

# ЧИСЛЕННОЕ ОПИСАНИЕ ПРОЦЕССОВ ГЕНЕРАЦИИ ВОЛНОВОГО ВОЗМУЩЕНИЯ, ОБУСЛОВЛЕННОГО ВОЗДЕЙСТВИЕМ НА МЕТАЛЛИЧЕСКУЮ МИШЕНЬ ИМПУЛЬСНОГО ЭНЕРГЕТИЧЕСКОГО ПОТОКА

*В.И. Бойко, Ю.В. Данейкин, К.В. Юшицин  
Политехнический институт, г. Томск, Россия*

Представлены результаты моделирования с помощью формализма Эйлера динамики параметров алюминиевой мишени под воздействием мощного ионного пучка. Предложен новый подход к постановке начальных и граничных условий, основанный на использовании энергетического критерия стационарного состояния системы.

## 1. ВВЕДЕНИЕ

В исследованиях в области модификации свойств материалов с применением радиационно-пучковых технологий большое значение имеет компьютерное моделирование. В частности, интерес представляют [1]:

- расчеты температурных полей при различных видах воздействия и выбор режима обработки;
- расчеты распределений механических и термических напряжений по объему мишени;
- моделирование процессов плазмообразования на поверхности мишени с учетом ее разлета, формирования импульса отдачи и других сопровождающих процессов.

Для численного решения этих задач применяются различные модели сплошной среды. Существует два принципиально разных подхода – эйлеров и лагранжеев формализм рассмотрения динамики сплошной среды. Кроме того, модели отличаются различной степенью подробности описания термодинамических свойств реального вещества. Большое значение при разработке модели имеют вопросы, связанные с корректным описанием процессов преобразования концентрированного потока энергии (КПЭ) во внутреннюю энергию вещества мишени. При этом необходимо учитывать амплитудно-временные параметры импульсного воздействия, характерные для реальных пучков заряженных частиц, кластеров и потоков плазмы.

Задача моделирования системы «КПЭ – конденсированное вещество» является многопараметрической. При формировании модели необходимо учитывать, что динамика термодинамических параметров мишени обусловлена мощным неоднородным энерговыделением в локальной пограничной области, размер которой значительно меньше толщины мишени. При этом уровень энерговыделения может обуславливать интенсивное развитие фазовых переходов. В рамках одной модели необходимо одновременное описание процессов, протекающих в веществе мишени, находящемся в различных агрегатных состояниях. Интенсивное энергетическое воздей-

ствие на сплошную среду может вызывать генерацию ударно-волновых процессов.

## 2. ХАРАКТЕРИСТИКА ОБЪЕКТА И МЕТОДОВ МОДЕЛИРОВАНИЯ

Выбор базовых принципов, заложенных в основу модели, описывающей процессы в системе «КПЭ – конденсированное вещество», может основываться на следующем.

Размерность задачи определяется геометрическими параметрами мишени в сравнении с поперечными размерами пучка частиц или плазменной струи. Если радиус последних существенно превышает толщину мишени, то хорошим приближением является одномерная постановка задачи. Однако в ряде случаев плотность потока частиц неравномерна по радиусу, либо в технологических целях применяются сфокусированные КПЭ. В этом случае необходима двухмерная постановка.

Малые размеры области энерговыделения при воздействии на мишень КПЭ по сравнению с ее толщиной обуславливают необходимость применения неравномерных сеток. Это позволяет существенно уменьшить затраты машинной памяти и процессорного времени. При этом с целью детализации профиля в области энерговыделения необходимы ячейки с размером порядка  $10^{-6}$  м. Вне области энерговыделения размер ячеек можно постепенно увеличивать. При этом отличие двух соседних ячеек на 3...5% существенно не влияет на точность расчета.

С точки зрения построения экономичной (по затратам памяти и времени расчета) расчетной схемы, предпочтительно использование уравнений динамики сплошной среды в форме Эйлера.

Однако устойчивость эйлеровых расчетных схем сильно зависит от градиентов термодинамических параметров, в частности, давления. Поэтому при описании ударных волн (разрывов термодинамических параметров) необходимо в уравнение движения вводить диссипативные члены – искусственную вязкость [2]. Эйлеровы модели не позволяют четко выделить границу вещества, определять положение границы между газовой и конденсированной фазами. Например, метод крупных частиц (МКЧ) допускает лишнее физическое смысла перетекание ве-

щества из конденсированной области в газоплазменную [3].

Расчетные схемы, построенные на уравнениях в форме Лагранжа, обладают большей устойчивостью. Например, лагранжевый метод Годунова построен на решении задачи о распаде произвольного гидродинамического разрыва [4]. Это позволяет получать устойчивые решения при наличии в объеме мишени разрывов термодинамических параметров, обусловленных генерацией ударных волн, границ раздела фаз и др.

К основным недостаткам лагранжевых моделей можно отнести искажение ячеек расчетного поля при пересчете в эйлеровы координаты. При плазмообразовании на поверхности мишени и интенсивном ее разлете лагранжевы ячейки в области энерговыделения имеют очень большие эйлеровы размеры, что существенно снижает точность расчета.

Систему уравнений динамики сплошной среды необходимо замкнуть уравнением состояния вещества. Последнее должно корректно описывать связь термодинамических параметров в широком диапазоне фазовой диаграммы. При этом необходимо минимизировать затраты на вычисление функций состояния.

Приемлемым является использование уравнения состояния в виде таблиц. Линейно-логарифмическая интерполяция между узлами таблицы обеспечивает достаточную точность. Особенно хорошие результаты получаются при применении в таблицах неравномерного шага с детализацией параметров в области конденсированных и переходных состояний, где термодинамические функции сильно меняются.

Конечно, разностное представление краевой задачи подразумевает постановку граничных условий (ГУ) введением слоев фиктивных ячеек. Конкретный вид аппроксимации ГУ влияет на точность и скорость сходимости численного метода, а также на устойчивость конечно-разностной схемы [5].

В конденсированной среде ГУ играют важную роль, например, при выведении поверхности металла или вязкой жидкости из состояния равновесия силы поверхностного натяжения стремятся вернуть границу в прежнее состояние. В результате возникает возмущение, распространяющееся в виде волны по объему мишени [6].

### 3. МОДЕЛЬ УПРУГОПЛАСТИЧЕСКОЙ СРЕДЫ

Нестационарные процессы энергомассопереноса в объеме металлической мишени при импульсном энерговыделении описывались системой уравнений динамики сплошной среды, отражающих законы сохранения массы, импульса и энергии. В каждой точке сплошной среды напряженное состояние характеризуется симметричным тензором напряжений

$$T_H = \begin{pmatrix} \sigma_x & \tau_{xy} & \tau_{xz} \\ \tau_{yx} & \sigma_y & \tau_{yz} \\ \tau_{zx} & \tau_{zy} & \sigma_z \end{pmatrix},$$

где  $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$  — нормальные;  $\tau_{xy} = \tau_{yx}, \tau_{zx} = \tau_{xz}, \tau_{yz} = \tau_{zy}$  — касательные напряжения на площадках, перпендикулярных к координатным осям  $x, y, z$ . Тензор напряжения можно разделить на две составляющие: шаровой тензор, описывающий гидростатическое напряжение (среднее давление в точке  $P$  с обратным знаком), которое анизотропно; девиатор напряжений, характеризующий касательные напряжения в данной точке [7]

$$T_H^0 = \begin{pmatrix} \sigma_x - p & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_y - p & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_z - p \end{pmatrix};$$

$$D_H = \begin{pmatrix} \sigma_x + p & \tau_{xy} & \tau_{xz} \\ \tau_{yx} & \sigma_y + p & \tau_{yz} \\ \tau_{zx} & \tau_{zy} & \sigma_z + p \end{pmatrix},$$

тогда  $T_H = T_H^0 + D_H$ .

Часто при моделировании процессов в системе «КПЭ — металл» пренебрегают гидростатическим давлением в термоупругой задаче (при малых плотностях подводимой энергии) и девиатором напряжений при гидродинамическом подходе к описанию динамики параметров среды. При промежуточных плотностях мощности внешнего воздействия вещество мишени существует во всех агрегатных состояниях, и в нашей модели мы использовали обе составляющие тензора напряжений. Это позволило описать переход металла из упругого состояния в пластическое (по условию текучести Мизеса), при этом получив эффект расщепления упругой и пластической волн [8].

В свою очередь, гидростатическое давление  $p$ , а также удельная внутренняя энергия  $\varepsilon$  подразделяются на упругие и тепловые составляющие. Первые  $p_s, \varepsilon_s$  связаны исключительно с силами межатомного взаимодействия, не зависят от температуры. Вторые  $p_T, \varepsilon_T$  обусловлены тепловым движением атомов, являясь функциями температуры  $T$  и плотности  $\rho$ :

$$p(\rho, T) = p_s(\rho) + p_T(\rho, T), \\ \varepsilon(\rho, T) = \varepsilon_s(\rho) + \varepsilon_T(\rho, T).$$

Такой подход позволяет учитывать преодоление сил межатомного взаимодействия при расширении вещества и фазовых переходах. Упругие и тепловые составляющие определялись по широкодиапазонному уравнению состояния.

При нормальных условиях сплошная среда находится в невозмущенном стационарном состоянии, и должен выполняться энергетический критерий устойчивого равновесного состояния — потенциальная энергия минимальна. Этот принцип положен в основу задания начальных и граничных условий в нашей модели.

В металлах, находящихся в твердом и жидком состояниях, упругая и тепловая составляющие внутренней энергии сравнимы. Функция полной внутренней энергии всегда имеет экстремум

(минимум). При подведении к системе энергии, значительно превышающей энергию сублимации (металл переходит в газоплазменное состояние), минимум смещается к бесконечности. Численным путем установлено, что с высокой степенью точности (не хуже точности численного определения экстремума) в точке минимума упругая компонента давления равна тепловой, а полное давление равно нулю. Например, для алюминия на адиабате, проходящей через точку  $\rho = 2,71 \text{ г/см}^3$  (теоретическая плотность алюминия) и  $T = 300 \text{ К}$ , получены параметры среды в точке минимума:  $p = 0$ ;  $T = 293 \text{ К}$ ;  $\rho = 2,68 \text{ г/см}^3$  (последнее значение соответствует справочным данным для алюминия при нормальных условиях), которые принимались в качестве начальных условий.

При внесении в систему энергии вещество испытывает тепловое расширение и стремится к новому стационарному состоянию. Подведенная энергия переходит в кинетическую энергию расширяющегося вещества, в тепловую и упругую составляющие внутренней энергии. В рамках нашей модели новое стационарное состояние соответствует минимуму полной внутренней энергии, а параметры в точке минимума определяют граничные условия (граница раздела «вещество–вакуум»). При этом полное давление на границе равно нулю, а плотность, температура, внутренняя энергия и скорость движения границы определяются из условия адиабатического расширения вещества. Такой подход позволяет более корректно определять все параметры состояния в фиктивной ячейке.

#### 4. РЕЗУЛЬТАТЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Рассмотрим результаты моделирования динамики параметров алюминиевой мишени под воздействием мощного ионного пучка (МИП), при которых 60% составляют протоны, а 40% – ионы углерода. Использовались следующие параметры пучка:  $U_{\max} = 660 \text{ кэВ}$ ;  $J_{\max} = 0,5 \text{ кА}$ ;  $\tau = 120 \text{ нс}$ , формы импульсов ускоряющего напряжения и плотности ионного тока соответствовали данным, приведенным в [9].

Традиционные представления о динамике процессов, определяющих генерацию импульса механического возмущения вблизи облучаемой поверхности, основываются на следующих положениях:

- энергосвободное в пограничной области обуславливает повышение давления;
- отрицательный градиент давления на границе области энергосвободного определяет рост массовой скорости вещества в положительном направлении оси  $z$ :
 
$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial z} = - \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial z};$$
- положительное направление массовой скорости, в свою очередь, обуславливает повышение плотности и сжатие вещества на границе области энергосвободного;

развитие этих процессов во времени определяет формирование волны сжатия, распространяющейся в глубь мишени;

разгрузка вещества на свободную поверхность вызывает формирование волны разрежения, которая распространяется вслед за импульсом сжатия.

Такое поведение вещества вблизи облучаемой поверхности наблюдается в численных экспериментах, когда в уравнении движения не учитываются компоненты дивергенции напряжений (рис. 1, 2).

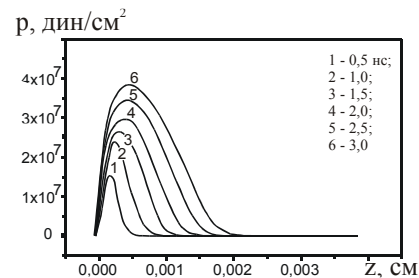


Рис. 1. Динамика импульса давления на начальном этапе воздействия МИП на алюминиевую мишень

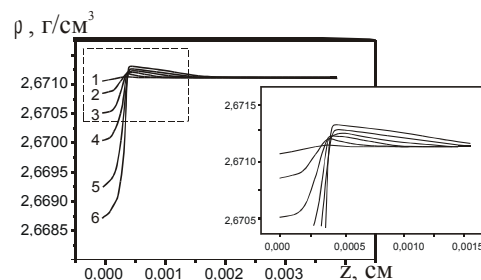


Рис. 2. Динамика изменения плотности вещества вблизи облучаемой поверхности

Результаты моделирования, полученные в рамках модели, в которой учитываются все составляющие тензора напряжений, отличаются от представленных выше. Увеличение давления в области энергосвободного вызывает разгрузку вещества на свободную поверхность. В самом начале взаимодействия (первые наносекунды) размер области энергосвободного составляет 3...5 мкм, так как ускоряющее напряжение (следовательно, и энергия ионов) еще только нарастает и в этот момент составляет величину порядка 100...200 кэВ. Разрежение при разгрузке вещества обуславливает положительный рост осевого компонента дивергенции напряжений. Последний определяется законом Гука и растет быстрее, чем давление вследствие нагрева вещества (рис. 3).

В уравнении движения отрицательный градиент осевого компонента дивергенции обуславливает рост скорости в направлении, обратном оси координат:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial z} = - \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial z} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial S_z}{\partial z}$$

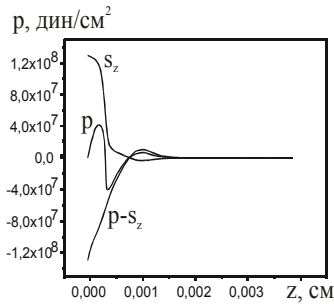


Рис.3. Сравнение давления и осевого компонента девиатора напряжений (2 нс после начала взаимодействия) движения

В результате, на границе области энерговыделения вещество расширяется, и формируется волна разрежения. При тщательном рассмотрении результатов моделирования (рис. 4, 5) впереди волны разрежения можно обнаружить импульс сжатия. Но последний мал как по амплитуде, так и по времени. Причем его параметры зависят от шага по времени, следовательно, наблюдаемый импульс сжатия – это счетный эффект, определяемый дискретностью конечной разностной модели.

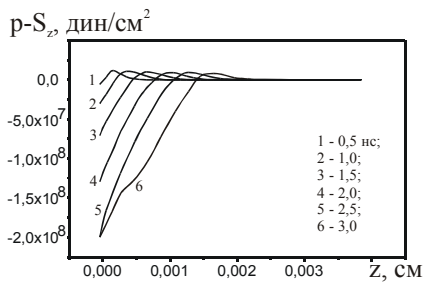


Рис.4. Динамика импульса полного давления на начальном этапе взаимодействия при учете девиатора напряжений в уравнении

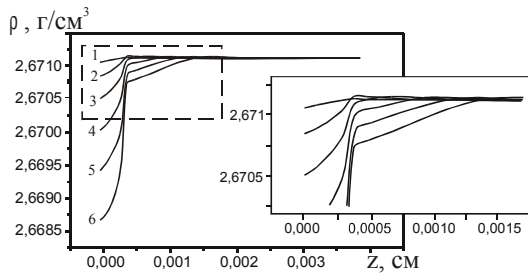


Рис.5. Динамика изменения плотности вещества вблизи облучаемой поверхности при учете девиатора напряжений в уравнении движения

Таким образом, за границей области энерговыделения наблюдается «холодное» разрежение вещества, при котором упругая составляющая давления отрицательна и по модулю превышает тепловую. С учетом осевой компоненты девиатора напряжения полное давление в начале формирующегося импульса отрицательно.

Представленные результаты получены с помощью эйлеровой модели динамики сплошной среды. Нам не удалось получить устойчивого численного решения при моделировании распространения импульса механических возмущений в глубь мишени. Поэтому для рассмотрения генерации и эволюции волновых процессов в объеме металла использовалась лагранжева модель, базирующаяся на методе Годунова. Закономерности, наблюдаемые при численном моделировании системы «МИП-металл», можно резюмировать следующим образом (рис. 6)

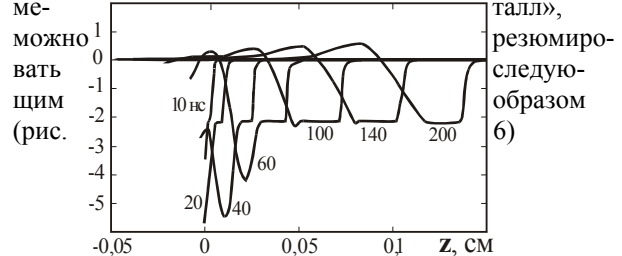


Рис.6. Генерация импульса механического возмущения в алюминиевой мишени при воздействии МИП

1. Вблизи облучаемой поверхности вследствие воздействия МИП генерируется биполярный импульс, имеющий в первом полупериоде волну разрежения и волну сжатия – во втором.
2. Полупериод разрежения обусловлен разгрузкой вещества на облучаемую поверхность, что связано с приповерхностным характером поглощения энергии МИП и упругим межатомным взаимодействием в металле.
3. Нарушение межатомных связей при интенсивном расширении вещества, а также распространение тепловой волны из области энерговыделения в глубь мишени определяют формирование второго полупериода сжатия.
4. При превышении амплитуды давления (напряжения) предела упругости происходит расщепление импульса разрежения на две волны – упругую и пластическую. Упругая волна обладает большей скоростью и опережает пластическую. Формируется устойчивая конфигурация двух волн.
5. Распространение в объеме металла пластической волны сопровождается диссипативными процессами и наблюдается ее вырождение. Глубина вырождения составляет порядка 50...100 мкм и зависит от плотности мощности МИП.

Полученные результаты моделирования процесса генерации механического возмущения вблизи облучаемой поверхности хорошо согласуются с результатами, полученными в эксперименте, как по форме биполярного возмущения, так и по амплитудно-временным параметрам импульса [10]. Однако при описании процессов формирования и разлета газоплазменного облака, образующегося на поверхности мишени, точность результатов, полученных в рамках лагранжевой модели, невысока. Это обусловлено большой деформацией лагранжевых ячеек при пересчете на эйлерову сетку.

## 5. ВЫВОДЫ

1. Численное описание многопараметрической системы «КПЭ – металл» требует учета всей совокупности взаимообусловленных процессов, протекающих в области энерговыделения, в объеме металлической мишени. В том числе, необходимо учитывать все составляющие тензора напряжений, характеризующие упругие и пластические свойства твердого тела.
2. Сильно меняющиеся параметры состояния металлов в конденсированном веществе определяют неустойчивость численного решения уравнений, записанных в рамках формализма Эйлера. Численные схемы, построенные на уравнениях в форме Лагранжа, обладают большей устойчивостью, но имеют неудовлетворительную точность при моделировании процессов в газоплазменном факеле, образующемся на поверхности мишени. Приемлемым, на наш взгляд, является следующий подход. Исследовать динамику процессов генерации импульсов механического возмущения и их эволюцию в объеме мишени в рамках лагранжевых моделей. При образовании на поверхности мишени газоплазменного факела описание динамики его разлета можно выделить в отдельную задачу и решать ее в рамках уравнений в форме Эйлера.
3. Предложен новый подход к постановке начальных и граничных условий, который основывается на использовании энергетического критерия стационарного состояния системы. Это позволило корректно описать процесс адиабатического разрежения вещества от возбужденного до стационарного состояния и определить параметры в фиктивных ячейках, в том числе скорость движения границы.
4. Приповерхностный характер энерговыделения в системе «МИП – металл» обуславливает значимую роль процесса разгрузки вещества на облучаемую поверхность, который определяет первоначальную фазу разрежения в биполярном импульсе, генерируемом в пограничной области. Разгружающееся на переднюю границу вещество приобретает кинетическую энергию и начинает двигаться навстречу пучку, увлекая за собой посредством действия межатомных сил внутренние области мишени, неподверженные энергетическому воздействию.
5. Развитие фазовых переходов, сопровождающихся нарушением межатомных связей и распространением тепла из области энерговыделения, определяют формирование второго полупериода сжатия.

Амплитудные параметры во фронте импульсного возмущения, генерируемого у облучаемой поверхности при воздействии МИП с плотностью мощности, большей чем  $10^7$  Вт/см<sup>2</sup>, превышают напряжение пластических деформаций. Во фронте волны могут протекать необратимые структурные изменения, вызывающие модификацию свойств металла. Диссипативные процессы при пластических деформациях обуславливают вырождение пластической волны. Глубина вырождения составляет 50...100 мкм для ионных пучков длительностью порядка 100 нс.

## ЛИТЕРАТУРА

1. Б.А. Калинин. Перспективные радиационные технологии в материаловедении // *Инженерная физика*. 1999, № 1.
2. О.М. Белоцерковский, Ю.М. Давыдов. *Метод крупных частиц в газовой динамике*. М.: «Наука», 1982, 392 с.
3. Г.А. Блейхер, В.П. Кривококов, О.В. Пашенко. *Тепломассоперенос в твердом теле под воздействием мощных пучков заряженных частиц*. Новосибирск: «Наука», 1999, 176 с.
4. Р. Рихмайер, К. Мортон. *Разностные методы решения краевых задач*. М.: «Мир», 1972.
5. О.М. Белоцерковский. *Численное моделирование в механике сплошных сред*. М.: «Наука», 1984.
6. Л.М. Бреховский, В.В. Гочаров. *Введение в механику сплошных сред*. М.: «Наука», 1982.
7. Ф.А. Баум, В.П. Орленко, К.П. Станюкович и др. *Физика взрыва* / Под ред. К.П. Станюковича. М.: «Наука», 1975.
8. Я.Б. Зельдович, Ю.П. Райзер. *Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений*. М.: «Наука», 1966.
9. В.М. Быстрицкий, В.И. Бойко, С.Н. Волков и др. Генерация и фокусировка мощного ионного пучка в магнитоизолированном диоде // *Физика плазмы*. 1989, т. 15, вып. 11, с. 1337.
10. В.И. Бойко, И.В. Шаманин, К.В. Юшицин и др. Описание ударного нагружения металла импульсным ионным пучком в совмещенной упругой гидродинамической модели // *ФиХОМ*. 1997, №2, с. 5–11.

## ЧИСЛОВИЙ ОПИС ПРОЦЕСІВ ГЕНЕРАЦІЇ ХВИЛЬОВОГО ЗБУРЕННЯ, ОБУМОВЛЕНОГО ВПЛИВОМ НА МЕТАЛЕВУ МІШЕНЬ ІМПУЛЬСНОГО ЕНЕРГЕТИЧНОГО ПОТОКУ

*В.І. Бойко, Ю.В. Данейкін, К.В. Юшицін*

Представлені результати моделювання за допомогою формалізму Ейлера динаміки параметрів алюмінієвої мішені під впливом потужного іонного пучка. Запропоновано новий підхід до поставлення початкових та граничних умов, заснований на використанні енергетичного критерію стаціонарного стану системи.

## NUMERICAL DESCRIPTION OF WAVE DISTURBANCE PROCESSES CAUSED BY PULSED ENERGY FLOW EFFECT ON THE METAL TARGET

*V.I. Boyko, U.V. Daneykin, K.V. Ushitsin*

The results of Euler formalism simulation of aluminium target parameters under the intensive ion beam effect are presented. The new approach to the formulation of initial and terminal conditions is proposed; this approach is based on the use of stationary system state energy criterion.

