

УДК 538.971

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕРМАЛЬНОЙ ОБРАБОТКИ ПОВЕРХНОСТИ МЕТАЛЛА СИЛЬНОТОЧНЫМ ИОННЫМ ПУЧКОМ

**Э.А.Айрян, С.И.Баструков, М.С.Касчиев*, В.Н.Самойлов,
Д.В.Подгайный, И.В.Пузынин, А.В.Федоров, А.М.Червяков**

На основе численного решения нелинейного уравнения теплопроводности с зависящими от температуры кинетическими коэффициентами проведено исследование тепловых процессов, возникающих в образце металла при облучении высокопоточным ионным пучком. Особое внимание уделено распространению температурного фронта и скорости разогрева поверхности металла. На основе развитой модели построены зависимости температуры разогрева и глубины проплава облучаемого образца от интенсивности ионного тока пучка.

Работа выполнена в Лаборатории вычислительной техники и автоматизации ОИЯИ.

Numeric Simulation of Thermal Treatment of Metal Surface by Means of High Current Ion Beam

E.A.Airyán et al.

Numeric solution of nonlinear equation of thermoconductivity has been performed to simulate evolution of thermal processes, induced on the metallic surface after its threatment by high current ion beam. The emphasis is placed on the thermal front propagation and rate of the surface heating. Based on the model developed, the dependence of the heating rate and the melting depth are displayed as a function of an intensity of high current ion beam.

The investigation has been performed at the Laboratory of Computing Techniques and Automation, JINR.

1. Введение

Для различных технологических приложений важно знать механизм взаимодействия ионного пучка с веществом [1,2]. Например, анализ высокопоточной ионной обработки металла имеет первостепенное значение в реакторостроении для прогнозирования износостойкости стенок термоядерного реактора. Использование источников ионов со взрывной ионной эмиссией оказывается крайне эффективным для получения новых конструкционных материалов с качественно улучшенными физико-химически-

*Институт математики Болгарской академии наук, София

ми и механическими свойствами поверхностей. Особое значение эти исследования приобретают для микроэлектронной индустрии в связи с дальнейшей перспективой миниатюризации компьютерных технологий, возникшей благодаря открывшимся возможностям получения капельных наноструктур (кластеров) проводящих материалов, а также получения в поверхностном слое полупроводниковых образцов областей повышенной концентрации носителей проводимости — квантовых точек (анализ морфологии поверхности образцов, полученных на установке ЭЛИОНА, ЛСВЭ ОИЯИ, проведен в [4]).

В настоящей работе на основе уравнения теплопроводности с граничными условиями, учитывающими конечную толщину мишени и вклад в охлаждение зоны лучистого теплообмена границ мишени с вакуумом, изучалась макроскопическая специфика процесса разогрева поверхности материала. При этом учитывалась температурная зависимость кинетических коэффициентов, характеризующих материал мишени. В качестве параметров, определяющих источник ионов в уравнении теплопроводности, использовались характеристики ионных пучков, получаемых на установке ЭЛИОНА [5].

Задача проводимого в данной работе моделирования заключалась в определении чувствительности поведения температурного профиля в зависимости от формы и мощности ионного пучка.

2. Формулировка модели

Для определения температурного поля и его эволюции численно решалось одномерное уравнение теплопроводности:

$$\rho c(T) \frac{dT}{dt} = \frac{\partial}{\partial x} \left(a(T) \frac{\partial T}{\partial x} \right) + Q_i(x, t), \quad (1)$$

с тепловым источником в виде, предложенном в [3]:

$$Q_i(x, t) = \begin{cases} E_0 j_i(t) / (zeR), & t \leq \tau, \quad x \leq R, \\ 0, & t > \tau, \quad x > R, \end{cases} \quad (2)$$

где τ — время действия источника; E_0 , $j(t)$, ze , R — начальная энергия, плотность тока, заряд и средняя длина пробега иона, соответственно. Функции плотности ионного тока пучка $j_i(t)$, используемые в дальнейших расчетах, следующие:

$$j_1(t) = \text{const} = \frac{j_{\max}}{2},$$

$$j_2(t) = \begin{cases} 2j_{\max} t / \tau, & t \leq \tau/2, \\ 2j_{\max} (\tau - t) / \tau, & \tau/2 < t \leq \tau, \end{cases}$$

$$j_3(t) = \frac{\pi j_{\max}}{4} \sin \left(\pi \frac{t}{\tau} \right). \quad (3)$$

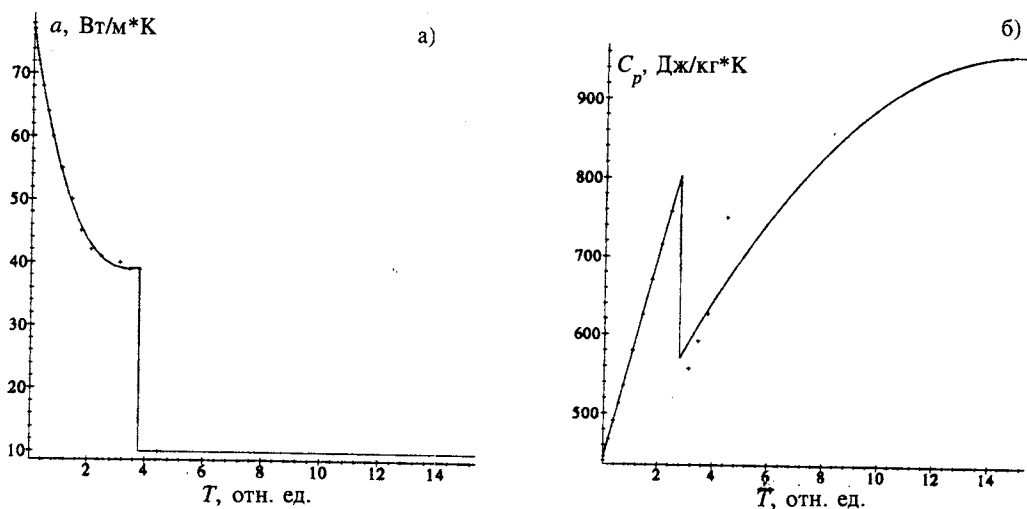


Рис. 1. Зависимость теплофизических параметров от температуры. а) — коэффициент теплопроводности $a(T)$, б) — удельная теплоемкость. По оси абсцисс отложена относительная температура $T = (T - T_0) / T_0$. При $T = 0$ ($T_0 = 20^\circ\text{C}$) были использованы следующие значения теплофизических параметров: удельная теплоемкость $c_0 = 456$ Дж/(кг·К), коэффициент теплопроводности $a_0 = 78,2$ Вт ($\text{м}^2 \cdot \text{К}$) [10]

Величина j_{\max} меняется в пределах от 500 до 1000 А/см^2 , средняя энергия ионов $E_0 = 350$ кэВ [5]. Отметим, что полная энергия, передаваемая пучком ионов мишени за время импульса τ , одинакова для всех функций источника $Q_i(t)$ и пропорциональна $j_{\max} \tau / 2$. В случае $j(t) = \text{const}$ источник имеет наиболее простой вид, соответствующий равномерному распределению мощности $E_0 j$ в пучке, а также равномерному распределению ионов по энергии, т.е. вид ступеньки по оси времени и по нормальной к поверхности координате x .

Подчеркнем, что в данной модели принималась во внимание температурная зависимость кинетических коэффициентов a и c , что позволило учесть конечную скорость распространения температурного фронта, необходимую для более реального описания тепловых процессов. Вид функций $a(T)$ и $c(T)$, построенных по эмпирическим данным, табулированным в [10], показан на рис.1.

Варьируя значение плотности тока, главным образом, за счет уменьшения радиуса пучка, можно добиться того, чтобы максимальная температура разогрева поверхности облучаемого образца достигла температуры плавления. Для описания эволюции температурного профиля с учетом фазовых превращений на поверхности образца необходимо учесть потери энергии, расходуемой на проплавление и испарение поверхности ми-

шени. Это можно сделать, добавив к теплоемкости, входящей в уравнение (1), два слагаемых, описывающих скрытые стоки теплоты:

$$c^*(T) = c(T) + \frac{L_{\text{пл}}}{T_0} \delta(\xi) + \frac{L_{\text{пр}}}{T_0} \delta(\xi_1), \quad \xi = \frac{T - T_{\text{пл}}}{T_0}, \quad \xi_1 = \frac{T - T_{\text{к}}}{T_0}, \quad (4)$$

где $L_{\text{пл}}$ и $L_{\text{пр}}$ — удельные теплоты плавления и парообразования, $T_{\text{пл}}$ и $T_{\text{к}}$ — температуры плавления и кипения соответственно.

Уравнение (1) с теплоемкостью $c^*(T)$ дополняется следующими граничными условиями:

$$\begin{aligned} a(T) \frac{\partial T(x, t)}{\partial x} - \alpha \sigma (T^4(x, t) - T_0^4) \Big|_{x=0} &= 0, \\ a(T) \frac{\partial T(x, t)}{\partial x} + \alpha \sigma (T^4(x, t) - T_0^4) \Big|_{x=l} &= 0. \end{aligned} \quad (5)$$

Здесь $T(0, t)$ и $T(l, t)$ — значения температуры на границах мишени; x отсчитывается в направлении нормали к поверхности, σ — постоянная Стефана — Больцмана и α — коэффициент поглощения серого тела. Приведенные выше граничные условия учитывают теплообмен поглотителя, имеющего конечную толщину l , с вакуумом из-за теплового излучения с обеих поверхностей мишени. В начальный момент времени предполагается, что распределение температурного поля в веществе мишени однородно: $T(x, 0) = T_0$. Таким образом, полная краевая задача на определение температурного поля поглотителя запишется следующим образом:

$$\begin{aligned} \rho c^*(T) \frac{dT}{dt} &= \frac{\partial}{\partial x} \left(a(T) \frac{\partial T}{\partial x} \right) + Q(x, t), \\ T(x, 0) &= T_0, \\ a(T) \frac{\partial T(x, t)}{\partial x} - \alpha \sigma (T^4(x, t) - T_0^4) \Big|_{x=0} &= 0, \\ a(T) \frac{\partial T(x, t)}{\partial x} + \alpha \sigma (T^4(x, t) - T_0^4) \Big|_{x=l} &= 0. \end{aligned} \quad (6)$$

Для численного решения задача (2.6) приводилась к безразмерному виду заменой переменных: $x^* = x/l$, $t^* = t/\tau$, $T^* = (T - T_0)/T_0$. Затем использовалась абсолютно устойчивая неявная разностная схема по времени [6]. Для аппроксимации по пространственной переменной применялись разностные схемы второго порядка точности с неравномерным шагом и схемы метода конечных элементов с линейными элементами. Возникающие на каждом слое по времени системы нелинейных алгебраических уравнений решались с помощью метода простой итерации или непрерывного аналога метода Ньютона. Для решения линейных систем использовался метод прогонки [6].

3. Результаты численного анализа

Данная модель использовалась для описания эволюции температурного поля, возникающего в железной мишени при облучении ионами углерода. В вычислениях учитывались следующие теплофизические характеристики железа: плотность $\rho = 7870 \text{ кг/м}^3$, температура плавления $T_{\text{пл}} = 1799^\circ\text{К}$, температура кипения $T_{\text{к}} = 3149^\circ\text{К}$, удельная теплота плавления $L_{\text{пл}} = 0,27 \cdot 10^6 \text{ Дж/кг}$ и удельная теплота испарения $L_{\text{пр}} = 6,25 \cdot 10^6 \text{ Дж/кг}$.

На рис.2а—в представлены результаты расчета пространственно-временного профиля температуры $T(x, t)$ для различных функций источника $Q_i(t)$. Приведенные графики показывают, что максимальный разогрев достигается в слое глубиной, равной

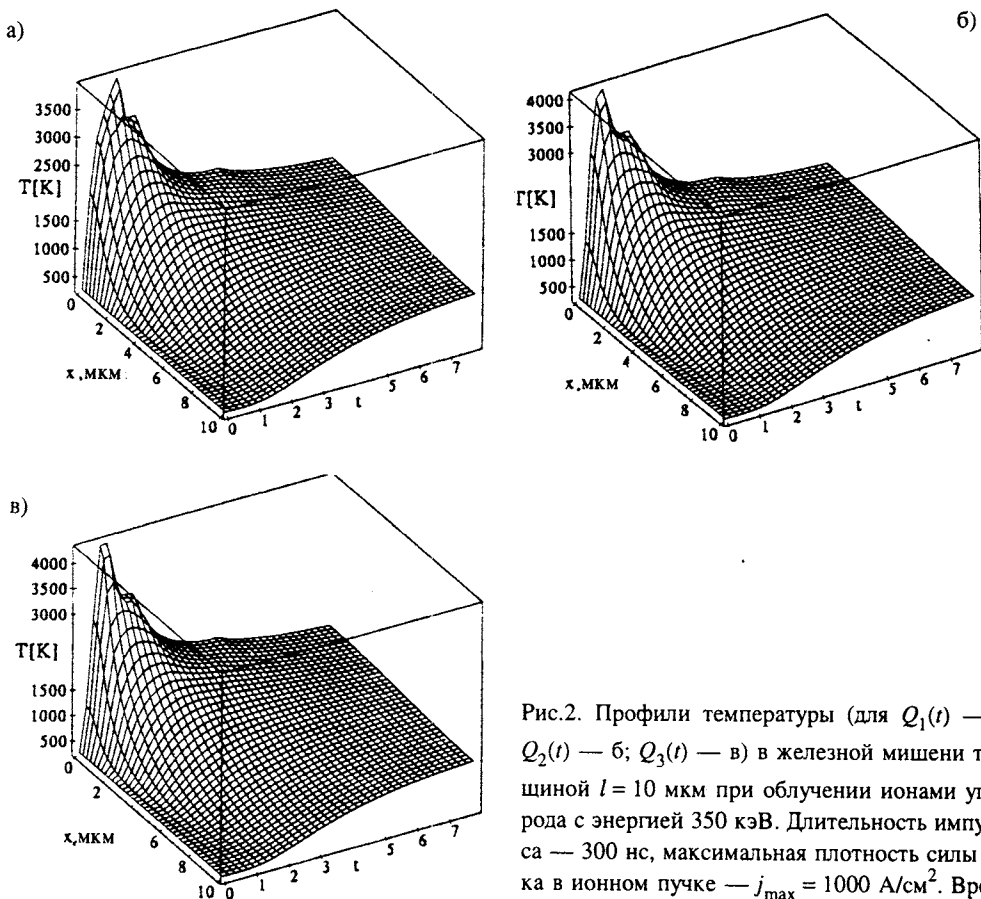


Рис.2. Профили температуры (для $Q_1(t)$ — а; $Q_2(t)$ — б; $Q_3(t)$ — в) в железной мишени толщиной $l = 10 \text{ мкм}$ при облучении ионами углерода с энергией 350 кэВ. Длительность импульса — 300 нс, максимальная плотность силы тока в ионном пучке — $j_{\text{max}} = 1000 \text{ А/см}^2$. Время по оси абсцисс отсчитывается в относительных единицах t/τ

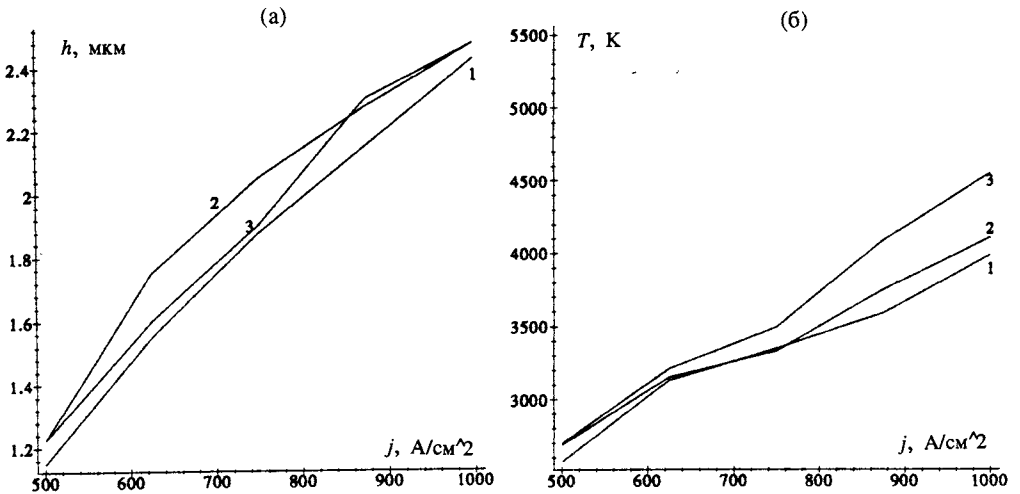


Рис.3. Глубина проплава (а) и максимальная температура разогрева поверхности (б) как функции j_{\max} . Кривые 1,2,3 соответствуют вариантам использования в расчетах функций источника $Q_1(t)$, $Q_2(t)$, $Q_3(t)$. Время по оси абсцисс отсчитывается в относительных единицах t/τ

средней длине свободного пробега ионов в веществе. Два плато на каждом из этих графиков соответствуют кипению и плавлению мишени. После выключения источника, при $t > \tau$, происходит быстрое остывание поверхности за счет теплообмена границ мишени с вакуумом и отвод тепла в глубь образца, что видно вследствие сглаживания температурного профиля для всех функций источника. Это связано с тем, что дальнейшее остывание во всех трех случаях описывается уравнением (1) без источника. Однако для каждого случая уравнение теплопроводности дополняется начальным условием, представляющим собой функцию $T(x, \tau)$ в момент выключения соответствующего Q_i . Таким образом, поведение температурных профилей для различных функций источника существенно различается только на этапе разогрева, скорость которого определяется видом функции $j(t)$.

Максимальная температура разогрева мишени T_{\max} зависит как от вида функций Q_i , так и от максимального значения интенсивности тока пучка j_{\max} . Приравнявая $T(x, t)$ температуре плавления, можно определить для каждого t значение x , соответствующее положению границы раздела жидкой и твердой фаз. Для каждого источника Q_i определено максимальное значение $x_{\max} = h$ и построена зависимость $h(j_{\max})$. Функции $T_{\max}(j_{\max})$ и $h(j_{\max})$, представленные на рис.3а,б, возрастают с ростом j_{\max} для всех трех видов источника. Однако в точках, соответствующих значению j_{\max} , когда достигается разогрев поверхности до температуры плавления и кипения, на этих

Таблица. Значения T_{\max} и h в зависимости от значения j_{\max}

j_{\max} , А/см ²	T_{\max} , К			h , мкм		
	Q_1	Q_2	Q_3	Q_1	Q_2	Q_3
500	2572	2700	2688	1.150	1.225	1.225
625	3134	3213	3154	1.550	1.750	1.600
750	3349	3494	3332	1.875	2.050	1.900
875	3587	4085	3747	2.150	2.275	2.300
1000	3926	4445	4405	2.425	2.475	2.475

кривых видны перегибы. Численные значения $T_{\max}(j_{\max})$ и $h(j_{\max})$ в этих точках даны в таблице. Изменение наклона кривых в них связано с тем, что часть переданной мишени энергии затрачивается на проплав и испарение вещества с поверхности, и таким образом доля энергии, расходуемая на дальнейшее нагревание, уменьшается. Приведенные выше результаты находятся в согласии с результатами аналогичных расчетов и измерений, представленных в [7—9].

4. Выводы

В заключение отметим, что взаимодействие сильноточных ионных пучков с веществом характеризуется быстрым разогревом поверхности мишени с последующим быстрым остыванием, что приводит к разрушению кристаллической решетки, образованию дефектов на поверхности и, таким образом, может существенно менять физические свойства материала. Для описания свойств облученного образца необходимо комплексное исследование эволюции температурного профиля и величин, характеризующих вещество. Предложенная выше модель может служить основой дальнейших теоретических построений.

Работа выполнена при содействии РФФИ (гранты 97-01-01023 и 95-01-01467), а также Фонда поддержки фундаментальных исследований Болгарии (грант ММ-501).

Литература

1. Быстрицкий В.М., Диденко А.Н. — Мощные ионные пучки. М.: Энергоиздат, 1984.
2. Диденко А.Н., Лигачев А.Е., Куракин И.Б. — Воздействие пучков заряженных частиц на поверхность металлов и сплавов. М.: Энергоиздат, 1987.

3. Бойко В.И., Евстигнеев В.В. — Введение в физику взаимодействия сильноточных пучков заряженных частиц с веществом. М.: Энергоиздат, 1988.
4. Altaisky M.V. et al. — JINR Rapid Commun., 1997, No.2[82]-97, p.37.
5. Корнев С.А. — Препринт ОИЯИ Р13-94-192, Дубна, 1994.
6. Самарский А.А. — Теория разностных схем. М.: Наука, 1977.
7. Rastov R., Maron Y., Mayer J. — Phys. Rev. B, 1985, v.31, p.893.
8. Davis H.A. et al. — Annual Report of Los Alamos National Laboratory, 1995.
9. Stinnett R.G. et al. — Proc. Materials Research Society Symp.: Materials Synthesis and Processing Using Ion Beams, Boston, 1994, v.316, p.521.
10. Таблицы физических величин — Под ред. И.К.Кикоина. М.: «Наука», 1976.