

УДК 51-72:538.9

Модельное описание термоупругих напряжений в материалах при облучении тяжёлыми ионами высоких энергий

И. В. Амирханов, А. Ю. Дидык, Д. З. Музафаров,
И. В. Пузынин, Т. П. Пузынина, Н. Р. Саркар,
И. Сархадов, З. А. Шарипов

*Объединённый институт ядерных исследований
ул. Жолио-Кюри д.6, Дубна, Московская область, 141980, Россия*

В предыдущих работах авторов исследованы формирование и эволюция термоупругих волн, возникающих в металлах под действием импульсных пучков ионов, в рамках системы уравнений термоупругости. В настоящей работе проведено численное исследование этого явления в рамках двухтемпературной модели, с введением температуры электронов и кристаллической решётки (модель термического пика) и представлен сравнительный анализ полученных результатов с результатами предыдущих работ.

Ключевые слова: термоупругость, численное моделирование, ион, термический пик, волновое уравнение, уравнение теплопроводности.

1. Введение

При прохождении тяжёлой 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 счёт подвода тепла от внешних источников, но также и за счёт 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 решётки 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 теплоёмкости, теплопроводности и функции источников для электронного газа и кристаллической решётки, g — константа взаимодействия электронной подсистемы с решёткой.

2. 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]:

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

Статья поступила в редакцию 28 ноября 2009 г.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, гранты №08-01-00800а, №09-01-00770а.

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

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

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

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

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

$$A_{e,i}(z, t) = b A_{0e,i} \mu_{e,i}(z) f(t), \quad A_{0e,i} = \frac{E_0 j_0 \tau}{T_0 l Z e C_{e,i}},$$

где как и в работе [3] параметры пучка следующие:

$$\tau = 3 \cdot 10^{-7} \text{ с}, \quad E_0 = 300 \text{ кэВ}, \quad j_0 = 10^7 \text{ А/м}^2, \quad Z = 1.$$

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 $\mu_{e,i}(z)$ задаём 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.

3. Обсуждение численных результатов

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

На рис. 1 представлены решения задачи (3)–(8) в момент времени $t/\tau = 0,00335$ для различных значений параметра α_1 при $g \neq 0$, $A_e = 0$, $A_i \neq 0$. Из рис. 1 видно, что от скорости включения источника (т.е. от значения α_1) зависят форма волны и температура кристаллической решётки. В дальнейшем исследуется эволюция волны с параметром $\alpha_1 = 10000$. Формируемая волна двигается 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. рис. 2) для трёх 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 получаем результаты, совпадающие с результатами, полученными в работе [3]. Численным моделированием установлено, что профили напряжения и температуры кристаллической решётки в первых двух вариантах почти совпадают. Поэтому профили температуры кристаллической решётки и напряжения на рис. 2 приведены только для первого и третьего варианта. Из рис. 2 видно, что в первых двух вариантах температура T_i практически в два раза меньше, чем в третьем варианте. Кроме этого, абсолютное

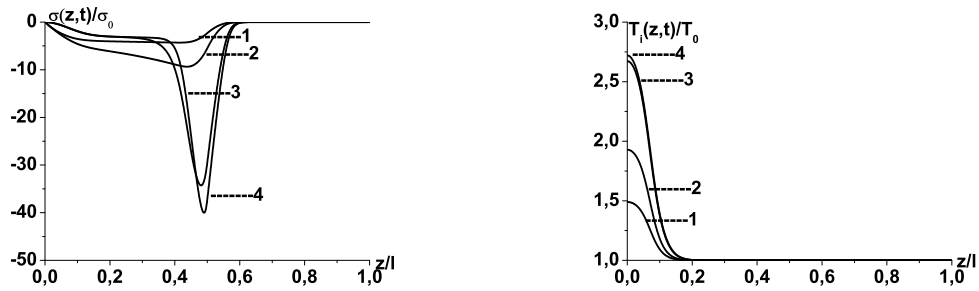


Рис. 1. Профили волны термоупругого напряжения $\sigma(z, t)$ и температуры кристаллической решётки $T_i(z, t)$ в момент времени $t/\tau = 0,00335$ при разных значениях параметра α_1 (1— $\alpha_1 = 200$, 2— $\alpha_1 = 500$, 3— $\alpha_1 = 5000$, 4— $\alpha_1 = 10000$) и $\alpha_2 = 10000$, $\alpha_3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

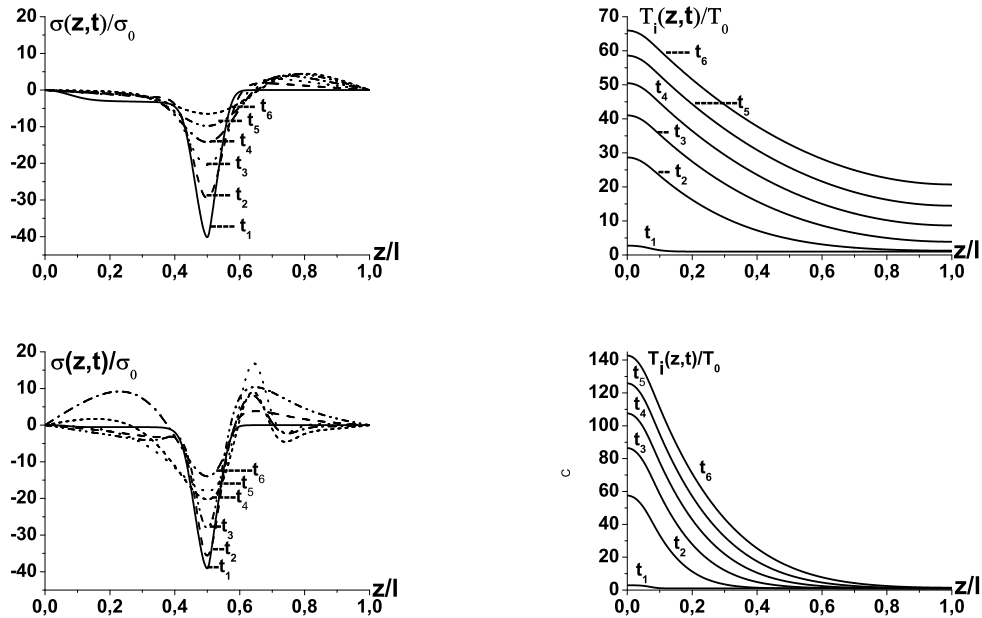


Рис. 2. Профили волны термоупругого напряжения $\sigma(z, t)$ и температуры кристаллической решётки $T_i(z, t)$ в разные моменты времени $t/\tau = t_i$, $i = 1, 2, \dots, 6$ ($t_1 = 0,00335$; $t_2 = 0,186545$; $t_3 = 0,368184$; $t_4 = 0,548357$; $t_5 = 0,727131$; $t_6 = 0,904564$) при наличии ($g > 0$)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

значение минимума термоупругой волны уменьшается, и эволюция формы термоупругой волны в третьем варианте отличается от её 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.

4. 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 стрелке (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 $\bar{\beta}$ имеет малое значение ($\bar{\beta} \simeq 7,36 \cdot 10^{-6}$), тем не менее он оказывает существенное влияние на эволюцию формы термоупругих волн и пренебрегать им нельзя.

Литература

1. *Калиниченко А. И., Лазурик-Эльцуфин В. Т.* Возбуждение акустических колебаний пучками заряженных частиц малой плотности // ЖЭТФ. — 1973. — Т. 65. — С. 2364–2368.
2. *Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М.* Теория упругости. — М.: Наука, 1987. — Т. VII, 248 с.
3. Numerical Simulation of the Thermoelastic Effects in Metals Irradiated by Pulsed Ion Beam / I. V. Amirkhanov, E. V. Zemlyanaya, I. V. Puzynin et al. // JCSME. — 2002. — Vol. 2. — Pp. 213–224.
4. Численное моделирование влияния вязкости на распространение термоупругих волн в образце металла, облучаемого импульсными пучками ионов / И. В. Амирханов, Е. В. Земляная, Т. П. Пузынина и др. // Поверхность, рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. — 2004. — № 10. — С. 92–99.
5. Модельное описание термоупругих напряжений в материалах при облучении тяжёлыми ионами высоких энергий / И. В. Амирханов, А. Ю. Дидык, Д. З. Музафаров и др. — Дубна: Препринт ОИЯИ Р11-2009-138, 2009.

UDC 51-72:538.9

Model Description of Thermoelastic Tensions in Materials Exposed to High Energy Heavy Ions

I. V. Amirkhanov, A. Yu. Didyk, D. Z. Muzafarov, I. V. Puzynin,
T. P. Puzynina, N. R. Sarker, I. Sarhadov, Z. A. Sharipov

*Joint Institute for Nuclear Research
Joliot-Curie 6, 141980 Dubna, Moscow region, Russia*

Our previous studies dealt with the formation and evolution of thermoelastic waves arising in metals under irradiation with pulsed ion beams, within the system of thermoelasticity equations. The present work proposes a numerical research of this phenomenon within a two-temperature model, with introduction of temperature of electrons and a crystal lattice (a thermal spike model). A comparative analysis of the received results with the results of previous research works is presented.

Key words and phrases: thermoelasticity, numerical simulations, ion, thermal spike, wave equation, equation of heat conductivity.