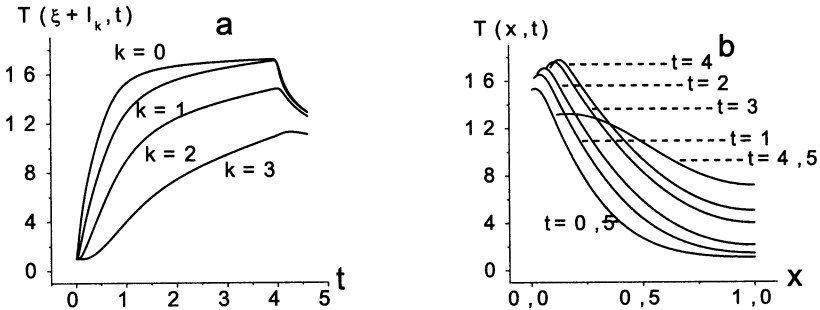


Рис. 8

Все представленные выше результаты получены в приближении постоянной глубины проникновения ионов в образец, что фактически означает, что источник движется вместе с границей испарения  $\xi$ . При этом взаимодействие ионов источника с паром не учитывается.

На рис.9 представлены те же кривые, что и на рис.4, но для случая, когда источник неподвижен. Это означает, что в определенный момент времени ионы пучка перестают проникать в образец. Поэтому хотя источник, как и раньше, выключается при  $t = 1$ , величины  $v_{\Phi}$ ,  $P_0(t)$ ,  $T(\xi(t), t)$  начинают уменьшаться существенно раньше  $t = 1$ . На рис.10а видно, что с увеличением интенсивности пучка толщина слоя испарения не растет, а достигает насыщения. Отметим, что форма кривой на рис. 9а соответствует аналогичному расчету в [13]. При таком подходе, однако, взаимодействие источника с веществом в области пара оказывается таким же, как в твердом теле. Таким образом, можно предположить, что два рассмотренных случая представляют как бы два предельных сценария динамики процессов испарения под действием ионного пучка. Корректный учет потерь энергии при взаимодействии ионов источника с испарившимся веществом мишени остается предметом наших дальнейших исследований.

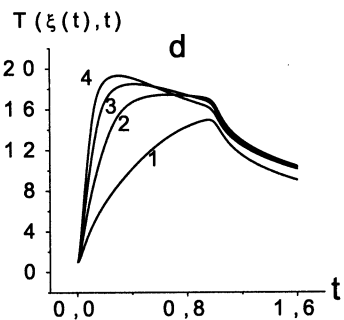
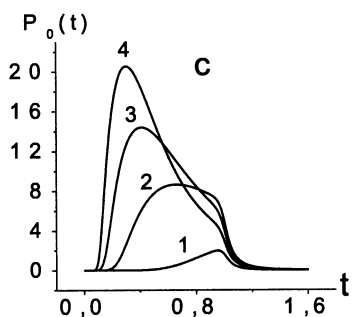
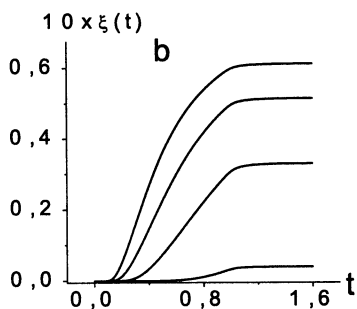
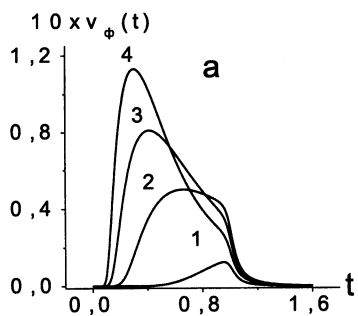


Рис. 9

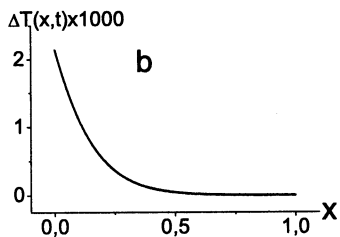
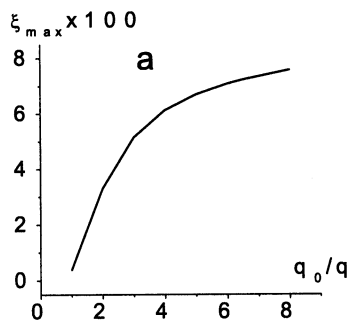


Рис. 10

Наконец, рис. 10b показывает влияние на профиль температуры потерь тепла из-за излучения, которые мы учитываем в граничном условии по закону Стефана – Больцмана. Из рисунка видно, что разность температур  $\Delta T = T_{\alpha=0}(x, t) - T_{\alpha \neq 0}(x, t)$  с учетом и без учета излучения пренебрежимо мала (при  $t \simeq 1$ ,  $q_0 \simeq 60$ ). Поэтому в дальнейших исследованиях эти потери можно не учитывать.

## 5. Заключение

В работе представлен метод численного решения однофазной задачи Стефана (испарение металла) для образца, облучаемого сильноточным импульсным источником ионов. Проведен численный анализ точности вычислительной схемы. Проведено компьютерное моделирование влияния условий облучения на процессы испарения, происходящие в образце.

Численное исследование показало:

1. При небольших интенсивностях источника ( $q_0 \leq 60$ ) испарение образца не имеет существенного влияния на профиль температуры и динамику ее изменения в глубине образца. Однако давление отдачи  $P_0(t)$ , возникающее на границе образца, сравнимо с напряжением термоупругой волны, изучавшимся в работах [14]. Поэтому в дальнейшем необходимо учесть его влияние на распространение термоупругих волн с помощью граничного условия  $\sigma(0, t) = -P_0(t)$ .

2. При больших значениях интенсивности источника ( $q_0 \gg 60$ ) испарением образца пренебрегать нельзя, так как значительная часть энергии источника расходуется на испарение образца.

3. Дальнейший рост интенсивности источника приводит к увеличению испарения образца, а затем к насыщению роста толщины слоя испарения. Это связано с поглощением энергии пучка в области слоя испарения.

4. При увеличении интенсивности источника амплитуда профиля температуры стремится к конечному значению, т.е. достигает насыщения.

Предметом наших дальнейших исследований является влияние фазовых переходов (испарение, плавление) на эволюцию термоупругих волн в облучаемом образце. Кроме того, в моделировании самих процессов испарения остаются открытые вопросы, требующие дальнейшего исследования, упомянутая проблема учета взаимодействия источника с испарившимся веществом мишени.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, гранты N 03-01-00657, N 02-01-00606.



## Список литературы

- [1] В.И. Бойко, А.Н. Валяев, А.Д. Погребняк. УФН, 1999, т.169, N11, с.1243.
- [2] R.W. Stinet et.al. Thermal surface treatment using intense, pulsed ion beams. Proc. Materials Research Society Symp.: Materials Synthesis and Processing Using Ion Beams. Boston, 1994, v.316. p.521-532.
- [3] А.Н. Диденко, А.Е.Лигачев, И.Б.Куракин. Воздействие пучков заряженных частиц на поверхность металлов и сплавов. М.: Энергоатомиздат, 1987.
- [4] С.И. Анисимов, Я.А. Имас, Г.С. Романов, Ю.В. Ходько. Действие излучения большой мощности на металлы. М.: Наука, 1970.
- [5] Ю.А. Быковский, В.Н. Неволин, В.Ю. Фоминский. Ионная и лазерная имплантация металлических материалов. М.: Энергоатомиздат, 1991.
- [6] В.И. Бойко, В.В. Евстигнеев. Введение в физику взаимодействия сильноточных пучков заряженных частиц с веществом. М.: Энергоатомиздат, 1988, с.137.
- [7] В.И. Мажуркин, А.А. Самохин. Математическое моделирование. Под ред. А.А. Самарского, С.П. Курдюмова, В.И. Мажуркина. М.: Наука, 1987, с.191-244.
- [8] И.И. Новиков. ИФЖ, т. XXXIX, N6, 1980, с.1118-1132.
- [9] Б.Я. Любов, Э.Н. Соболев. ИФЖ, т. XLV, N4, 1983, с.670-686.
- [10] В.И. Мажуркин, Г.А. Пестрякова. ЖВМ и МФ, т. XXV, N11, 1985, с.1697-1709.
- [11] Д. Хирс, Г. Паунд. Успехи физики металлов, т. II. Испарение и конденсация. Металлургия, 1966, с.197.
- [12] А.Ю. Дидык, Л.И. Иванов, В.К. Семина, А.Л. Суворов, А.С. Федотов, Ю.Н. Чеблуков, В.А. Алтынов. Сообщение ОИЯИ Р14-2002-239, Дубна, 2002.
- [13] Г.А. Блейхер, В.П. Кривобоков, О.В. Пащенко. Тепломассоперенос в твердом теле под действием мощных пучков заряженных частиц. Новосибирск, Наука, 1999.
- [14] И.В.Амирханов, Е.В.Земляная, И.В.Пузынин, Т.П.Пузынина, И.Сархадов. Сообщение ОИЯИ Р11-2000-263, Дубна, 2000; Сообщение ОИЯИ Р11-2002-24, Дубна, 2002; I.V.Amirkhanov, E.V.Zemlyanaya, I.V.Puzynin, T.P.Puzynina, I.Sarhadov. JCMSE, Vol.2, №1s-2s, 2002, p. 213-224.

- [15] И.В.Амирханов, Е.В.Земляная, И.В.Пузынин, Т.П.Пузынина, И.Сархадов. Сообщение ОИЯИ Р11-2001-164, Дубна, 2001. Сообщение ОИЯИ Р11-2002-78, Дубна, 2002.
- [16] С.А. Коренев. Сообщение ОИЯИ Р13-89-615, Дубна, 1989.
- [17] Э.А. Айрян, С.И. Баструков, М.С. Касчиев, С.А. Коренев, Д.В. Подгайный, И.В. Пузынин, А.В. Федоров, А.М. Червяков. Изв. вузов, т.12, 1998, с.13.
- [18] А.А. Самарский. Теория разностных схем. М.: Наука, 1983, с.258-276.

Получено 16 июня 2003 г.

Амирханов И. В. и др.

P11-2003-110

Численное моделирование испарения металлов  
под действием импульсных ионных пучков

В работе изучается влияние интенсивности и длительности действия импульсного ионного источника на процессы испарения, происходящие в облучаемом металлическом образце. Сформулирована постановка задачи, представлена схема численного исследования. Обсуждаются результаты численного моделирования динамики профиля температуры, интенсивности испарения образца и других характеристик в зависимости от условий облучения ионным пучком.

Работа выполнена в Лаборатории информационных технологий ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна, 2003

Перевод авторов

Amirkhanov I. V. et al.

P11-2003-110

Numerical Simulation of the Metal Evaporation  
under the Action of Pulsed Ion Beams

This paper is devoted to the study of the influence of intensity and duration of action of the pulsed ion source on the evaporation processes occurring in an irradiated metal sample. Formulation of the problem and numerical scheme are presented. Results of numerical simulation of temperature dynamics, evaporation intensity and other characteristics in dependence on the irradiation conditions, are discussed.

The investigation has been performed at the Laboratory of Information Technologies, JINR.

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna, 2003

Редактор *М. И. Зарубина*  
Макет *Е. В. Сабатовой*

Подписано в печать 26.06.2003.

Формат 60 × 90/16. Бумага офсетная. Печать офсетная.

Усл. печ. л. 1,19. Уч.-изд. л. 1,23. Тираж 315 экз. Заказ № 53988.

Издательский отдел Объединенного института ядерных исследований  
141980, г. Дубна, Московская обл., ул. Жолио-Кюри, 6.

E-mail: [publish@pds.jinr.ru](mailto:publish@pds.jinr.ru)

[www.jinr.ru/publish/](http://www.jinr.ru/publish/)