

P11-2009-138

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

**МОДЕЛЬНОЕ ОПИСАНИЕ ТЕРМОУПРУГИХ
НАПРЯЖЕНИЙ В МАТЕРИАЛАХ ПРИ ОБЛУЧЕНИИ
ТЯЖЕЛЫМИ ИОНАМИ ВЫСОКИХ ЭНЕРГИЙ**

Направлено в оргкомитет конференции «РСНЭ-НБИК-2009», Москва,
16–21 ноября 2009 г.

Амирханов И. В. и др.

P11-2009-138

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

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 распространения термоупругих волн, возникающих в металлах под действием импульсных пучков ионов, в рамках двухтемпературной модели с введением температуры электронов и кристаллической решетки (модель термического пика) и представлен сравнительный анализ полученных результатов с результатами предыдущих работ.

Работа выполнена в Лаборатории информационных технологий ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна, 2009

Amirkhanov I. V. et al.

P11-2009-138

Modeling Description of Thermoelastic Stresses in Materials at Irradiation with High Energy Heavy Ions

In the authors' previous works, formation and evolution of thermoelastic waves arising in metals under the action of pulsed ion beams in the framework of a system of thermoelasticity equations were investigated. In the present work, a numerical research of propagation of thermoelastic waves arising in metals under the action of pulsed ion beams in the framework of the two-temperature model taking into account electron gas and lattice temperatures (the thermal spike model) is carried out and a comparative analysis of the obtained results and results of the previous works is made.

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

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna, 2009

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

1. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

В работах [3,4] численно исследована эволюция термоупругих волн, возникающих в материалах под воздействием импульсного пучка ионов. В настоящей работе приведем исходные уравнения термоупругости в рамках модели термического пика. Функция свободной энергии деформированного тела имеет вид [2]

$$F = F_0(T) - K\alpha(T - T_0)U_{ii} + \mu \left(U_{ik} - \frac{1}{3}\delta_{ik}U_{ii} \right)^2 + \frac{K}{2}U_{ii}^2,$$
$$U_{ik} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_k} + \frac{\partial u_k}{\partial x_i} \right),$$

$$K = \frac{E}{3(1-2\delta)}, \quad \mu = \frac{E}{2(1+\delta)},$$

$$-1 < \delta < \frac{1}{2},$$

где δ — число Пуассона, K, μ — соответственно модули всестороннего сжатия и сдвига, E — модуль Юнга, u_i — компонента вектора перемещения \vec{u} , U_{ik} — тензор деформации, $\alpha = 3\alpha_t$ — коэффициент объемного теплового расширения (α_t — коэффициент линейного теплового расширения), δ_{ik} — символ Кронекера, F_0, T_0 — соответственно свободная энергия и начальная температура тела в недеформированном состоянии. По заданной свободной энергии определяются тензор напряжений и энтропия:

$$\sigma_{ik} = \frac{\partial F}{\partial U_{ik}} = -K\alpha(T - T_0)\delta_{ik} + 2\mu \left(U_{ik} - \frac{1}{3}\delta_{ik}U_{ll} \right) + KU_{ll}\delta_{ik},$$

$$S = -\frac{\partial F}{\partial T} = S_0(T) + K\alpha U_{ll},$$

где $S_0(T)$ — энтропия тела в недеформированном состоянии. По σ_{ik} и S составляются уравнения движения и теплопроводности:

$$\rho \frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2} = \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} = -K\alpha \frac{\partial T}{\partial x_i} + \left(K + \frac{\mu}{3} \right) \frac{\partial^2 u_l}{\partial x_i \partial x_l} + \mu \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j^2},$$

$$T \frac{\partial S}{\partial t} = T \left(\frac{\partial S_0}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial t} + K\alpha \frac{\partial U_{ll}}{\partial t} \right) = \nabla(\lambda \nabla T) + Q, \quad \frac{\partial S_0}{\partial T} = \frac{C_v}{T}.$$

Здесь C_v — теплоемкость тела при постоянном объеме, Q — функция источника. Повторяя эту процедуру для второго уравнения системы (1), (2) и учитывая, что $Q = A(\vec{r}, t) + g(T_e - T_i)$, приходим к следующей системе уравнений ($\vec{r} = (x, y, z)$):

$$C_e \frac{\partial T_e}{\partial t} = \nabla(\lambda_e \nabla T_e) - g(T_e - T_i) + A_e(\vec{r}, t), \quad (3)$$

$$C_i \frac{\partial T_i}{\partial t} + KT_i \alpha \frac{\partial}{\partial t} \text{div} \vec{u} = \nabla(\lambda_i \nabla T_i) + g(T_e - T_i) + A_i(\vec{r}, t), \quad (4)$$

$$\rho \frac{\partial^2 \vec{u}}{\partial t^2} = -K\alpha \nabla T_i + \left(K + \frac{\mu}{3} \right) \nabla \text{div} \vec{u} + \mu \nabla^2 \vec{u}. \quad (5)$$

Эта система описывает термоупругие эффекты, возникающие в металлах, в рамках модели термического пика. При описании термоупругих эффектов под действием импульсных пучков ионов в тонком образце металла, как и в работах [3,4], будем исходить из системы (3)–(5) в одномерном приближении с добавлением начальных и граничных условий:

$$C_e \frac{\partial T_e}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda_e \frac{\partial T_e}{\partial z} \right) - g(T_e - T_i) + A_e(z, t), \quad (6)$$

$$C_i \frac{\partial T_i}{\partial t} + K T_i \alpha \frac{\partial^2 u}{\partial t \partial z} = \frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda_i \frac{\partial T_i}{\partial z} \right) + g(T_e - T_i) + A_i(z, t), \quad (7)$$

$$\rho \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = -K \alpha \frac{\partial T_i}{\partial z} + \left(K + \frac{4\mu}{3} \right) \frac{\partial^2 u}{\partial z^2}, \quad (8)$$

$$\sigma = -K \alpha (T_i - T_0) + \left(K + \frac{4\mu}{3} \right) \frac{\partial u}{\partial z}, \quad (9)$$

$$u(z, 0) = 0, \quad u_t(z, 0) = 0, \quad T_{e,i}(z, 0) = T_0, \quad (10)$$

$$\sigma(z, t)|_{z=0,l} = \left[-K \alpha (T_i - T_0) + \left(K + \frac{4\mu}{3} \right) \frac{\partial u}{\partial z} \right]_{z=0,l} = 0, \quad (11)$$

$$\frac{\partial T_{e,i}}{\partial z} \Big|_{z=0,l} = 0.$$

Здесь l — толщина образца. Начальные и граничные условия (10), (11) означают, что образец вначале находился в недеформированном состоянии, температуры кристаллической решетки и электронного газа в металле равны комнатной температуре T_0 , а границы образца теплоизолированы и свободны. В работах [3, 4] термоупругие эффекты исследовались не в переменной перемещения $u(z, t)$, а в переменной напряжения $\sigma(z, t)$.

Для сохранения преемственности, следуя работам [3, 4], систему (6)–(11) перепишем в переменной $\sigma(z, t)$:

$$C_e \frac{\partial T_e}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda_e \frac{\partial T_e}{\partial z} \right) - g(T_e - T_i) + A_e(z, t), \quad (12)$$

$$(C_i + T_i p) \frac{\partial T_i}{\partial t} = -\beta T_i \frac{\partial \sigma}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda_i \frac{\partial T_i}{\partial z} \right) + g(T_e - T_i) + A_i(z, t), \quad (13)$$

$$\frac{\partial^2 \sigma}{\partial t^2} = v_s^2 \frac{\partial^2 \sigma}{\partial z^2} - \gamma \frac{\partial^2 T_i}{\partial t^2}, \quad (14)$$

$$\sigma(z, 0) = 0, \quad \sigma_t(z, 0) = 0, \quad T_{e,i}(z, 0) = T_0, \quad (15)$$

$$\sigma(z, t)|_{z=0,l} = 0, \quad \frac{\partial T_{e,i}}{\partial z} \Big|_{z=0,l} = 0.$$

Здесь

$$p = \frac{\alpha^2 K^2}{K + 4\mu/3}, \quad \beta = \frac{\alpha K}{K + 4\mu/3}, \quad \gamma = K \alpha, \quad v_s^2 = \frac{K + 4\mu/3}{\rho}.$$

Функции источников $A_{e,i}(z, t)$, описывающие влияние пучка заряженных частиц на образец, определяются следующим выражением:

$$A_{e,i}(z, t) = b \mu_{e,i}(z) \frac{j(t)}{Z e},$$

где Ze — заряд иона, $\mu_{e,i}$ соответственно определяют потери энергии иона пучка на единице длины при торможении его электронным газом (μ_e) и ионами кристаллической решетки (μ_i), $j(t)$ — временная зависимость плотности тока пучка. Константа b определяется из условия нормировки:

$$b \int_0^l [\mu_e(z) + \mu_i(z)] dz = E_0,$$

здесь E_0 — энергия иона.

Систему уравнений (12)–(15) переводим в безразмерную форму, переходя к безразмерным величинам и независимым переменным по формулам

$$\bar{t} = \frac{t}{\tau}, \quad \bar{z} = \frac{z}{l}, \quad \bar{T}_e = \frac{T_e}{T_0}, \quad \bar{T}_i = \frac{T_i}{T_0}, \quad \bar{\sigma} = \frac{\sigma}{\sigma_0}, \quad \bar{\mu}_{e,i} = \frac{\mu_{e,i}}{\mu_0}, \quad \mu_0 = \frac{E_0}{l},$$

где τ — время действия источника на образец.

Тогда исходная система принимает следующий вид:

$$\frac{\partial \bar{T}_e}{\partial \bar{t}} = k_e \frac{\partial^2 \bar{T}_e}{\partial \bar{z}^2} - g_e(\bar{T}_e - \bar{T}_i) + \bar{A}_e(\bar{z}, \bar{t}), \quad (16)$$

$$(1 + \bar{T}_i \bar{p}) \frac{\partial \bar{T}_i}{\partial \bar{t}} = -\bar{\beta} \frac{\partial \bar{\sigma}}{\partial \bar{t}} \bar{T}_i + k_i \frac{\partial^2 \bar{T}_i}{\partial \bar{z}^2} + g_i(\bar{T}_e - \bar{T}_i) + \bar{A}_i(\bar{z}, \bar{t}), \quad (17)$$

$$\frac{\partial^2 \bar{\sigma}}{\partial \bar{t}^2} = \bar{v}_s^2 \frac{\partial^2 \bar{\sigma}}{\partial \bar{z}^2} - \bar{\gamma} \frac{\partial^2 \bar{T}_i}{\partial \bar{t}^2}, \quad (18)$$

$$\bar{\sigma}(\bar{z}, 0) = 0, \quad \bar{\sigma}_{\bar{t}}(\bar{z}, 0) = 0, \quad \bar{T}_e(\bar{z}, 0) = \bar{T}_i(\bar{z}, 0) = 1, \quad (19)$$

$$\bar{\sigma}(\bar{z}, \bar{t})|_{\bar{z}=0,1} = 0, \quad \left. \frac{\partial \bar{T}_e}{\partial \bar{z}} \right|_{\bar{z}=0,1} = \left. \frac{\partial \bar{T}_i}{\partial \bar{z}} \right|_{\bar{z}=0,1} = 0. \quad (20)$$

Здесь безразмерные константы k_ν , g_ν ($\nu = e, i$), $\bar{\beta}$, \bar{p} , \bar{v}_s^2 , $\bar{\gamma}$ определяются формулами

$$k_\nu = \frac{\lambda_\nu \tau}{C_\nu l^2}, \quad g_\nu = \frac{g_\nu \tau}{C_\nu}, \quad \bar{\beta} = \frac{\beta \sigma_0}{C_i},$$

$$\bar{p} = \frac{T_0 p}{C_i}, \quad \bar{v}_s^2 = \frac{v_s^2 \tau^2}{l^2}, \quad \bar{\gamma} = \frac{\gamma T_0}{\sigma_0}.$$

Безразмерные функции источников $\bar{A}_e(\bar{z}, \bar{t})$, $\bar{A}_i(\bar{z}, \bar{t})$ перепишем в следующем виде:

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

Здесь безразмерная функция $f(\bar{t})$ введена посредством соотношения $j(\bar{t}) = j_0 f(\bar{t})$, а константа b в новых переменных вычисляется по формуле

$$b = \frac{1}{\int_0^1 [\bar{\mu}_e(\bar{z}) + \bar{\mu}_i(\bar{z})] d\bar{z}}.$$

Параметры модели $C_e, C_i, g, \lambda_e, \lambda_i, \rho, E, \alpha$ берем при комнатной температуре $T_0 = 300$ К для железа ($\delta = 0, \sigma_0 = 2,2 \cdot 10^6$ Па):

$$\begin{aligned} C_e &= 2,733 \cdot 10^4 \text{ Дж}/(\text{м}^3\text{К}), & C_i &= 3588720 \text{ Дж}/(\text{м}^3\text{К}), \\ g &= 4,05 \cdot 10^{18} \text{ Вт}/(\text{м}^3\text{К}), & \lambda_e &= 410 \text{ Вт}/(\text{мК}), & \lambda_i &= 78,2 \text{ Вт}/(\text{мК}), \\ \rho &= 7870 \text{ кг}/\text{м}^3, & E &= 202 \cdot 10^9 \text{ Па}, & \alpha &= 36 \cdot 10^{-6} \text{ К}^{-1}. \end{aligned}$$

Как и в работе [3], параметры пучка следующие:

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

Толщина образца $l = 10^{-5}$ м, глубина проникновения ионов $R_0 = 7 \cdot 10^{-7}$ м ($\bar{z}_0 = R_0/l$).

При приведенных величинах безразмерные параметры k_ν, g_ν ($\nu = e, i$), $\bar{\beta}, \bar{p}, \bar{v}_s^2, \bar{\gamma}, A_{0e}, A_{0i}, t_0, z_0$ принимают значения

$$\begin{aligned} k_e &\simeq 45, & k_i &\simeq 6,54 \cdot 10^{-2}, & g_e &\simeq 44456641,05, & g_i &\simeq 338560,82, \\ \bar{\beta} &\simeq 7,36 \cdot 10^{-6}, & \bar{p} &\simeq 2,43 \cdot 10^{-3}, & \bar{v}_s &\simeq 152, & \bar{\gamma} &\simeq 330,54, \\ A_{0e} &\simeq 5488,47, & A_{0i} &\simeq 41,80, & t_0 &= 1, & z_0 &= 0,07. \end{aligned}$$

В данной работе функции $f(\bar{t})$ и $\bar{\mu}_{e,i}(\bar{z})$ задаем феноменологически (как и в предыдущих работах [3,4]),

$$f(\bar{t}) = \frac{1 - e^{-\alpha_1 \bar{t}}}{1 + e^{\alpha_2(\bar{t} - \bar{t}_0)}}, \quad \bar{\mu}_{e,i}(\bar{z}) = \frac{1}{1 + e^{\alpha_3(\bar{z} - \bar{z}_0)}}, \quad (21)$$

где константы α_1, α_2 соответственно определяют скорости включения и выключения источника при $\bar{t} = 0$ и $\bar{t} = \bar{t}_0$, а α_3 — скорость потери энергии ионов пучка внутри мишени.

В дальнейшем черту над безразмерными переменными опускаем, но над постоянными безразмерными коэффициентами оставляем.

2. МЕТОД ЧИСЛЕННОГО РЕШЕНИЯ

Введем равномерную сетку по переменным z, t , т.е. положим $\{z_k = kh \ (k = 0, 1 \dots m), t_j = jh_t \ (j = 0, 1 \dots n)\}$; h и h_t — соответственно

шаги по переменным z и t , $f_k^j = f(z_k, t^j)$. Для решения системы уравнений (16)–(20) будем использовать следующую конечно-разностную схему порядка аппроксимации $O(h_t + h^2)$ [5–7]:

$$\frac{T_{ek}^{j+1} - T_{ek}^j}{h_t} = k_e \Lambda_k T_e^{j+1} - g_e (T_{ek}^{j+1} - T_{ik}^{j+1}) + A_{ek}^j, \quad (22)$$

$$(1 + \bar{p} T_{ik}^j) \frac{T_{ik}^{j+1} - T_{ik}^j}{h_t} = -\bar{\beta} T_{ik}^j \frac{\sigma_k^{j+1} - \sigma_k^j}{h_t} + k_i \Lambda_k T_{ik}^{j+1} + g_i (T_{ek}^{j+1} - T_{ik}^{j+1}) + A_{ik}^j, \quad (23)$$

$$\frac{\sigma_k^{j+1} - 2\sigma_k^j + \sigma_k^{j-1}}{h_t^2} = \bar{v}_s^2 \Lambda_k \sigma^j - \bar{\gamma} \frac{T_{ik}^{j+1} - 2T_{ik}^j + T_{ik}^{j-1}}{h_t^2}, \quad (24)$$

$$k = 1, 2 \dots m - 1, \quad j = 0, 1 \dots n - 1, \quad \Lambda_k U = \frac{U_{k+1} - 2U_k + U_{k-1}}{h^2},$$

$$T_{ek}^{-1} = T_{ek}^0 = T_{ik}^{-1} = T_{ik}^0 = 1, \quad \sigma_k^{-1} = \sigma_k^0 = 0, \quad k = 0, 1 \dots m, \quad (25)$$

$$\sigma_0^j = 0, \quad \frac{4T_{e1}^j - T_{e2}^j - 3T_{e0}^j}{2h} = 0, \quad \frac{4T_{i1}^j - T_{i2}^j - 3T_{i0}^j}{2h} = 0, \quad (26)$$

$$\sigma_m^j = 0, \quad \frac{4T_{em-1}^j - T_{em-2}^j - 3T_{em}^j}{2h} = 0, \quad \frac{4T_{im-1}^j - T_{im-2}^j - 3T_{im}^j}{2h} = 0, \quad (27)$$

$$j = 0, 1 \dots n.$$

Эта схема получена из дискретных записей уравнений (16), (17) в неявных формах и уравнения (18) — в явной форме. Условия устойчивости волнового уравнения (18), написанного в явном или неявном дискретных видах, совпадают с условием Куранта $\bar{v}_s h_t / h < 1$. Поэтому для простоты уравнение (18) в дискретной форме написано в явном виде. Иначе пришлось бы решать матричное уравнение для трех величин T_{ek}^{j+1} , T_{ik}^{j+1} , σ_k^{j+1} . При решении дискретной системы уравнений (22)–(24) с начальными условиями (25) и граничными условиями (26), (27) поступаем следующим образом. С помощью уравнения (24) исключаем σ_k^{j+1} из уравнения (23). Тогда полученную систему для T_{ek}^{j+1} , T_{ik}^{j+1} решаем методом матричной прогонки, а потом по известной T_{ik}^{j+1} находим σ_k^{j+1} .

При использовании явной схемы, которая получается из уравнений (22)–(27) путем замены в правых частях уравнений (22)–(24) значений температур T_{ek}^{j+1} , T_{ik}^{j+1} на их значения в j -м слое T_{ek}^j , T_{ik}^j , для удовлетворения условия устойчивости пришлось бы вести вычисления с очень маленькими

шагами по времени $h_t \simeq 10^{-8}$, что нецелесообразно с точки зрения ведения численных экспериментов.

При вычислении по схеме (22)–(27) шаг по времени h_t выбирается только из соблюдения условия Куранта [5, 7]:

$$\bar{v}_s h_t / h < 1. \quad (28)$$

3. ПРОВЕРКА ТОЧНОСТИ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ СХЕМЫ

Для проверки точности схемы (22)–(27) проводился численный эксперимент на вдвое сгущающихся сетках при начальных шагах $h = 0,001$ и $h_t = 10^{-6}$ для случая, когда потеря энергии иона учитывается только на ионах кристаллической решетки ($g \neq 0$, $A_e = 0$, $A_i \neq 0$, $b \simeq 14,286$, $\alpha_1 = \alpha_2 = 10000$, $\alpha_3 = 200$, $z_0 = 0,07$). Вычисления на сетках с шагами h , $h/2$ и $h/4$ дали близкие результаты. Так, максимальные отклонения для температур и напряжений в момент времени $t = 0,043$ равны соответственно

$$\begin{aligned} \Delta_1 T_e &= \max |T_{eh}(z, t) - T_{eh/2}(z, t)| = 5,37 \cdot 10^{-5} \text{ при } z = 0,043, \\ \Delta_1 T_i &= \max |T_{ih}(z, t) - T_{ih/2}(z, t)| = 5,37 \cdot 10^{-5} \text{ при } z = 0,043, \\ \Delta_1 \sigma &= \max |\sigma_h(z, t) - \sigma_{h/2}(z, t)| = 0,455 \text{ при } z = 0,525, \\ \Delta_2 T_e &= \max |T_{eh/2}(z, t) - T_{eh/4}(z, t)| = 1,33 \cdot 10^{-5} \text{ при } z = 0,043, \\ \Delta_2 T_i &= \max |T_{ih/2}(z, t) - T_{ih/4}(z, t)| = 1,33 \cdot 10^{-5} \text{ при } z = 0,043, \\ \Delta_2 \sigma &= \max |\sigma_{h/2}(z, t) - \sigma_{h/4}(z, t)| = 0,115 \text{ при } z = 0,531. \end{aligned}$$

Как видно, при уменьшении шага h максимальные отклонения уменьшаются, т. е. наблюдается сходимость. Отношения Δ_1/Δ_2 для всех приведенных величин (T_e , T_i , σ) являются величинами порядка 2^p , $p = 2$, что подтверждает порядок аппроксимации схемы $O(h^2)$. В дальнейшем численные эксперименты проводим при шагах $h_t = 10^{-6}$, $h = 5 \cdot 10^{-4}$.

4. 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 (22)–(27) 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 решетки.

$$g \neq 0, A_e = 0, A_i \neq 0$$

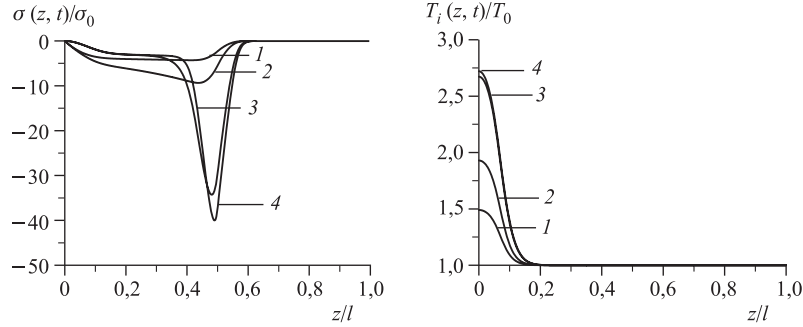


Рис. 1. Профили волны термоупругого напряжения $\sigma(z, t)$ и температуры кристаллической решетки $T_i(z, t)$ в момент времени $t/\tau = 0,00335$ при разных значениях параметров α_1 (1 — $\alpha_1 = 200$, 2 — $\alpha_1 = 500$, 3 — $\alpha_1 = 5000$, 4 — $\alpha_1 = 10000$), $\alpha_2 = 10000$, $\alpha_3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

На рис.2 представлены решения задачи для разных моментов времени $t_k/\tau = k \cdot 0,45/\bar{v}_s$ ($k = 1, 2, 3, 4$) при $g \neq 0, A_e = 0, A_i \neq 0$. Из рис.2 видно, что формируемая волна движется от левой границы вправо, достигая границы, переворачивается (меняет свой знак) и продолжает двигаться в обратном направлении к другой границе и т.д. Таким образом, волна все время крутится против часовой стрелки. При малых значениях времени форма волны практически не меняется.

$$g \neq 0, A_e = 0, A_i \neq 0$$

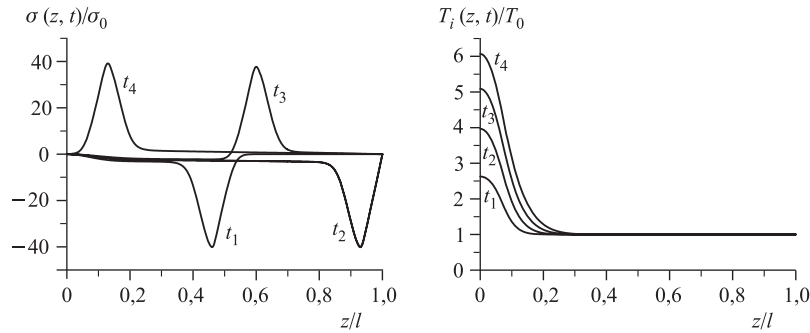


Рис. 2. Профили волны термоупругого напряжения $\sigma(z, t)$ и температуры кристаллической решетки $T_i(z, t)$ в разные моменты времени $t/\tau = k \cdot 0,45/\bar{v}_s$, $k = 1, 2, 3, 4$ ($b \simeq 14, 286$, $\alpha_1 = \alpha_2 = 10000$, $\alpha_3 = 200$, $z_0 = 0,07$)

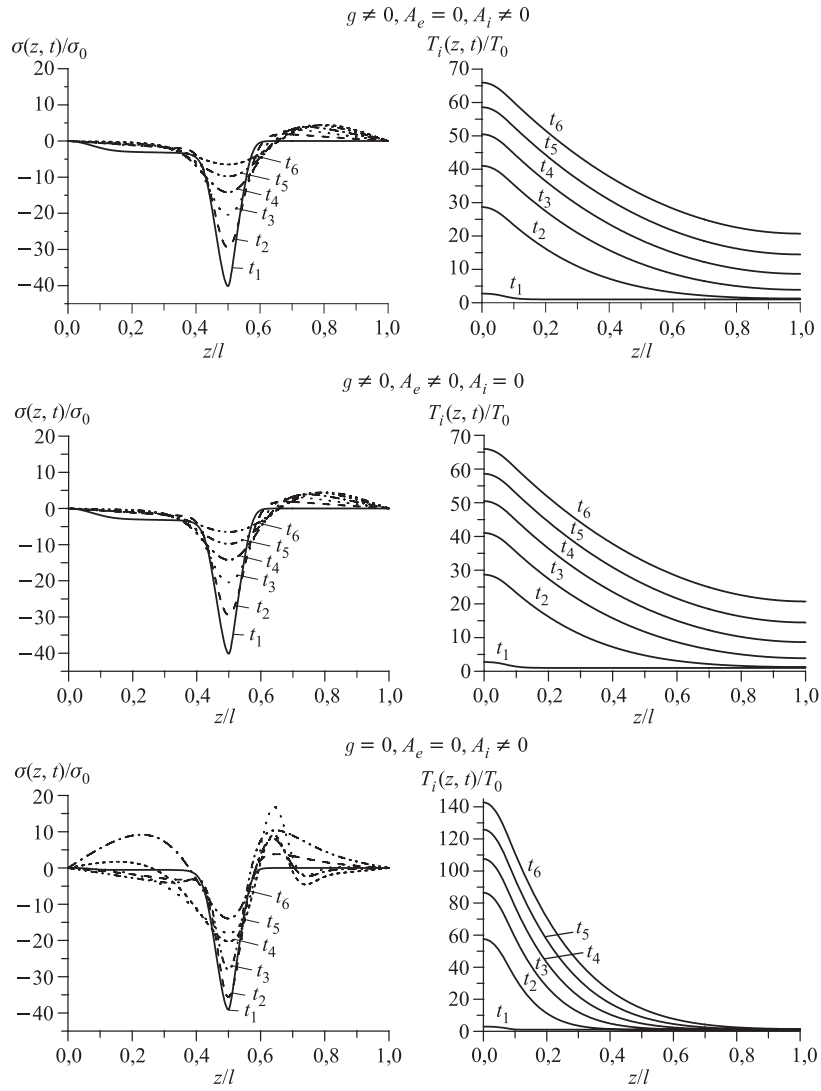


Рис. 3. Профили волны термоупругого напряжения $\sigma(z, t)$ и температуры кристаллической решетки $T_i(z, t)$ в разные моменты времени $t/\tau = t_i$, $i = 1, 2 \dots 6$ ($t_1 = 0,00335$, $t_2 = 0,186545$, $t_3 = 0,368184$, $t_4 = 0,548357$, $t_5 = 0,727131$, $t_6 = 0,904564$) при наличии ($g > 0$) и отсутствии ($g = 0$) теплообмена между подсистемами при разных способах учета потери энергии иона

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 $z = 0,5$ (середина образца).

На рис. 3 представлены результаты решения задачи для упомянутых шести моментов времени $t/\tau = t_i$, $i = 1, 2 \dots 6$ ($t_1 = 0,00335$, $t_2 = 0,186545$, $t_3 = 0,368184$, $t_4 = 0,548357$, $t_5 = 0,727131$, $t_6 = 0,904564$), для трех различных наборов 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 третьем варианте эквивалентен решению системы двух уравнений термоупругости, и мы получаем результаты, совпадающие с результатами работы [3].

Из рис. 3 видно, что в первых двух вариантах значения температуры T_i практически в два раза меньше, чем в третьем варианте. Кроме этого, абсолютное значение минимума термоупругой волны уменьшается, и эволюция формы термоупругой волны в третьем варианте отличается от ее эволюций в первых двух вариантах.

Так как $g \gg 1$, а коэффициенты k_e и k_i принимают небольшие значения, то температуры T_e и T_i практически совпадают, а именно $\max |T_e(z, t) - T_i(z, t)| \simeq 1,6 \cdot 10^{-3}$ при $z = 0$, $t \sim 1$. Поэтому на рис. 3 значения температуры электронного газа не приведены.

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

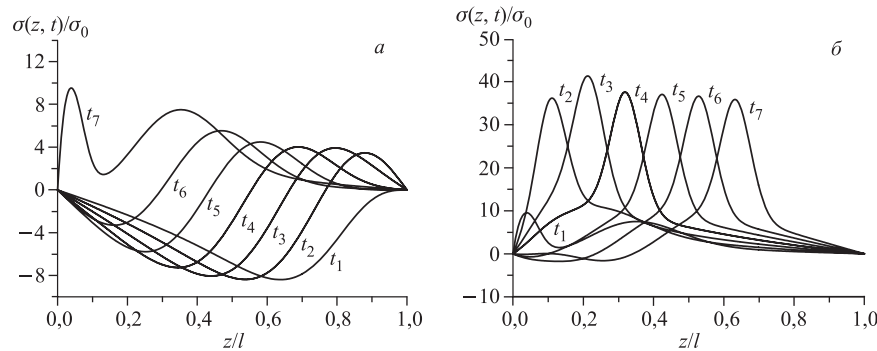


Рис. 4. Профили волн термоупругих напряжений $\sigma(z, t)$ до ($t_k/\tau = 1 - (7 - k)\Delta t$, $\Delta t = 0,1v_s$) и после выключения источника ($t_k/\tau = 1 + (k - 1)\Delta t$), $k = 1, 2 \dots 7$

разные моменты времени. На рис. 4 приведены профили термоупругих напряжений до (рис. 4, *a*) и после (рис. 4, *б*) выключения источника через промежутки времени $\Delta t/\tau = 0,1/v_s$. Как видно, в момент прихода «старой» волны к границе $z = 0$, когда источник выключается, начинается формирование «новой» волны (момент t_7 на рис. 4, *a*), и потом ее амплитуда растёт (моменты времени t_1-t_7 на рис. 4, *б*).

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе на основе модели термического пика проведено численное моделирование термоупругих эффектов, возникающих в материалах под действием импульсных пучков ионов. Из полученных результатов можно сделать следующие выводы:

1) под действием импульсных пучков ионов в образце формируются два типа термоупругих волн: в первом волна движется против часовой стрелки (волна включения), а в другом — по часовой стрелке (волна выключения). Формы этих волн зависят от скорости изменений тока в моменты включения (α_1) и выключения источника (α_2),

2) электронный газ существенно влияет и на эволюцию термоупругих волн, и на диффузию тепла в материалах,

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

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

ЛИТЕРАТУРА

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. Amir Khanov I. V., Zemlyanaya E. V., Puzynin I. V., Puzynina T. P., Sarhadov I. Numerical Simulation of the Thermoelastic Effects in Metals Irradiated by Pulsed Ion Beam // JCSME. 2002. V. 2, No. 1s–2s. P. 213–224.
4. Амирханов И. В., Земляная Е. В., Пузынина Т. П., Пузынин И. В., Саркар Н. Р., Сархатов И. Численное моделирование влияния вязкости на распространение термоупругих волн в образце металла, облучаемого импульсными пучками ионов // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 2004. № 10. С. 92–99.
5. Самарский А. А. Теория разностных схем. М.: Наука, 1983. С. 258–276.
6. Самарский А. А., Гулин А. В. Устойчивость разностных схем. М.: Наука, 1973. С. 308–338.
7. Турчак Л. И. Основы численных методов. М.: Наука, 1987. С. 277–284.

Получено 14 сентября 2009 г.

Редактор *А. И. Петровская*

Подписано в печать 10.12.2009.

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

Усл. печ. л. 0,87. Уч.-изд. л. 0,99. Тираж 320 экз. Заказ № 56824.

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

E-mail: publish@jinr.ru

www.jinr.ru/publish/